

熱化學反應方程式：書寫和表述

文·圖 | 阮邦球 劉靜文

前言

能源是社會和科技的熱門話題。熱化學是化學與能源的交匯點，它包括一系列理論探究與科技應用。在化學教學方面，熱化學是值得我們作進一步介紹和討論的主題。

1. 熱化學 (thermochemistry)

熱化學屬於物理化學，是研究化學反應及其相關物理反應的熱變化。反應可能是釋放或吸收能量。能量 (energy) 是功 (work) 和熱 (heat) 的總和。能量的國際單位 (SI unit) 是焦耳 (簡稱焦; Joule)，而健康科學和食品科學中廣泛使用卡路里 (calorie) 為熱量單位。熱化學通常包括燃燒熱、生成熱等熱量計算。

能量公式：能量 = 功 + 熱

熱化學關注系統與周圍環境的能量，就熱量交換如圖 1 所示，進入系統的熱量為正 (+)，流出系統的熱量為負 (-)。就功而言，周圍環境對系統做功為負值 (-)，系統對周圍環境做功為正值 (+)。

$Q(+)$ ----- > 系統 ----- > $Q(-)$

圖 1

2. 熱化學反應方程式 (thermochemical equation)

熱化學方程式是表示化學反應中物質變化和能量變化的化學語言。熱化學方程式的意義不僅表明了一個反應中所涉及的反應物和生成物，還呈現一定量的物質在反應過程中所放出或吸收的熱量。



2.1 書寫

熱化學反應方程式的書寫必須包括物質的物理狀態和反應條件。不同物質具有不同的熱量，同樣物質在不同物理狀態下擁有不同的熱量，而反應熱亦與溫度和壓強等測定條件相關。

各物質化學式右側用圓括弧 () 表明物質的物理狀態，分別用 g、l、s 代表氣態、液態、固態，而水溶液中的溶解物質，則以 aq 表示。書寫熱化學方程式時必須指明物質的物理狀態，和反應時的溫度和壓強。若是標準狀態 (standard state)，即溫度為 25 °C、氣壓為 1 大氣壓力 (atm) 時，可以不注明。 $\Delta H^\circ_{\text{反應}}$ ($\Delta H^\circ_{\text{reaction}}$) 代表標準狀態下的熱量變化。

2.2 特點

化學方程式描述物質守恒的科學事實，而熱化學方程式必須同時服從質量守恒法則和能量守恒法則。質量守恒法則是指反應前後原子種類和原子數目保持不變，這意味着反應前後的質量保持不變。能量守恒法則是指能量不能被創造，也不能被毀滅，只能被轉化，意則反應前後能量保持不變。釋放能量的反應稱為放熱反應，而吸收能量的反應稱為吸熱反應。

2.3 宏觀涵意

配平化學方程式的要求是確保反應中的所有物質，其係數必須以最簡單的整數比表示。宏觀而言，係數表示摩爾 (mole)；而微觀的意義是描述粒子間的數目變化。以“ $2\text{H}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ ”為例，它是配平的、是正確的化學方程式，其宏觀的意義是 2 摩爾的氫氣和 1 摩爾的氧氣生成兩摩爾的水蒸氣；微觀是描述 2 個氫分子和 1 個氧分子生成兩個水蒸氣分子。

熱化學方程式中的係數只表示該物質的摩爾數，不表示物質分子個數或原子個數，因此，它可以是整數，也可以是分數。熱化學方程式，其係數可以容許以分數形式配平，“ $\text{H}_2(\text{g}) + 1/2\text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{g}) + \text{Q}$ ”，這僅僅代表宏觀物質的摩爾數關係，而不容許作微觀的

粒子性表述，若讀成“1個氫分子與半個氧分子生成1個水蒸氣分子”則是一種錯誤的描述。

3. 反應熱的測定和計算

化學反應的本質就是化學鍵的斷裂與生成，而舊化學鍵斷裂所吸收能量與新化學鍵生成所釋出能量的不同導致反應熱的變化。反應熱可用實驗方法來測定，其所用的裝置叫卡式熱量計、卡式計或熱量計。另外，還可以運用數據法計算反應熱。

數據法常運用兩種物理數據，其一是物質的生成熱 (ΔH_f 物質)，其二是鍵能。物質的生成熱和鍵能的物理單位同是千焦 / 摩爾 (kJ/mol)。

$$\Delta H_{\text{反應}} = \text{生成物總能量} - \text{反應物總能量} \quad (\text{式 1})$$

$$\Delta H_{\text{反應}} = \sum m\Delta H_f(\text{生成物}) - \sum n\Delta H_f(\text{反應物})$$

(m 是配平方程式各生成物的係數；n 是配平方程式各反應物的係數)

$$\Delta H_{\text{反應}} = \text{反應物中所斷裂化學鍵的總鍵能} - \text{生成物中所生成化學鍵的總鍵能} \quad (\text{式 2})$$

4. 熱化學反應方程式的表徵方法

4.1 反應焓的變化 (enthalpy change)



a, b, c, d：代表反應中各物質的係數，亦是物質的摩爾數

A, B, C, D：表示物質的化學式及其物理狀態

$\Delta H_{\text{反應}}$ 只能寫在化學方程式的右邊，若為放熱反應，則 $\Delta H < 0$ ， ΔH 為負值 (-)；若為吸熱反應，則 $\Delta H > 0$ ， ΔH 為正值 (+)。內地教科書採用的單位為千焦 / 摩爾 (kJ/mol)，而英語的教科書既有使用 kJ/mol，亦有使用 kJ 為單位。



4.2 反應熱，Q (heat)



Q 的單位是 J 或 kJ。若 Q 寫在化學方程式的右邊，則為放熱反應；若 Q 寫在化學方程式的左側，則為吸熱反應。



基於代數方程操作規則，若為吸熱反應，亦可寫成：



4.3 能量圖

反應熱可用坐標圖來表示，x- 軸代表反應過程和 y- 軸代表能量。圖 2 中所顯示的生成物總能量較反應物總能量為高，故是吸熱反應的能量圖。

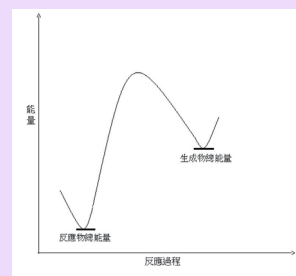
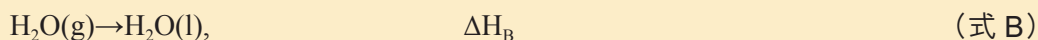


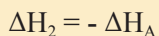
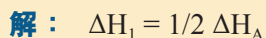
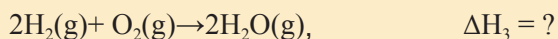
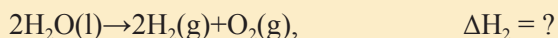
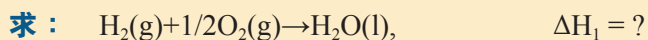
圖 2

5. 蓋斯或赫斯定律 (Hess's Law)

ΔH 是定溫定壓下的熱量變化。 ΔH 是狀態函數，它的數值僅與初始狀態和最終狀態相關，而與反應途徑或過程無關。蓋斯定律表述：不論反應是一步完成還是多步完成，它的反應熱總值是相等的。

蓋斯定律的建立，使得熱化學方程式可以運用普通代數方程式的操作進行計算，具備極強的實用性和應用性。





6. 結語

化學反應的能量變化，常以熱能、光能等形式出現。一般的化學反應中，能量的形式可以互相轉變，但總能量不變。熱化學是熱力學的基礎，亦是能源研究和應用的必備工具。

熱化學是化學教學的基本學術內容。教科書對反應熱的單位有不同的解讀，這容易引起混亂和誤解。筆者認為：反應熱應該使用焦為單位，而不應使用焦 / 摩爾為單位。理據如下：(1) 反應熱是能量的一種形式，能量的基本單位是焦；(2) 單位物質擁有的熱量與物質的摩爾數相關，故其單位是焦 / 摩爾；而反應熱的物理單位不可能與物質所擁有的熱量單位相同；(3) 反應熱的計算必須與其所配平的化學方程式相配合，而相對應的係數亦即摩爾數與單位物質所具熱量的數值相乘，即（摩爾）×（焦 / 摩爾），所得計算物理單位為焦。🌱

阮邦球

澳門化學會會長

劉靜文

澳門化學會監事長