Carsten Niehaus Vertaler/Nalezer: Tijmen Baarda Vertaler/Nalezer: Rinse de Vries Vertaler/Nalezer: Kristof Bal Vertaler/Nalezer: Freek de Kruijf



# Inhoudsopgave

1	Inlei	iding		6
2	Snel	le start	ersgids voor Kalzium	7
3	Kalz	zium ge	bruiken	10
	3.1	Overzi	icht voor het gebruik van Kalzium	10
	3.2	Het in	formatiedialoogvenster	10
		3.2.1	Gegevensoverzicht	11
		3.2.2 3.2.3	Bohr's atoomschillen    Isotopen	11 12
		3.2.4 3.2.5	Diversen	13 14
		3.2.6	Extra informatie	14
	3.3	Tabelle	enen	15
	3.4	Numn	nering	15
	3.5	Kleure	enschema's	16
	3.6	Kleurv	<sup>7</sup> erloop	16
	3.7	Hulpn	niddelen	17
		3.7.1	Molecuulbewerker	17
		3.7.2	Isotopentabel	18
		3.7.3	Gegevens in kaart brengen	19
		3.7.4	Berekeningen uitvoeren	20
		3.7.5	Risk/Security-zinnen	25
		3.7.6	Woordenlijst	26
		3.7.7 3.7.8	Tabellen	27 28
			3.7.8.1       Overzicht	28 28

5	Ove	rzicht v	an de opdrachten	34		
	5.1	Menu	s en sneltoetsen	34		
		5.1.1	Het menu Bestand	34		
		5.1.2	Het menu Beeld	34		
		5.1.3	Het menu Hulpmiddelen	36		
		5.1.4	De menu's Instellingen en Help	36		
6	Vrag	gen en a	antwoorden	37		
7	Hoe	kan ik	bijdragen?	38		
8	Dankbetuigingen en licentie					

## Samenvatting

Kalzium is een programma waarmee u het Periodiek systeem der elementen (PSE) kunt bekijken. Kalzium kunt u gebruiken om informatie over de elementen op te zoeken of om feiten te weten te komen over het periodieke systeem der elementen PSE.

## Hoofdstuk 1

# Inleiding

Kalzium voorziet u van alle soorten informatie over het PSE (Periodiek systeem der elementen). U kunt ontzettend veel informatie opzoeken over de elementen en u kunt visualiseringen gebruiken om ze te laten zien. Kalzium is gratis en wordt verspreid onder de GNU Public License.

U kunt het periodiek systeem der elementen laten weergeven aan de hand van blokken en reeksen. U kunt gegevens voor een groot aantal elementen in kaart brengen zoals het kookpunt of de atoommassa. U kunt ook teruggaan in de tijd en zien welke elementen bekend waren in een bepaald jaar. Ook kunt u de moleculaire massa van moleculen laten berekenen door de aanwezige calculator.

## Hoofdstuk 2

# **Snelle startersgids voor Kalzium**

Dit is de eerste keer dat je Kalzium opstart, vanaf het **Toepassingen**  $\rightarrow$  **Onderwijs**  $\rightarrow$  **Wetenschappelijk**  $\rightarrow$  **Kalzium** in de programmastarter of door **Alt+F2** en dan **kalzium** in te voeren in het invoerveld.



Kalzium is opgedeeld in een informatiepaneel aan de linkerkant (in het rood), de tabelweergave (in het blauw) die de elementen van het periodieke systeem toont en onderaan een legendapaneel (in het groen). Met de standaard menubalk kunt u kiezen wat u wilt zien en de statusbalk laat u de gegevens zien. De tabelweergave en de panelen kunnen verborgen worden met de overeenkomende items in het menu **Beeld**. U kunt bijvoorbeeld het informatiepaneel verbergen met **Beeld**  $\rightarrow$  **Informatie**.

Wanneer u met uw muis over een element gaat, dan verschijnen er in het tabblad **Overzicht** van het informatiepaneel alle bekende gegevens.

U kunt de tabel op verschillende manieren laten weergeven: klassiek periodiek systeem, kort periodiek systeem, lang periodiek systeem, etc. U kunt ook het nummeringssysteem wijzigen, het laten rangschikken in groepen, blokken, kristalstructuur afhankelijk van hun gedrag als zuur, etc.. U kunt dit veranderen in het menu **Beeld**.

Als u gegevens van een specifiek element wilt weten, klikt u in de tabel op het desbetreffende element en de informatie zal worden getoond.



U kunt gegevens in kaart brengen via **Hulpmiddelen**  $\rightarrow$  **Gegevens plotten...** Dan kiest u wat u in kaart wilt brengen op de y-as en een reeks elementen die u in kaart wilt laten brengen op de x-as. De schermafdruk hieronder toont de atoommassa van de elementen 1 t/m 10. Klik op de

knop 🕼 Omwisselen tussen de as-panelen om de X en Y assen om te wisselen.



In de woordenlijst (**Hulpmiddelen**  $\rightarrow$  **Woordenlijst...**) worden de meeste belangrijke chemische woorden uitgelegd en er wordt een afbeelding getoond van de meest gebruikte hulpmiddelen.



## Hoofdstuk 3

# Kalzium gebruiken

## 3.1 Overzicht voor het gebruik van Kalzium

Kalzium is eenvoudig in het gebruik. Het is speciaal ontworpen voor studenten van elke leeftijd, voor gebruik als een kleine en snelle database.

🔩 Kalzium  $\mathbf{\hat{x}}$ Bestand Weergave Hulpmiddelen Instellingen Help 1 Tabeller Isotopentabel Molecuulbev لوني المعالي Vergelijkingoplosser Chemische R/S-zinnen  $\mathsf{Schema}_{\checkmark}$ Legenda tonen Zijbalk verbergen Soeken: Overzicht 1 2 3 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 Koolstof н He Li Ne Be в С N 0 F 6**C** Na AI Si CI Mq Р s Ar к Ca ті Cr Mn Fe Co Ni Zn Ge As Br Sc V Cu Ga Se Kr 12.0107 ι Rb Sr Y Zr Тс Rh Pd Cd In Sn Те Xe Nb Мо Ru Ag Sb Т Cs Ba La Hf Та w Re Os Ir Pt Au Hg тι Pb Bi Po At Rn Fr Ra Ac Rf Db Sq Bh Hs Mt Ds Rg Uub Uut Uuq Uup Uus Uuh S Aggregatietoestand Тb Er Tm Lu Nd Dy Ho Yb 🕓 Tijdlijn υ Cf Md Th Pu Am Cm Bk Es Em No Lr Pa Np 📌 Berekener s-blok p-blok d-blok f-blok Koolstof (6), massa: 12.0107 u

Hieronder vindt u een schermafdruk van Kalzium tijdens gebruik:

## 3.2 Het informatiedialoogvenster

De informatie dialoog word geactiveerd als u met de linkermuisknop op een element klikt. Dit is de plek waar de informatie over een element te vinden is. Met de knoppen onderin het venster of met het gebruik van het scrollwieltje kunt u switchen tussen de elementen zonder het venster te hoeven sluiten.

## 3.2.1 Gegevensoverzicht

De pagina **Gegevensoverzicht** geeft informatie over verschillende feiten van het element.

Afhankelijk van de gegevens die beschikbaar is in Kalzium ziet u de verschillende stralen (radius) van het element. De covalente straal is de straal van een niet geladen atoom of een element in een molecuul. Dat kan bijvoorbeeld de afstand tussen het H en O atoom in water zijn. De Atoomstraal is de straal van een elementair atoom dat niet verbonden is met een ander atoom. De Van der Waalsstraal wordt gedefinieert als de afstand van twee atomen van het zelfde soort in twee gelijke moleculen, bijvoorbeeld twee koolstof atomen in propaan. De laatste is de Ionstraal samen met de lading.

De atoommassa van een element is de gemiddelde massa van alle isotopen in verhouding met hun percentage voorkomen in de natuur.



## 3.2.2 Bohr's atoomschillen

De pagina **Atoommodel** laat u de atoomschillen zien genaamd de orbitalen. Iedere orbitaal staat voor een schil en elke gele cirkel staat voor een elektron.



## 3.2.3 Isotopen

De pagina Isotopen geeft informatie over de verschillende isotopen van het element.

## Massa

De massa van dit isotoop.

#### Neutronen

Het aantal neutronen dat dit isotoop heeft.

### Percentage

Het percentage atomen van dit isotoop type dat voorkomt in de natuur. Ook genoemd verhouding.

#### Halfwaardetijd

Alleen onstabiele isotopen hebben een halfwaardetijd. Dit is de tijd die het isotoop nodig heeft om de helft te laten vervallen.

#### Vervalenergie en wijze van verval

Van sommige isotopen is bekend dat ze deeltjes uitzenden tijdens het radioactief verval. Elk verval heeft een specifieke energie uitstoot, die ook wordt weergeven naast de wijze van verval.

## Spin en pariteit

De spin van de kern en zijn pariteit.

#### Magnetisch moment

De magnetische dipooligheid van de kern. Gemeten in eenheden van een nucleaire magneton.

٩	Koper (29) - Kalzium							• •	×
	Π	Isotoop						[	?
	Overzicht	Cu						Blok: d	î
	Atoommodel				Isotopentabel				
	Diversen	Massa	Neutronen	Percentage	Halveringstijd	Vervalenergie en -proces	Spin en pariteit	Magnetisch moment	
	?	51.9972 u	23						r
	Isotoop	52.9856 u	24						
	Gegevensoverzicht	53.9767 u	25						
	Spectrum	54.9661 u	26						
		55.9586 u	27						
		56.9492 u	28		0.1994 s				\$
ļ	Help					▲ Vorige	Volgen	de 🛛 🔞 Sl <u>u</u> ite	en

## 3.2.4 Diversen

De pagina **Diversen** geeft u meer informatie over het huidige element: onder meer wanneer het is ontdekt en de herkomst van de naam.



## 3.2.5 Spectrum

De pagina **Spectrum** toont u het spectrum van elementen. U kunt de reeks golflengten, eenheden en type van het spectrum kiezen. De intensiteitstabel kan rechtsonder op de pagina worden bekeken.

Koper (29) - Kalzium				? 🔊	2
H	Spectrum				
Overzicht					
Atoommodel					
Diversen	Instellingen	Geselecteerde piek	Lijst van all	e pieken	
?	Getal	Golflengte	Intensiteit	:	^
Isotoop	- 1	2165.09	130		
4	- 2	2178.94	150		
4	- 3	2181.72	150		
Consumation	- 4	2225.7	200		
Gegevensoverzicht	5	2230.08	250		
	- 6	2244.26	250		
	7	2441.64	100		~
Spectrum	8	2492.15	200		~
P Help		Vorige	Volgende	8 si <u></u>	uiten

## 3.2.6 Extra informatie

De pagina **Extra informatie** geeft u de koppelingen naar de elementenpagina's op Wikipedia, Jefferson Lab en WebElements.

4	Iron (26) — Kalzium	? ~ ^ 😣
	Extra Information	
Data Overview		
×	Fe Iron	Block: d
Atom Model	Wikipedia (American English)	
<b>5</b>	Jefferson Lab	
Isotopes	Webelements	
Miscellaneous		
Spectrum		
Extra information		
🛱 Help	< Previous > Next	S Close

## 3.3 Tabellen

Het periodieke systeem kan op verschillende manieren worden weergegeven. U kunt de tabelweergave omschakelen in het menu **Beeld** of de afrollijst in de werkbalk.

De volgende opties in het menu **Beeld**  $\rightarrow$  **Tabellen** kunnen worden gebruikt om de getoonde tabel te wijzigen:

## Klassiek periodiek systeem

Toon de klassieke tabel met alle elementen.

## Kort periodiek systeem

Toon een tabel zonder overgangselementen.

## Lang periodiek systeem

Toon een periodieke tabel met ingebedde inwendige overgangselementen (f-elementen).

### Overgangselementen

Toon een tabel met alleen overgangselementen.

## DZ periodiek systeem

Dit item representeert de tabel zoals DZ Deutscher Zentralausschuss "Duitse Centrale Comité" suggereert.

## 3.4 Nummering

De nummering is een manier om de 18 groepen in het periodiek systeem te nummeren. U kunt de nummering veranderen in **IUPAC**, **oude IUPAC** en **CAS** of u kunt het volledig uitschakelen.

De volgende opties in het menu <br/>  $\textbf{Beeld} \rightarrow \textbf{Nummering}$  kunnen worden gebruikt om de getoonde nummering te wijzigen:

- Geen nummering: wanneer deze optie is ingesteld, zal er helemaal geen nummering weergegeven worden.
- **IUPAC** (standaard) is de *International Union of Pure and Applied Chemistry* (vertaald: Internationale Unie van Zuivere en Toegepaste Chemie). Dit is een organisatie die de meeste standaarden voor chemische zaken bepaalt. Het nieuwe IUPAC-systeem nummert elk kolom met Arabische cijfers van 1 (een) tot 18 (achttien).
- **CAS** is de *Chemical Abstracts Service*. In het CAS-systeem worden de letters A en B toegewezen aan de groep met hoofdelementen (A) en overgangselementen (B). Hoewel de nummering van IUPAC de officiële is, wordt de nummering van CAS het meest gebruikt op school en in laboratoria.
- Het **Oude IUPAC**-systeem labelt kolommen met Romeinse cijfers, gevolgd door de letter 'A' of 'B'. De kolommen waren zodanig genummerd dat kolommen een tot zeven genummerd waren als 'IA' tot 'VIIA', kolom 8 tot 10 waren genummerd met 'VIIIA', kolom 11 tot 17 waren genummerd met 'IB' tot 'VIIB', en kolom 18 was genummerd met 'VIII'. Vanwege de verwarring die het oude IUPAC- en het CAS-systeem wekte heeft de IUPAC het nieuwe systeem aangenomen.

## 3.5 Kleurenschema's

Kalzium kan de elementen een bepaalde kleur geven waarbij gekeken wordt naar hun periodieke 'blok' en 'groep', hun gedrag met zuur of de fase (bijv. vast/vloeibaar/gas) bij een bepaalde temperatuur.

De kleurenschema's kunnen worden gewijzigd in menu **Beeld**  $\rightarrow$  **Schema**, afrolmenu van de werkbalk of het tabblad Beeld van de zijbalk.

- Monochroom: alle elementen hebben dezelfde kleur. U kunt de standaardkleur wijzigen in menuoptie Instellingen → Kalzium instellen... en dan pagina Schema's.
- Blokken: gebruikt voor elk blok een andere kleur.
- **Symbolisch**: toont pictogrammen voor elk element.
- **Reeks**: voor elke van de negen reeksen wordt een aparte kleur gebruikt.
- **Groepen**: gebruikt voor elke groep een andere kleur. Een groep is een verticale kolom in het periodiek systeem der elementen. Het standaard-periodiek systeem bevat 18 groepen. Elementen in een groep hebben vergelijkbare configuraties van hun valentie electronen. Dit geeft ze vergelijkbare eigenschappen.
- Kleuren: Mooie kleuren zonder betekenis. (Uit het project Open Babel).

## 3.6 Kleurverloop

Het kleurverloop laat de elementen volgens de eigenschappen die u selecteert zien samen met een kleurenschema dat verloopt. De elementen waarvan geen gegevens aanwezig zijn, worden grijs weergeven.

Het kleurverloop kan worden gewijzigd in menu **Beeld**  $\rightarrow$  **Kleurverloop**, afrolmenu van de werkbalk of het tabblad Beeld van de zijbalk.



De volgende typen kleurverloop zijn geïmplementeerd (op sommige items in de lijst kan geklikt worden):

- Geen geen kleurverloop gebruiken.
- Aggregatietoestand
- Covalente straal
- Van der Waals: kleurverloop per Vanderwaalsstraal.
- Atoommassa
- Kookpunt
- Smeltpunt
- Electronegativiteit (Pauling)
- Elektronenaffiniteit
- Ontdekkingsdatum
- Eerste ionisatie

## 3.7 Hulpmiddelen

## 3.7.1 Molecuulbewerker

De Molecuulbewerker stelt u in staat om moleculen te bekijken en te bewerken met Avogadro 2-bibliotheken.

Met het besturingspaneel links kunt u de weergaveparameters wijzigen, een molecuul bewerken of moleculen meten. Er zijn drie tabbladen op dit paneel: **Tonen**, **Bewerken** en **Meten**. Bovenaan het venster is een knop om de **Stijl** van de viewer te selecteren (kan **Bal en stok**, **Licorice**, **Van der Waals**, **Van der Waals (AO)** (AO means 'Ambient Occlusion') of **Draadframe**) zijn. De knoppen

aan de onderkant van het venster kunnen worden gebruikt voor **Molecuul laden**, **Nieuwe moleculen downloaden**, **Molecuul opslaan** en **Sluiten** van het venster. De gedownloade bestanden zullen opgeslagen worden in uw map Documenten waarvan uit u ze kunt laden in de bewerker.

Paneel Statistieken toont de naam (indien beschikbaar), formule en gewicht van het molecuul.

Het tabblad **Display** kan gebruikt worden om een geladen molecuul te bekijken. Door de muisaanwijzer in het voorbeeld in te drukken, kunt u het zichtpunt wijzigen. Gebruik linkermuisknop om het molecuul te draaien, rechtermuisknop om het te verplaatsen en middelstemuisknop om te zoomen.

Het tabblad **Bewerken** stelt u in staat om het molecuul te bewerken. U kunt elementen toevoegen door ze in het afrolmenu **Element** te kiezen en met de linkermuisknop op het weergavepaneel rechts te klikken.

Het tabblad **Meten** kan worden gebruikt om de afstanden en de hoeken in het molecuul te meten. Om de metingen te doen gebruikt u de instructies in het tabblad.



## 3.7.2 Isotopentabel

De **Isotopentabel...** toont u de isotopen van de elementen.

Er zijn verschillende soorten isotopen, sommige ervan zijn stabiel, anderen niet. De onstabiele isotopen kunnen vervallen met alfa-stralen of twee verschillende beta-stralen. Deze verschillen worden voorgesteld door verschillende kleuren.



Kalzium kan de isotopen van een groot aantal elementen weergeven.

## 3.7.3 Gegevens in kaart brengen

Het dialoog **Gegevens in kaart brengen...** geeft u de mogelijkheid om informatie over de elementen weer te geven. De X-as representeert het bereik van elementen (van een getal naar een hoger getal). U kunt dit bereik instellen met behulp van de velden Eerste element en Laatste element in de dialoog. Klik op de knop **Omwisselen** tussen de as-panelen om de X en Y assen om te wisselen.



Kalzium kan gegevens over een bereik van elementen weergeven.

## 3.7.4 Berekeningen uitvoeren

**Berekeningen uitvoeren** is de rekenmachine van Kalzium. Deze rekenmachine bevat een verscheidenheid aan rekenmachines voor verschillende taken die verschillende berekeningen uitvoeren.

U kunt de volgende rekenmachines in Kalzium vinden:

## Rekenmachine voor moleculaire massa

Deze rekenmachine helpt bij het berekenen van de moleculaire massa's van verschillende moleculen.

U de korte vorm van de molecuulnamen specificeren en meer aliassen toevoegen.

<		Ch	emical Calculator —	Kalzium				? ~ ^ 😣
Calculators	Calculator Ali	ases						
Introduction								
Molecular mass Calc	#Ph#Oh							Calc
Concentration Calcul							-	
Nuclear Calculator				$C_6 H_5 O_1$				
Gas Calculator	Molecular mass:	93.1033 u						
Titration Calculator								
Equation Balancer								
				Details				
	Composition					Alia	ases used	
	Element	t Atoms	Atomic mass	Total mass	Percentage		aliases	
	1 Carbon	6	12.0107	72.0642	77.4024	1	Ph : C6H5	
	2 Hydrogen	5	1.007940000	5.0397	5.41302			
	3 Oxygen	1	15.9994	15.9994	17.1846			
					>			
₿ Help								8 Close

Kalzium berekent de moleculaire massa van phenol.

## **Rekenmachine voor concentraties**

U kunt hoeveelheden berekenen die omvatten:

- Hoeveelheid opgeloste stof
- Dichtheid van het oplosmiddel
- Dichtheid van de opgeloste stof

Er is een brede reeks eenheden om uit te kiezen en verschillende methoden om hoeveelheden te specificeren.

4		Chemical Cal	culator	— Kalzium		? ~ ^ 🛛	
Calculators	Some of the following data is	not necessa	ry. Fo	r instance, if you specify	/ the amount of solut	e in moles, you do not	
Introduction	have to specify the molar mass of the solute.						
Molecular mass Calculator							
Concentration Calculator				Data			
Nuclear Calculator				Data			
Gas Calculator	Calculate:		$\sim$				
Titration Calculator Equation Balancer	Amount of solute:	h17.0000	¢	grams (g) V	Mass ~		
	Molar mass of solute:	58.5000	\$	(g/mol)			
	Equivalent mass of solute:	58.5000	\$	(g/mole)			
	Density of solute:	2.7000	\$	grams per liter 🗸 🗸			
	Amount of Solvent:	1.0000	$\hat{}$	liters (I) V	Volume ~		
	Molar mass of solvent:	18.0000	¢	(g/mole)			
	Density of Solvent:	1000.0000	\$	grams per liter 🗸 🗸			
	Concentration:	2.0000	\$	molar ~			
						Reset	
181 Help						😣 Close	

Kalzium berekent oplosparameters.

## Nucleaire rekenmachine

Deze rekenmachine maakt gebruik van de in Kalzium beschikbare nucleaire gegevens om de te verwachte massa van een material na een tijdje te voorspellen.

4		Chemical Calo	ulator — Kalzium		? ~ ^ 😣				
Calculators	Select what you	want to calculate	from the combo b	oox next to the "calculate"	label and				
Introduction	change the value	ange the values / units to calculate.							
Molecular mass Calc									
Concentration Calcul									
Nuclear Calculator			Elemental data						
Gas Calculator Titration Calculator	Element Name:	Uranium V							
Equation Balancer	Isotope mass:	239.054 ~							
	Half-life:	1407,0000 🗘	year (y) V						
	Atomic mass:	239.054	grams / mole						
			Other data						
	Calculate:	Time ~							
	Initial amount:	6,0000 🗘	grams (g) V	]					
	Final amount:	3,0000 🗘	grams (g) V	]					
	Time:	1407,0000 🗘	year (y)	]					
					Reset				
🛱 Help					8 Close				

Kalzium berekent de parameters van het verval van Uranium.

#### Gasrekenmachine

Deze rekenmachine kan de waarden van temperatuur, druk, volume, hoeveelheid gas etc. voor verschillende ideale als ook niet-ideale gassen berekenen.

4		Chemical Calculator –	- Kalzium	? ~ ^ 😣					
Calculators Introduction	alculators Change the quantities and observe the other quantities change dynamically. Mass and moles are directly dependent for a given gas.								
Molecular mass Calc									
Concentration Calcul									
Nuclear Calculator									
Gas Calculator									
Titration Calculator			Data						
Equation Balancer	<b>C</b>								
	Calculate:	×	]						
	Molar mass of the gas:	2,0080 🗘	(g/mol)						
	Malaa	1 0000							
	wores:	1,0000 ~							
	Mass:	2,0160	grams (g) 🗸 🗸 🗸						
	Pressure:	1,0000 🗘	atmospheres (atm) 🗸 🗸						
	Temperature:	273,0000 🗘	kelvins (K) V						
	Volume:	22,4024	liters (l) V						
				Reset					
🛱 Help				😣 Close					

Kalzium berekent gasparameters.

## Titratie-rekenmachine

Deze rekenmachine probeert het punt van evenwicht van een pH-meter te vinden na titratie door het beste te laten samenvallen met een hyperbolische tangens. U kunt het ook laten oplossen met een evenwichtssysteem van vergelijkingen en te kijken hoe de concentratie van een stof zich wijzigt in samenhang met een andere.

Er zijn twee tabbladen op de rekenmachine-pagina, namelijk:

## Experimentele waarden

U kunt deze rekenmachine gebruiken om de grafiek van uw experimentele gegevens, verkregen tijdens een titratie, te tekenen en het equivalente volume te bepalen. Het is ten zeerste aanbevolen om een even aantal punten in te voegen, vanwege het algoritme best-fit, gesorteerd op waarde van volume (de **X-as:**).

## Theoretische vergelijkingen

Hier kunt u de tabel invullen met de vergelijkingen die u eerder hebt verkregen voor het chemische evenwicht.

U hebt bijvoorbeeld deze reactie  $A + B \rightarrow C + D$  daarna zult de vergelijking  $K=(C^*D)/(A^*B)$  krijgen zodat u K in de kolom **Parameter** moet schrijven en (C\*D)/(A\*B) in de kolom **Waarde**. Als u een bekende waarde aan een parameter wilt geven dan kunt u eenvoudig de numerieke waarde in het veld **Waarde** schrijven.

U kunt bijvoorbeeld het volgende systeem gebruiken

A=(C\*D)/(B\*K) K=10^-3 C=OH OH=(10^-14)/H H=10^-4 B=6\*(10^-2)

Daarna moet u **D** als **X-as:** en **A** als **Y-as:** schrijven: zo zult u te weten komen hoe de concentratie van A wijzigt als functie van de concentratie van D.

## **OPMERKING**

Gebruik geen haakjes voor exponenten: 10<sup>-3</sup> is juist, terwijl 10<sup>(-3)</sup> fout is.

Het resultaat kan zichtbaar gemaakt worden door op de knop **Grafiek tekenen** te drukken. De grafiek toont in rood de kromme die uit theoretische vergelijkingen komt, in blauw de experimentele punten en in groen de benaderde kromme voor experimentele punten. U kunt de grafiek opslaan als SVG-afbeelding.



Voorgedefinieerd voorbeeld van titratieresultaten.

## Vergelijking in evenwicht brengen

De **Vergelijking in evenwicht brengen** stelt de gebruiker in staat om chemische vergelijkingen op te lossen. Dit is een voorbeeld:

aH2O + bCO2 -> cH2CO3

De opgeloste vergelijking word aan de bovenkant van het venster getoond. Zoals u kunt zien in het voorbeeld, kunt u een of meer coëfficiënten invoegen. De andere coëfficiënten worden dan toegevoegd. Het is zelfs mogelijk om haakjes om de elementen of ladingen te zetten zoals u bij de laatste 2 voorbeelden kunt zien.

	Chemical Calculator — Kalzium ? V ^	8							
Calculators	Equation:								
Introduction	aCH3(CH2)3COOH + bO2 -> cH2O + dCO2								
Molecular mass Calc Concentration Calcul	Calculate								
Nuclear Calculator	2 CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> )3COOH + 13 O <sub>2</sub> -> 10 H <sub>2</sub> O + 10 CO <sub>2</sub>								
Titration Calculator	Copy to Clipboard								
Equation Balancer	The equation solver allows you to balance a chemical equation.								
	Using Variables         To express variable quantities of an element, put a single character in front of the element's symbol, as shown in this example $AH + bO - 5H2O$ (Result: 10 H + 5 O -> 5 H <sub>2</sub> O)         Solving this expression will give you the needed amount of Hydrogen and Oxygen.         Defining electric charges         Use box brackets to specify the electric charge of an element, as shown in this example: $4H[+] + 2O -> cH2O[2+]$ (Result: 4 H <sup>+</sup> + 2 O -> 2 H <sub>2</sub> O <sup>2+</sup> )	2							
n 📃 Stand	dardsitzung: /hom 🔰 Lokale Ordner/Postein 🌸 Konqueror 🗾 bb : kalzium — Konsole 📓 B01-EG-AN-O	st-26							

Kalzium kan chemische vergelijkingen in evenwicht brengen.

## 3.7.5 Risk/Security-zinnen

De **R/S frasen**, ook bekend als Risk en Safety Statements, R/S statements, R/S nummers en R/S sentences, is een systeem met risico-codes en frasen voor het labelen van gevaarlijke chemicaliën en componenten. De R/S frase van een component bestaat uit een risicogedeelte (R) en een veiligheidsgedeelte (S), elk gevolgd door een combinatie van nummers. Elk nummer correspondeert met een frase. De frase correspondeert met de letter/nummer-combinatie en heeft dezelfde betekenis in verschillende talen.

<b>~</b>	Risks/Security Phrases	?	$\sim$	^	8
R-Phra	ses:				
1 - Explosi 2 - Risk of 3 - Extrem ignition 4 - Forms 5 - Heatin 6 - Explosi 7 - May ca 8 - Contac 9 - Explosi	ve when dry explosion by shock, friction, fire or other sources of i e risk of explosion by shock, friction, fire or other sou very sensitive explosive metallic compounds g may cause an explosion ve with or without contact with air use fire t with combustible material may cause fire ve when mixed with combustible material	gnitio	of		
S-Phra	ses:				
1 - Keep la 2 - Keep or 3 - Keep in 4 - Keep ar 5 - Keep cr 6 - Keep cr 7 - Keep cr 8 - Keep cr 9 - Keep cr	cked up at of the reach of children a cool place way from living quarters ontents under ( appropriate liquid to be specified b urer ) der ( inert gas to be specified by the manufacture ontainer tightly closed ontainer dry ontainer in a well-ventilated place	y the r )			
R-Phrases:	1-2-3-4-5-6-7-8-9				
S-Phrases:	1-2-3-4-5-6-7-8-9	F	ilter		]
🛱 Help	]		3 Cl	ose	

Kalzium kan Risk/Security-zinnen tonen

## 3.7.6 Woordenlijst

De **Woordenlijst** geeft u definities van de meest gebruikte gereedschappen in de chemie en van sommige enkele gegevens. Links van het venster ziet u een boomdiagram met onderwerpen. Bovenaan staan de chemische termen en eronder ziet u een 2e diagram met het gereedschap dat je gebruikt in een laboratorium.

Bovenaan in het venster ziet u een zoekbalk. Als u in deze balk typt zal in het diagram meteen gezocht worden naar het woord. Het kleine knopje rechts van die zoekbalk leegt voor u de balk.



## 3.7.7 Tabellen

De **Tabellen** toont u de tabellen voor het Griekse alfabet die worden gebruikt om sommige chemische en fysieke entiteiten aan te geven en voor Latijnse voorzetsels en Romeinse getallen die overeenkomen met algemene Arabische getallen.

<b>~</b>	Kalzium <2	>	? ~ ^ 😣
<b>#</b> Greek alphabet	Greek alp	habet	
#	Uppercase	Lowercase	Name
<b>tt</b> Numbers	A	α	alpha
	В	β	beta
	Г	γ	gamma
	Δ	δ	delta
	E	ε	epsilon
		✓ ОК	⊘ Cancel

## 3.7.8 Zijbalk

## 3.7.8.1 Overzicht



Het tabblad **Overzicht** laat u een overzicht zien van het element waarop uw cursor zich bevindt.

## 3.7.8.2 Beeld

Het tabblad **Beeld** is de tweede in het navigatiepaneel.

U krijgt eerst de volgende pictogrammen en tekst te zien



Kalzium kan met kleuren aangeven welke elementen in de fase vast/vloeibaar/gas zijn bij een gegeven temperatuur.

Het tabblad **Beeld** kan worden gebruikt om het PSE (Periodiek Systeem der Elementen) te filteren. Dit is handig om een gevoel te krijgen over hoe het PSE in de tijd is gegroeid, waarbij er steeds meer elementen ontdekt werden. Kies **Datum van ontdekking** uit de lijst **Kleurverloop**. Als u de schuifregelaar naar links beweegt zal de kleur van sommige elementen verdwijnen en weer terugkomen als u de schuifregelaar naar rechts beweegt. Verder zal het aantal telkens veranderen.

Het getal staat voor het jaartal waarna u kijkt. Als u de balk naar bijv. 1856 verplaatst ziet u alleen de elementen die al ontdekt waren in het jaar 1856.

Schema	rbergen	R/S-zi	nnen	Tabellen	Isoto	pentabel	Moleo	- cuulbewe	erker V	Vergelijki	ngoplos	ser Ch	nemische	e bestan	den con	verteren		
۰ ۶	Zoeke	n: 📃																
Uverzicht	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Aggregatietoestand		1																
🕒 Tijdlijn	н		,															не
laar:	i Li	Be											в	с	N	0	F	Ne
1906 ♦	Na	Mg											AI	Si	Ρ	s	СІ	Ar
	к	Ca	Sc	Ti	v	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Мо	Тс	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Те	Т	Xe
	Cs	Ва	La	Hf	Та	w	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	ті	Pb	Bi	Po	At	Rn
	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	
				Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Но	Er	Tm	Yb	Lu	]
				Th	Ра	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	1
🛹 Berekenen																		1
Gradiënt: Covalente straal (lin	eair)																	
Minimum: 0.32																		
Maximum: 2.25																		

De PSE terug in de tijd (elementen die bekend waren in 1856)

## Hoofdstuk 4

# Kalzium instellen

Kalzium heeft vele configuratiem<br/>ogelijkheden. U kunt ze vinden door de configuratie<br/>dialoog te openen via menuoptie Instellingen  $\rightarrow$  Kalzium instell<br/>en...

🔩 Insteller	n - Kalzi	um					? 🕥	×
<b>1</b>		Kleuren						<u>i</u>
Kleure	n	<u> </u>	-					
Eenhed Diverse	en	<u>B</u> lokken s-blok: p-blok: d-blok: f-blok:	Groepen	Aggregatietoestand	Reeks	Geen kleurenschema	Gradiënttyp	en I I I I I I I I I I I I I I I I I I I
Pelp		Standaar	d		<ul> <li>✓ </li> </ul>	<u>O</u> K	<u>Ø A</u> nnu	Ileren

In het tabblad Schema's vindt u de verschillende kleuren voor elk kleurenschema veranderen.

Instellen - Kalz	lium		? <
<u></u>	Eenheden		o
Kleuren		Eenheden	
-O			
Eenheden	Temperaturen:	Kelvin	~
S.	Energie:	kj/mol (kilojoule per mol)	~
Diversen			
Pelp	Standaard	✓ OK Voepassen	Annuleren

Kalzium kan in plaats van een lineair kleurverloop om de eigenschappen van een element in het periodiek systeem te tonen, ook een logaritmisch kleurverloop gebruiken.

In het tabblad **Typen kleurverloop** kunt u de eigenschappen, die u getoond wilt zien met een logaritmisch verloop, besturen.

U kunt ook **Maximale kleurwaarde:** en **Minimale kleurwaarde:** voor het verloop kiezen.

Instellen - Kal	zium	<ul> <li>(2)</li> </ul>
**	Diversen	
Kleuren		
<b>O</b>		Diversen
Eenheden	Uiterlijk periodiek systeem:	Atoommassa tonen in het periodiek systeem
3		
✓ Diversen		
_		

In het tabblad **Eenheden** kunt u eenheden voor energie, lengte en temperatuur kiezen. U kunt als standaard electronvolts (eV), kiloJoule per mole (kJ/mol) of Joule per mole (J/mole) kiezen. voor de lengte stelt u picometers (pm), nanometers (nm) of Ångström (Å) in als standaard. De



temperatuur is standaard in Kelvin maar u kunt die veranderen in graden Celsius (C), graden Fahrenheit (F) of Réaumur (Ré).

Met de pagina **Rekenmachines**, kunt u de rekenmachines van Kalzium instellen.

## Hoofdstuk 5

## Overzicht van de opdrachten

## 5.1 Menu's en sneltoetsen

## 5.1.1 Het menu Bestand

### Bestand → Opslaan als... (Ctrl+Shift+S)

Slaat de tabel van Kalzium als afbeelding op.

### Bestand $\rightarrow$ Gegevens exporteren...

Open een dialoog waarin u **Elementen** en hun **Eigenschappen** kunt selecteren om deze te exporteren naar een HTML-, XML of CSV-bestand.

## $Bestand \rightarrow Chemische bestanden \ converteren...$

Open een dialoog om een brede reeks van chemische bestandsformaten en gegevenstypen te importeren met de Open Babel-bibliotheek.

#### Bestand $\rightarrow$ Afsluiten (Ctrl+Q)

Afsluiten van Kalzium.

## 5.1.2 Het menu Beeld

### $Beeld \rightarrow Systemen$

Een submenu tonen met verschillende periodieke systemen. De opties zijn:

### Klassiek periodiek systeem

Toon het klassieke periodieke systeem met alle elementen.

### Kort periodiek systeem

Toon een tabel zonder overgangselementen.

## Lang periodiek systeem

Toon een periodieke tabel met ingebedde inwendige overgangselementen (f-elementen).

## Overgangselementen

Toon een tabel met alleen overgangselementen.

## DZ periodiek systeem

Dit item representeert het systeem zoals DZ *Deutscher Zentralausschuss* "Duitse Centrale Comité" suggereert.

## $Beeld \rightarrow Nummering$

Een submenu tonen met verschillende modi voor nummering. De beschikbare opties zijn:

## Geen nummering

Toon geen nummeringschema.

## IUPAC

Toon de IUPAC-nummering.

#### CAS

Toon de CAS-nummering.

## **Oude IUPAC**

Toon de oude IUPAC-nummering.

## $\textbf{Beeld} \rightarrow \textbf{Schema}$

Een submenu tonen met verschillende schema's. De beschikbare opties zijn:

#### Monochroom

Toon alle elementen met één achtergrondkleur.

#### Blokken

Toon de 4 blokken met elementen.

## Symbolisch

Toon pictogrammen voor elk element.

## Familie

Toon de families van de elementen.

## Groepen

Toon de groepen elementen.

#### Kleuren

Toon de kleuren van elementen.

## $\textbf{Beeld} \rightarrow \textbf{Kleurverlopen}$

Een submenu tonen met verschillende kleurverlopen. De beschikbare opties zijn:

#### Geen

Uitschakelen van elk kleurverloop in de tabel.

#### Aggregatietoestand

Toon de aggregatietoestand van een element.

## **Covalente straal**

Toon de covalente straal van een element.

## Vanderwaals

Toon de vanderwaalsstraal van een element.

## Atoommassa

Toon de atoommassa van een element.

## Kookpunt

Toon het kookpunt van een element.

### Smeltpunt

Toon het smeltpunt van een element.

## **Electronennegativiteit (Pauling)**

Toon de electronegativiteit van een element.

#### Electronenaffiniteit

Toon de electronenaffiniteit van een element.

#### Ontdekkingsdatum

Toon de ontdekkingsdatum van elk element met verschillende achtergrond kleuren voor elke eeuw.

## **Eerste ionisatie**

Toon de eerste ionisatie-energie van een element.

## $\textbf{Beeld} \rightarrow \textbf{Legenda}$

Toon of verberg de legenda. Daarmee kunt u de legenda voor het schema waarin u zich bevindt (groepen, familie, blokken) laten weergeven. De legenda wordt standaard weergegeven. Als u het verbergt zal het verborgen blijven totdat u zelf de menuoptie weer selecteert. Kalzium onthoudt deze instelling zodat de instelling ook wordt gebruikt bij een volgende start van het programma.

## $\textbf{Beeld} \rightarrow \textbf{Informatie}$

Toon of verberg de zijbalk.

## $\textbf{Beeld} \rightarrow \textbf{Tabelinformatie}$

Toon of verberg de tabelinformatie.

## 5.1.3 Het menu Hulpmiddelen

#### Hulpmiddelen $\rightarrow$ Molecuulbewerker...

Open de dialoog molecuulbewerker.

#### Hulpmiddelen $\rightarrow$ Isotopentabel...

Open het venster Isotopentabel.

## $\textbf{Hulpmiddelen} \rightarrow \textbf{Gegevens in kaart brengen...}$

Open de dialoog Gegevens plotten.

#### Hulpmiddelen $\rightarrow$ Berekeningen uitvoeren...

Open de dialoog **Berekening uitvoeren**.

## Hulpmiddelen $\rightarrow$ R/S-zinnen...

Open de dialoog voor Risk/Security-zinnen.

 $Hulpmiddelen \rightarrow Woordenlijst...$ 

Open de Woordenlijst.

## $Hulpmiddelen \rightarrow Tabellen...$

Toon een dialoog met het **Griekse alfabet** en **numerieke voorvoegsels en Romeinse num**mers.

## 5.1.4 De menu's Instellingen en Help

Kalzium heeft de gezamenlijke KDE **Instellingen** en **Help** menu-items, voor meer informatie lees de secties over de Menu Instellingen en Menu Help van KDE-fundamentals.

## Hoofdstuk 6

# Vragen en antwoorden

 Moet ik ooit betalen voor Kalzium? Nee, nooit. Maar de auteur verwelkomt altijd leuke post of een DVD als bedankje. Kalzium wordt verspreid onder de GPL, dus u zult nooit hoeven te betalen voor dit programma.

## Hoofdstuk 7

# Hoe kan ik bijdragen?

1. Door mij met data te ondersteunen.

In de wereld der wetenschap komt en gaat alles erg snel. Als u een onjuiste of ontbrekende waarde vindt, kunt u me een e-mail sturen.

2. Bugs (fouten, crashes) opsporen en suggesties geven.

Als u bug in het programma tegenkomt, of suggesties hebt voor verbeteringen, kunt u het me altijd laten weten via cniehaus@kde.org.

## Hoofdstuk 8

# Dankbetuigingen en licentie

Kalzium

Programma Copyright 2001-2005 Carsten Niehaus cniehaus@kde.org Met bijdragen van:

• Pino Toscano toscano.pino@tiscali.it

Dit document is vertaald in het Nederlands door Tijmen Baarda tijmenbaarda@tijgerweb.net. Dit document is vertaald in het Nederlands door Rinse de Vries rinsedevries@kde.nl. Dit document is vertaald in het Nederlands door Kristof Bal kristof.bal@gmail.com. De vertaling werd nagelezen door Freek de Kruijf freekdekruijf@kde.nl. Deze documentatie valt onder de bepalingen van de GNU vrije-documentatie-licentie. Deze toepassing valt onder de bepalingen van de GNU General Public License.