

簡介化學平衡式計算器

林進成

臺中縣立神圳國民中學

壹、前言

目前在中等學校的理化課程中，有關於化學方程式的平衡部分，一般的國中老師通常是以傳統板書的方式講授觀察法(Observational Method)，高中老師則會再加上代數法(Algebraic Method)、氧化數變化法(Oxidation Number Change Method)等(王忠茂等四人，2004，pp.87)，即使現今的教學環境和幾十年前有很大的不同，也很少有理化老師會從事電腦輔助教學(Computer Assisted Instruction，簡稱 CAI)的活動，換句話說，以傳統板書為主的教學現象幾十年來沒有太大的改變，之所以如此，部分原因來自於硬體的不足，部分原因則來自於軟體的缺乏。

理化教師自然無法克服硬體不足的難題，但卻能改善軟體缺乏的困境，方法之一是先行設計教學程式(或教學軟體)，等將來教學設備比較齊全的時候就能派上用場，一切水到渠成；化學平衡式計算器(Balanced Equation Calculator，簡稱 BEC)(Jin-Cherng Lin，2006)便是這種理念下的產物。

不過 BEC 的設計原理主要建立在線性代數(Linear Algebra)的基礎上，比較適合教導具有一定數學程度的國中資優班學生和高中理工組學生，如果貿然在一般國

中的普通班講授，可能會造成學生越聽越困惑、越學越難過的後果，甚至在化學平衡式的教學單元形成個人的學習障礙，這樣反而失去科學教育的意義，因此老師在使用時要特別地謹慎。

貳、條件

一個實用而不被時間淘汰的 BEC 至少應該具備以下三個條件：

一、設計平台必須常見而且容易取得

這裡所謂的「設計平台」指的是設計 BEC 時使用的軟體或語言，如果設計平台罕見而且不易取得，不僅會造成設計者的困擾，也容易降低使用者的意願。例如 Mathematica 這種專業軟體雖然可以當作 BEC 的設計平台，卻很少安裝在一般的個人電腦，所以即使利用 Mathematica 設計的 BEC 功能非常強大，恐怕也將英雄無用武之地，但是以 Excel 設計的 BEC 就沒有這方面的顧慮。

二、操作介面必須簡單而且容易瞭解

這裡所謂的「操作介面」係指操作 BEC 時的螢幕畫面，此因 BEC 主要的服務對象是中等學校的理化教師和學生，如果操作介面看起來很複雜，甚至操作時還

必須進行一些不易理解的設定，恐怕會讓使用者望之卻步。BEC 其實就是一個黑盒子(Black Box)，學生並不需要完全了解其中的原理才被允許操作，只要操作時感覺容易順手，操作後結果迅速正確即可。在師生互動方面，理化老師可以不啟不發，除非學生想一窺堂奧又程度尚可，否則不必主動告知原理以免揠苗助長，而原理的講授不妨參考下文。

三、適用範圍必須廣泛而且運算正確

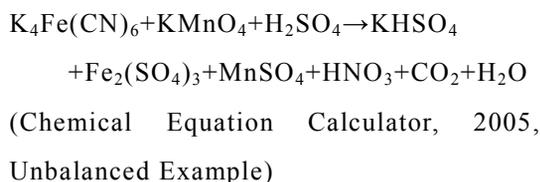
這是因為化學方程式的形式眾多，如果 BEC 只能解決其中幾種的平衡問題，其他則無能為力，不但實用性不高，必要性也不大。

參、原理

如果將反應物和產物合稱為物種(Species)，則一般化學方程式可以分成三類：

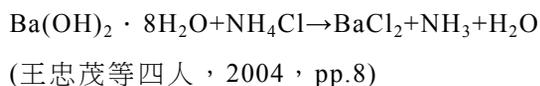
(1)物種的數目多於元素的數目。

例如：



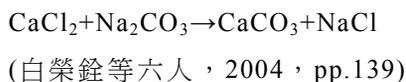
(2)物種的數目等於元素的數目。

例如：



(3)物種的數目少於元素的數目。

例如：



除了極少數例外，當物種的數目不等於元素的數目時，如(1)和(3)，兩種數目的差額通常只等於 1，這種現象對 BEC 的設計來說有些麻煩，但可以克服。

現在以未平衡的化學方程式 $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2 + \text{C} + \text{SiO}_2 \rightarrow \text{CaSiO}_3 + \text{CO} + \text{P}_4$ (王忠茂等四人，2004，pp.128)為例，簡單地說明 BEC 的設計原理；若 X_1 、 X_2 、 X_3 、 \dots 等代表各物種的平衡係數，則各物種和組成元素間的對應關係如表一：

表一： $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2 + \text{C} + \text{SiO}_2 \rightarrow \text{CaSiO}_3 + \text{CO} + \text{P}_4$ 分析表

物種 元素	$\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ X_1	C X_2	SiO_2 X_3	CaSiO_3 X_4	CO X_5	P_4 X_6
Ca	3	0	0	1	0	0
P	2	0	0	0	0	4
O	8	0	2	3	1	0
C	0	1	0	0	1	0
Si	0	0	1	1	0	0

利用原子說(Atomic Theory)和簡單的代數，可以得到以下的關係：

$$3X_1 + 0X_2 + 0X_3 = 1X_4 + 0X_5 + 0X_6$$

$$2X_1 + 0X_2 + 0X_3 = 0X_4 + 0X_5 + 4X_6$$

$$8X_1 + 0X_2 + 2X_3 = 3X_4 + 1X_5 + 0X_6$$

$$0X_1 + 1X_2 + 0X_3 = 0X_4 + 1X_5 + 0X_6$$

$$0X_1+0X_2+1X_3 = 1X_4+0X_5+0X_6$$

將這些關係整理成齊次方程組(A Set of Homogeneous Equations)：

$$\begin{cases} 3X_1 + 0X_2 + 0X_3 - 1X_4 - 0X_5 - 0X_6 = 0 \\ 2X_1 + 0X_2 + 0X_3 - 0X_4 - 0X_5 - 4X_6 = 0 \\ 8X_1 + 0X_2 + 2X_3 - 3X_4 - 1X_5 - 0X_6 = 0 \\ 0X_1 + 1X_2 + 0X_3 - 0X_4 - 1X_5 - 0X_6 = 0 \\ 0X_1 + 0X_2 + 1X_3 - 1X_4 - 0X_5 - 0X_6 = 0 \end{cases}$$

由於齊次方程組只有一個零解(A Trivial Solution)，即 X_1 、 X_2 、 X_3 . . . 等均為 0，這種結果無濟於 BEC 的設計，因此必須加以轉型。如果令 $X_6 = 1$ ，那麼原先的齊次方程組將轉型為非齊次方程組 (A Set of Non-Homogeneous Equations)：

$$\begin{cases} 3X_1 + 0X_2 + 0X_3 - 1X_4 - 0X_5 = 0 \\ 2X_1 + 0X_2 + 0X_3 - 0X_4 - 0X_5 = 4 \\ 8X_1 + 0X_2 + 2X_3 - 3X_4 - 1X_5 = 0 \\ 0X_1 + 1X_2 + 0X_3 - 0X_4 - 1X_5 = 0 \\ 0X_1 + 0X_2 + 1X_3 - 1X_4 - 0X_5 = 0 \end{cases}$$

假設 $A = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 8 & 0 & 2 & -3 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$ ，

$$X = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \\ X_5 \end{pmatrix}, C = \begin{pmatrix} 0 \\ 4 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

則 $A \cdot X = C$

$$\text{可推得 } X = A^{-1} \cdot C = \frac{1}{[A]} \cdot (\text{adj}A) \cdot C$$

其中 A^{-1} 為 A 的反矩陣 (Inverse Matrix)， $[A]$ 為 A 的行列式 (Determinant)， $\text{adj}A$ 則為 A 的伴隨矩陣 (Adjoint Matrix)。

因為齊次方程組已轉型為非齊次方程組，方程式的數目等於未知數的數目， $[A]$ 的行列式值也不等於 0，所以非齊次方程組將有唯一解，此時平衡係數已經呼之欲出，但若繼續推演則可得克蘭默法則 (Cramer's Rule) (Otto Bretscher, 2005, pp.284-287; Rober G. Mortimer, 1999, pp.293-295)，這個法則讓 BEC 的設計更加靈活自由。

以 $[A_1]$ 、 $[A_2]$ 、 $[A_3]$. . . 等代表 A_1 、 A_2 、 A_3 . . . 等的行列式：

$$[A] = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 8 & 0 & 2 & -3 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$[A_1] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & -3 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$[A_2] = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 2 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 8 & 0 & 2 & -3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$[A_3] = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 2 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 8 & 0 & 0 & -3 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$[A_4] = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 4 & 0 \\ 8 & 0 & 2 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$[A_5] = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 4 \\ 8 & 0 & 2 & -3 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

依克蘭默法則：

$$X_1 = \frac{[A_1]}{[A]}, X_2 = \frac{[A_2]}{[A]}, X_3 = \frac{[A_3]}{[A]},$$

$$X_4 = \frac{[A_4]}{[A]}, X_5 = \frac{[A_5]}{[A]}, X_6 = 1$$

因為上述部分係數可能以分數的形式呈現，不符合一般人對平衡係數的認知，所以將它們變形為：

$$X_1^* = [A_1], X_2^* = [A_2], X_3^* = [A_3],$$

$$X_4^* = [A_4], X_5^* = [A_5], X_6^* = [A]$$

如果 g 代表 X_1^* 、 X_2^* 、 X_3^* 、 \dots 等的最大公因數(Greatest Common Divisor or Highest Common Factor)，即 $g = \text{gcd}(X_1^*, X_2^*, X_3^*, X_4^*, X_5^*, X_6^*)$ ，那麼平衡係數的最終形式為：

$$X_1 = \frac{[A_1]}{g}, X_2 = \frac{[A_2]}{g}, X_3 = \frac{[A_3]}{g},$$

$$X_4 = \frac{[A_4]}{g}, X_5 = \frac{[A_5]}{g}, X_6 = \frac{[A]}{g}$$

Excel 儲存格的排列方式，很適合用來進行矩陣或行列式的運算，因此可以利用 Excel「函數」中和矩陣、行列式相關的一些指令進行 BEC 的設計。不過如果利用的指令是和矩陣相關，設計者可能會要求使用者在操作介面上進行一些設定，這是因為 Excel 的矩陣指令僅適用於方陣(Square Matrix)，當化學方程式的物種數目不等於元素數目時，所有的數字資料將無法表列成方陣的形式，自然必須進行一些設定(或調整)來符合要求，這種半手動的操作方式雖然不會影響運算結果，但多少增添一些使用上的麻煩。如果改用和行列式相關的指令進行設計，這些困擾就可以避免；前例中最後一個產物的係數被指定為 1 時，原本對程式設計阻礙甚烈的齊次方程組(六個方程式、五個未知數、一個零解)，會轉型為助益良多的非齊次方程組(五個方程式、五個未知數、一個非零解)，再經克蘭默法則的行列式運算，其他物種的係數便陸續地被求出，這個由阻力轉為助力的發展關鍵在於一開始的指定，而指定在程式內部直接宣告即可，設計者可以不必要求使用者在操作介面上進行任何的設定。

表二最左邊一欄的數字和最上面一

列的英文字母，分別代表各儲存格的列數和欄號，在未平衡的化學方程式中，所有物種和組成元素的資料可以在適當的儲存格填入，這種形式的分析表也應用在 BEC 的操作介面上。

如果 D3 到 F3、I3 到 K3、C4 到 C8 等儲存格已分別填入反應物的名稱、產物的名稱以及組成元素的名稱，而 D4 到 F8、I4 到 K8 等儲存格也已填入組成元素的數目，那麼將之前的[A]、[A₁]、[A₂]……等行列式和表二進行比對，不難看出當使用者完成這些資料的填寫，其實已經為程式設計中的[A]、[A₁]、[A₂]……等行列式作了初步的安排和準備，也就是說表二中的數字，已經替程式設計裏[A]、[A₁]、[A₂]……等行列式的項(Elements or Entries)打下基礎，設計者根本不需進行大量的資料轉換或建立複雜的資料關聯。

肆、設計

程式設計的流程可以分成四個階段：

- (1) 將儲存格 I4 到 J8 的數字進行變號，其他儲存格的數字則不作變動。
- (2) 利用「函數」中 IF、AND 兩種指令和 (1) 的處理結果，在其他位置的儲存格進行[A]、[A₁]、[A₂]……等行列式的模擬或重建。
- (3) 利用「函數」中 MDETERM 指令計算所有行列式的值。
- (4) 利用「函數」中 IF、AND、MOD 等三種指令設計一個可以求出 g 的小程式。(Excel 的「函數」中並無內建的 GCD 指令，雖然可以經由二次安裝而外加進來，但在使用上總覺不便，所以有必要自行設計一個可以求出最大公因數的小程式，並安置在 BEC 的內部設計中。)

表二：Ca₃(PO₄)₂+C+SiO₂→CaSiO₃+CO+P₄ 在 BEG 操作介面上的分析表

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1														
2		元素	物種	反應物一	反應物二	反應物三	反應物四	反應物五	產物一	產物二	產物三	產物四	產物五	產物六
3				Ca3(PO4)2	C	SiO2			CaSiO3	CO	P4			
4		元素一	Ca	3	0	0			1	0	0			
5		元素二	P	2	0	0			0	0	4			
6		元素三	O	8	0	2			3	1	0			
7		元素四	C	0	1	0			0	1	0			
8		元素五	Si	0	0	1			1	0	0			
9		元素六												
10		元素七												
11		元素八												
12		元素九												
13		元素十												
14		平衡係數												
214														
215														

以上僅扼要地介紹 BEC 的設計流程，其實真正在進行 BEC 的設計時遇到的問題不少，不像上面描述的容易，例如 BEC 最多可以進行五個反應物和六個產物這種化學方程式的運算，最少可以處理一個反應物和兩個產物這種化學方程式的平衡，因此 BEC 中的任何一個行列式都必須具有可以呈現二階(Order)到十階共九種形式的的能力，這使得部分儲存格的隱含程式變得複雜，例如儲存格 B56 係用來計算[A₁]二階到八階的行列式值，利用 IF 和 MDETERM 兩種指令，隱含程式就必須寫成：=IF(\$C\$17=2,MDETERM(D55:E56),IF(\$C\$18=3,MDETERM(D55:F57),IF(\$C\$18=4,MDETERM(D55:G58),IF(\$C\$18=5,MDETERM(D55:H59),IF(\$C\$18=6,MDETERM(D55:I60),IF(\$C\$18=7,MDETERM(D55:J61),IF(\$C\$18=8,MDETERM(D55:K62),""))))))

又如計算最大公因數的儲存格共有 11 個，其中儲存格 D182 隱含程式的長度大約是儲存格 B56 隱含程式的四倍，由此

可見它們的複雜程度。

伍、應用

在教學應用方面，理化老師不僅能以 BEC 計算大部分化學方程式和半反應式的平衡係數，還能以它為基礎，延伸設計兩個全新的程式，進行化學計量(Stoichiometry)的教學演示，其中由反應物推論產物的程式稱為 BECRP(Jin-Cherng Lin, 2006)，而由產物推論反應物的程式則稱為 BECP(Jin-Cherng Lin, 2006)。不論那一種程式，只要使用者將正確資料填入指定的儲存格，無需進行任何設定，程式的操作介面便會在適當的儲存格快速地顯示使用者想知道的物種資料；如平衡係數、殘量、產量等。表三到表七是之前提過的三種化學方程式和一個典型半反應式經 BEC 處理的畫面，而以 BECRP 和 BECP 進行化學計量的教學演示部分則呈現在表八到表十一。

(一) 物種的數目多於元素的數目。

表三：K₄Fe(CN)₆+KMnO₄+H₂SO₄→KHSO₄+Fe₂(SO₄)₃+MnSO₄+HNO₃+CO₂+H₂O 在 BEC 操作介面上的分析表

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1														
2														
3		元素 物種	反應物一	反應物二	反應物三	反應物四	反應物五	產物一	產物二	產物三	產物四	產物五	產物六	
4		K ₄ Fe(CN) ₆	KMnO ₄	H ₂ SO ₄				KHSO ₄	Fe ₂ (SO ₄) ₃	MnSO ₄	HNO ₃	CO ₂	H ₂ O	
5		元素一 K	4	1	0			1	0	0	0	0	0	
6		元素二 Fe	1	0	0			0	2	0	0	0	0	
7		元素三 C	6	0	0			0	0	0	0	1	0	
8		元素四 N	6	0	0			0	0	0	1	0	0	
9		元素五 Mn	0	1	0			0	0	1	0	0	0	
10		元素六 O	0	4	4			4	12	4	3	2	1	
11		元素七 H	0	0	2			1	0	0	1	0	2	
12		元素八 S	0	0	1			1	3	1	0	0	0	
13		元素九												
14		元素十												
15		平衡係數	10	122	299			162	5	122	60	60	188	
214														Designed by J.C.Lin
215														
216														
217														

(二) 物種的數目等於元素的數目。

表四：Ba(OH)₂·8H₂O+NH₄Cl→BaCl₂+NH₃+H₂O 在 BEC 操作介面上的分析表

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1														
2	元素 \ 物種	反應物一		反應物二	反應物三	反應物四	反應物五	產物一	產物二	產物三	產物四	產物五	產物六	
3		A	NH ₄ Cl					BaCl ₂	NH ₃	H ₂ O				
4	元素一	Ba	1	0				1	0	0				
5	元素二	O	10	0				0	0	1				
6	元素三	H	18	4				0	3	2				
7	元素四	N	0	1				0	1	0				
8	元素五	Cl	0	1				2	0	0				
9	元素六													
10	元素七													
11	元素八													
12	元素九													
13	元素十													
14	平衡係數		1	2				1	2	10				
214	<i>Designed by J.C.Lin</i>													
215	A=Ba(OH) ₂ ·8H ₂ O													
216	A+2NH ₄ Cl→BaCl ₂ +2NH ₃ +10H ₂ O													
217														

(三) 物種的數目少於元素的數目。

表五：CaCl₂+Na₂CO₃→CaCO₃+NaCl 在 BEC 操作介面上的分析表

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1														
2	元素 \ 物種	反應物一		反應物二	反應物三	反應物四	反應物五	產物一	產物二	產物三	產物四	產物五	產物六	
3		CaCl ₂	Na ₂ CO ₃					CaCO ₃	NaCl					
4	元素一	Ca	1	0				1	0					
5	元素二	Cl	2	0				0	1					
6	元素三	Na	0	2				0	1					
7	元素四	C	0	1				1	0					
8	元素五	O	0	3				3	0					
9	元素六													
10	元素七													
11	元素八													
12	元素九													
13	元素十													
14	平衡係數		1	1				1	2					
214	<i>Designed by J.C.Lin</i>													
215														
216	CaCl ₂ +Na ₂ CO ₃ →CaCO ₃ +2NaCl													
217														

表六：CaCl₂+Na₂CO₃→CaCO₃+NaCl 在 BEC 操作介面上的錯誤分析表

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1														
2		元素	物種	反應物一	反應物二	反應物三	反應物四	反應物五	產物一	產物二	產物三	產物四	產物五	產物六
3				CaCl ₂	Na ₂ CO ₃				CaCO ₃	NaCl				
4		元素一	Na	0	2				0	1				
5		元素二	C	0	1				1	0				
6		元素三	O	0	3				3	0				
7		元素四	Ca	1	0				1	0				
8		元素五	Cl	2	0				0	1				
9		元素六												
10		元素七												
11		元素八												
12		元素九												
13		元素十												
14		平衡係數		0	0				0	0				
214														Designed by J.C.Lin
215														
216														
217														

當化學方程式的物種數目等於四時，以分析表中前三列的數字作為運算資料，便可利用 BEC 程式中的三階行列式找出平衡係數，因為表五和表六在組成元素的排序方面不一樣，造成 BEC 運算時的資料不同，自然最後的運算結果就會有所差異，而出現在操作介面的平衡係數全為 0，如表六，主要是三種原因所致：

- BEC 行列式中某一行或某一列的數字全為 0。
- BEC 行列式中任兩行或任兩列的數字相等。
- BEC 行列式中任兩行或任兩列的數字成比例。

此時只要進行第二次的操作，變動組成元素的排序，如表五，就可以排除這個怪異的結果。

(四) 半反應式。

將半反應 $e^- + \text{MnO}_4^- + \text{H}^+ \rightarrow \text{Mn}^{2+} + \text{H}_2\text{O}$ (王忠茂等四人，2004，pp.95) 中各物種的電荷數(或價數，以 vl. 表示)視為組成元素，有助於 BEC 的計算。

(五) 利用 BECRP 進行由反應物推論產物的化學計量。

以眾所皆知的哈柏法(Haber Process) (王忠茂等四人，2004，pp.106) 為例，如表八所示，只要在儲存格 F268 和 F269 兩處填入代表氮氣質量和氫氣質量的任意數字，BECRP 便能快速地在儲存格 K298 以下的地方，顯示氮氣、氫氣、氨氣等所有物種的殘量和產量，如表九所示，並在 282 列以星號指出何者為限定反應物(Limiting Reactant)。當然適合以 BECRP 進行分析和計算的化學方程式，最多可以有五個反應物和六個產物，因此從事一般化學計量的教學演示應該不成問題。

因為 BECRP 不僅條列式地顯示計算結果，也條列式地呈現計算過程，所以如果教學設備齊全，理化老師不但可以利用筆記型電腦和高射投影機 (Overhead Projector)，行雲流水般地進行化學計量的教學演示，還可以將授課內容列印給學生。換句話說，BECRP 不僅可以深化學生的學習，也可以強化學生的複習，當然多少也能減輕老師的備課負擔，以及免除授課時粉飛灰揚之苦。

(六) 利用 BECRP 進行由產物推論反應物的化學計量。

以一般國中理化課本裏常見的高爐煉鐵反應 $Fe_2O_3 + CO \rightarrow Fe + CO_2$ (尤丁玫等十七人，2004，pp.44) 為例，如表十所示，只要在儲存格 E268 和 H268 兩處分別填入預期產物的名稱和產量，BECRP 便會快速地在 K288 儲存格以下的地方顯示所有反應物的需求量，並條列式地呈現整個計算過程，如表十一所示。

表七： $e^- + MnO_4^- + H^+ \rightarrow Mn^{2+} + H_2O$ 在 BEC 操作介面上的分析表

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1														
2				反應物一	反應物二	反應物三	反應物四	反應物五	產物一	產物二	產物三	產物四	產物五	產物六
3				e[-]	MnO4[-]	H[+]			Mn[2+]	H2O				
4			元素一	-1	-1	1			2	0				
5			元素二	0	1	0			1	0				
6			元素三	0	4	0			0	1				
7			元素四	0	0	1			0	2				
8			元素五											
9			元素六											
10			元素七											
11			元素八											
12			元素九											
13			元素十											
14			平衡係數	5	1	8			1	4				
214														Designed by J.C.Lin
215														
216														
217														

表八： $N_2 + H_2 \rightarrow NH_3$ 在 BECRP 操作介面上的分析表(上半部)

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1														
2				反應物一	反應物二	反應物三	反應物四	反應物五	產物一	產物二	產物三	產物四	產物五	產物六
3				N2	H2				NH3					
4			元素一	2	0				1					
5			元素二	0	2				3					
6			元素三											
7			元素四											
8			元素五											
9			元素六											
10			元素七											
11			元素八											
12			元素九											
13			元素十											
14			平衡係數	1	3				2					
16			總原子量	28	2				17					
216														Designed by J.C.Lin
217														
267														
268	(1)		N2	的質量=	56	g	,		N2	的總原子量=	28			
269			H2	的質量=	4	g	,		H2	的總原子量=	2			
270														

表九：N₂+H₂→NH₃ 在 BECRP 操作介面上的分析表(下半部)

281														
282	(3)	★	限定反應物	=	H ₂									
283														
284				N ₂	+	3H ₂	→	2NH ₃						
285														
286			反應前(mol)	2.00		2.00								
287														
288			反應中(mol)	-0.67		-2.00		1.33						
289			=====											
290			反應後(mol)	1.33		0.00		1.33						
291														
294			反應後(g)	37.33		0.00		22.67						
295														
296	(4)	∴	質量	=	莫耳數	·	總原子量							
297														
298		∴	N ₂	的剩餘質量=	1.33	·	28	=	37.33	g				
299			H ₂	的剩餘質量=	0.00	·	2	=	0.00	g				
300														
301														
302														
303			NH ₃	的生成質量=	1.33	·	17	=	22.67	g				
304														

表十：Fe₂O₃+CO→Fe+CO₂ 在 BECPR 操作介面上的分析表(上半部)

1														
2														
3	元素	物種	反應物一	反應物二	反應物三	反應物四	反應物五	產物一	產物二	產物三	產物四	產物五	產物六	
4			Fe ₂ O ₃	CO				Fe	CO ₂					
5	元素一	Fe	2	0				1	0					
6	元素二	O	3	1				0	2					
7	元素三	C	0	1				0	1					
8	元素四													
9	元素五													
10	元素六													
11	元素七													
12	元素八													
13	元素九													
14	元素十													
15	平衡係數		1	3				2	3					
16	總原子量		160	28				56	44					
216														Designed by J.C. Lin
217														
267														
268	(1)	預期產物	Fe	的預期產量=	168	g	,	Fe	的總原子量=	56				
269														
270		∴	莫耳數	=	質量	/	總原子量							
271														

表十一：Fe₂O₃+CO→Fe+CO₂ 在 BECPR 操作介面上的分析表(下半部)

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
273														
274	(2)				Fe ₂ O ₃	+	3CO	→	2Fe	+	3CO ₂			
275														
276				反應前(mol)	1.50		4.50							
277														
278				反應中(mol)	-1.50		-4.50		3.00		4.50			
279				=====										
280				反應後(mol)	0.00		0.00		3.00		4.50			
281														
284				反應後(g)	0.00		0.00		168.00		198.00			
285														
286	(3)	∴	質量	=	莫耳數	·	總原子量							
287														
288		∴	Fe ₂ O ₃	的應有質量=	1.50	·	160	=	240.00		g			
289			CO	的應有質量=	4.50	·	28	=	126.00		g			
290														
291														
292														
293		★	Fe	的生成質量=	3.00	·	56	=	168.00		g			
294			CO ₂	的生成質量=	4.50	·	44	=	198.00		g			
295														

陸、限制

雖然 BEC 可以解決大部分化學方程式的平衡問題，但仍有兩種先天上的限制無法突破：

一、學理上的限制

當化學方程式的物種數目 = 元素的數目 + 2 時，就算指定最後一個產物的係數為 1，讓齊次方程組變為非齊次方程組，因為方程式的數目仍然不等於未知數的數目，也沒有辦法取得唯一解，所以 BEC 無法處理如 $KI + O_3 + H_2O \rightarrow KOH + I_2 + O_2$ (陳國成, 1979, pp.289) 這類的化學方程式，即使像 Chemical Equation Expert (v.2.11, Last Update: 2/14/2005) 或 Chemical Equation Calculator (Jeff Larsen, Last Update: 11/16/2005) 這種專業的國外軟體也同樣束手無策。(其實利用觀察法便可輕易地平衡上述化學方程式)

二、系統上的限制

由於 Excel 不是文書處理軟體，無法像 Word 具有打印字體上下標的功能，因此打印硫酸的化學式時，只能以 H₂SO₄ 代替 H₂SO₄，形成一種化學式的特殊寫法。

柒、結語

雖然 BEC、BECRP、BECPR 仍有兩種先天上的限制無法突破，但是像「物種數目 = 元素數目 + 2」一類的化學方程式其實不多，而無法在螢幕上打印正規的化學式，對程式(或軟體)的運算功能也沒有影響，因此上述兩種限制對 BEC、BECRP、BECPR 在教學上的應用不會構成困擾。

和 BEC 一樣，目前具備化學方程式平原理從事程式設計，但也都面臨相同的難題，即因自然界的化學反應量多類繁，囿於學理上的限制而無法在平衡係數上，對所有化學方程式進行絕對正確的計算，又

因這些國外軟體有的為國際間的學術研究提供免費服務(如 Chemical Equation Calculator)，有的則屬必須花錢購買的國際化商品(如 Chemical Equation Expert)，故其操作介面的語言全為英文，對本地中等學校仍以中文進行理化科教學活動的老師和學生來說並不受用。

BEC、BECRP、BECPR 都是免費的教學程式(下載處見文末參考資料)，特點計有：

- (1) 可以中文化程式的操作介面。
- (2) 可以計算反應式的平衡係數。
- (3) 可以進行化學計量的教學演式。
- (4) 可以列印教學課程的演示內容。
- (5) 可以擴展程式設計的既有內涵。

其中第五項係因以 BEC 為基礎而進行延伸設計的程式，將能應用在反應商(Reaction Quotient)、平衡常數(Equilibrium Constant)、溶度積常數(Solubility Product Constant)、還原電位(Reduction Potential)等和化學平衡式息息相關的教學單元上。

像 BEC、BECRP、BECPR 這類的教學程式，均以最容易取得和最容易入門的 Excel 作為設計語言，任何一位理化老師只要有志於電腦輔助教學的研究與開發，並肯用心學習程式設計，都能利用 Excel 製作出比 BEC、BECRP、BECPR 更傑出、更實用的教學程式。

參考資料

- 王忠茂、邱智宏、翁春和、葉名倉(2004)：高級中學物質 科學化學篇二年級下冊。台南市：南一。
- 尤丁玫等十七人(2004)：國民中學自然與生活科技第六冊。台北市：康軒。
- 白榮銓等六人(2004)：國民中學自然與生活科技第三冊。台南市：南一。
- 陳國成(1979)：化學原理與計算法。台北市：開明。
- Otto Bretscher(2005). *Linear Algebra with Applications*(3rd ed.). Upper Saddle River NJ07458: Pearson Prentice Hall.
- Rober G. Mortimer(1999). *Mathematics for Physical Chemistry*(2nd ed.). San Diego:a division of Harcourt Brace & Company.
- Educationsoft. net. (2005). *Chemical Equation Expert v.2.11*. Retrieved April 12, 2006, from http://www.educationsoft.net/chemical_equation_expert/index.html.
- Jeff Larsen. (2005). *Chemical Equation Calculator*. Retrieved April 12, 2006, from <http://www.rose-hulman.edu/~larsenjs/balance.htm>.
- Jin-Cherng Lin. (2006). *Balanced Equation Calculator*. Retrieved April 12, 2006, from <http://www.szjh.tcc.edu.tw/>.