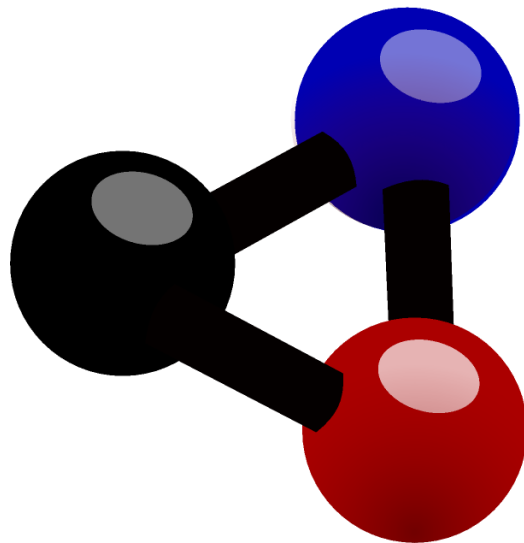


O Manual do Kalzium

Carsten Niehaus

Tradutor do proxecto Trasno: Marce Villarino

Tradutor do proxecto Trasno: Xosé Calvo



O Manual do Kalzium

Índice xeral

1. Introducción	6
2. Guía rápida de Kalzium	7
3. Utilización de Kalzium	9
3.1. Overview of Kalziums usage	9
3.2. O diálogo de información	9
3.2.1. Resumo	10
3.2.2. Orbitais de Bohr	10
3.2.3. Miscellaneous	10
3.2.4. Isótopos	11
3.2.5. Resumo dos datos	12
3.2.6. Espectro	13
3.3. Numeración	14
3.4. Esquemas de cor	14
3.5. Ferramentas	15
3.5.1. Táboa de isótopos	15
3.5.2. Frases de risco/seguranza	16
3.5.3. Glosario	16
3.5.4. Representar datos	17
3.5.5. Equation Solver	17
3.5.6. Barra lateral	18
3.5.6.1. Resumo	18
3.5.6.2. Estado da materia	18
3.5.6.3. Timeline	19
3.5.6.4. Calcular	20
3.5.6.5. Show Legend	20
4. Configuración de Kalzium	21
5. Referencia das ordes	23
5.1. Menús e atallos do teclado	23
5.1.1. The File Menu	23
5.1.2. The View Menu	23
5.1.3. The Tools Menu	25
5.1.4. The Settings Menu	25
5.1.5. The Help Menu	26

O Manual do Kalzium

6. Preguntas e respostas	27
7. Como podo contribuír?	28
8. Recoñecementos e licenza	29
A. Instalación	30
A.1. Como obter Kalzium	30
A.2. Requirements	30
A.3. Compilación e instalación	30

Resumo

O Kalzium é un programa que mostra a Táboa Periódica dos Elementos. Pódese usar Kalzium para procurar información acerca dos elementos ou aprender cousas acerca da táboa periódica.

Capítulo 1

Introdución

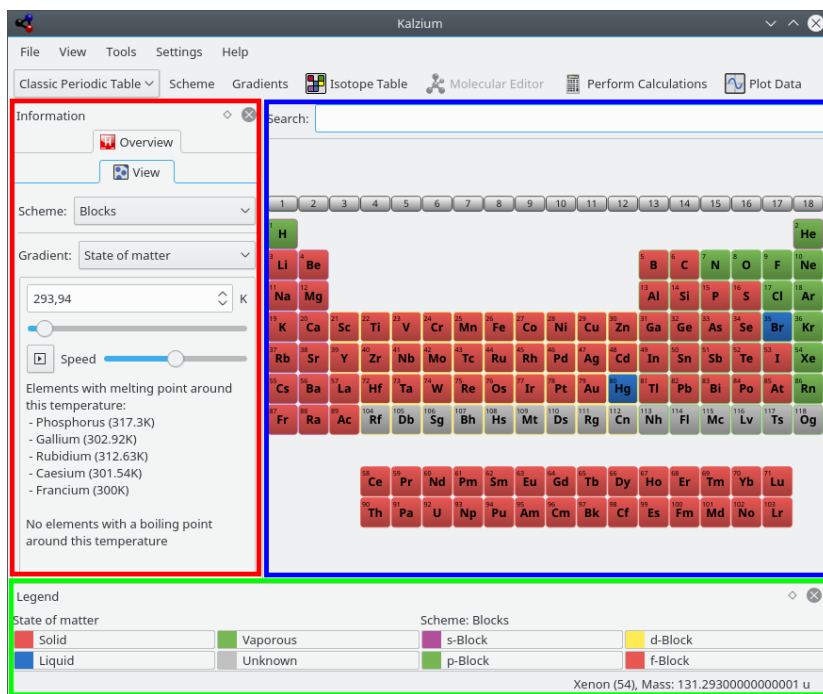
Kalzium fornece todo tipo de información acerca da Táboa Periódica dos Elementos. Pódense procurar moitas de datos acerca dos elementos e tamén usar visualizacións para velos. É libre e distribúese sob a Licenza Pública GNU.

You can visualize the Periodic Table of the Elements by groups, blocks, and families. You can plot data for a range of elements for properties like the boilingpoint or the atomic mass. You can go back in time and see what elements were known at a given date. You can also calculate the molecular mass of molecules.

Capítulo 2

Guía rápida de Kalzium

Velaquí o Kalzium a primeira vez que se executa, tanto seleccionando **Aplicativos** → **Educación** → **Ciencia** → **Kalzium** no menú menú **K** como con **Alt+F2** e escribindo **kalzium** no campo que aparece.



Kalzium is divided in a navigation panel on the left (in red, 1) and the table view (in blue, 2) which shows the elements of the periodic table. The standard menubar allows you to choose what you want to display and the status bar reports facts. You can hide the navigation panel using the **View** → **Show Sidebar** menu.

When you move the mouse cursor on an element of the table, an overview of the current element in the **Overview** tab of the navigation panel is displayed.

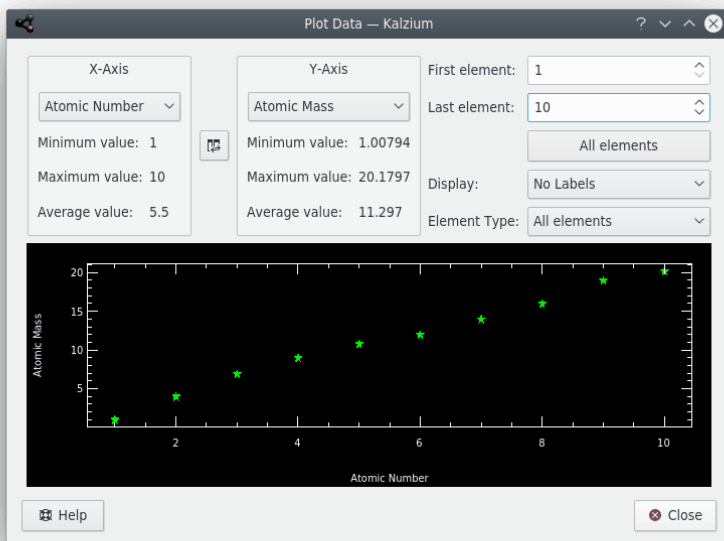
You can choose several views for the table: display the elements per families, per groups, per crystal structure, depending on their acidic behaviour, etc.. You can change all that in the menu-bar in the **View** → **Scheme** menu.

Se queres aprender cousas acerca dun elemento en concreto, preme nel na táboa e mostrárase o diálogo de información.

Diálogo de información

O Manual do Kalzium

Pódense representar datos usando o menú **Ferramentas** → **Representar datos...** Escolle o que queiras representar no eixo y e un intervalo de elementos que representar para o eixo x. A captura de pantalla de abaixo mostra a masa dos elementos 1 ao 10.



O glosario (**Ferramentas** → **Glosario...**) define as palabras mais importantes da química e mostra imaxes das ferramentas mais habituais cunha explicación.

Magnetic Stir Bar

Magnetic stir bars are highly chemically inert, small magnetic bars. Most heaters have a built-in magnet which can rotate: this causes the stir bar to rotate and the mixture to become homogenized.

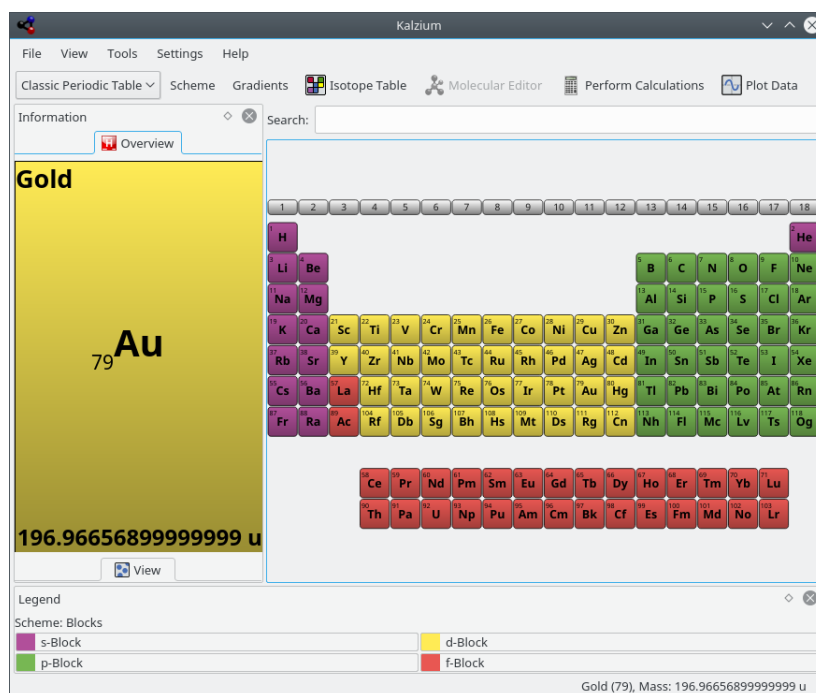
Capítulo 3

Utilización de Kalzium

3.1. Overview of Kalziums usage

Velaquí algunhas imaxes de Kalzium en acción:

O Kalzium é moi doado de usar. Está especialmente deseñado para ser usado por estudantes de todas as idades como referencia rápida e simple.



3.2. O diálogo de información

Accédese ao diálogo de información premendo calquera elemento co botón esquerdo do rato. Este é o lugar no que obter información acerca dun elemento. Cos botóns do fondo do diálogo pódese mudar o elemento que aparece sen fechar o diálogo.

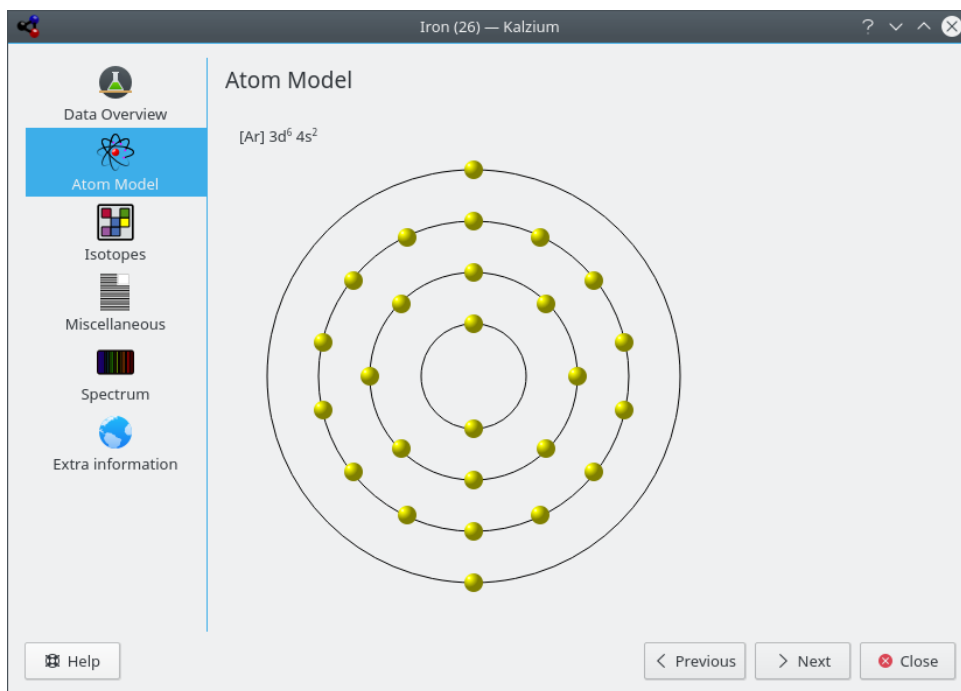
3.2.1. Resumo

In the **Overview** you will find the most important information about the element. In the middle you see the symbol of the Element with it's elemental number in the bottom left. The top-left corner displays the name of the element while the bottom-right corner shows the elemental weight.

Diálogo de información de Kalzium

3.2.2. Orbitais de Bohr

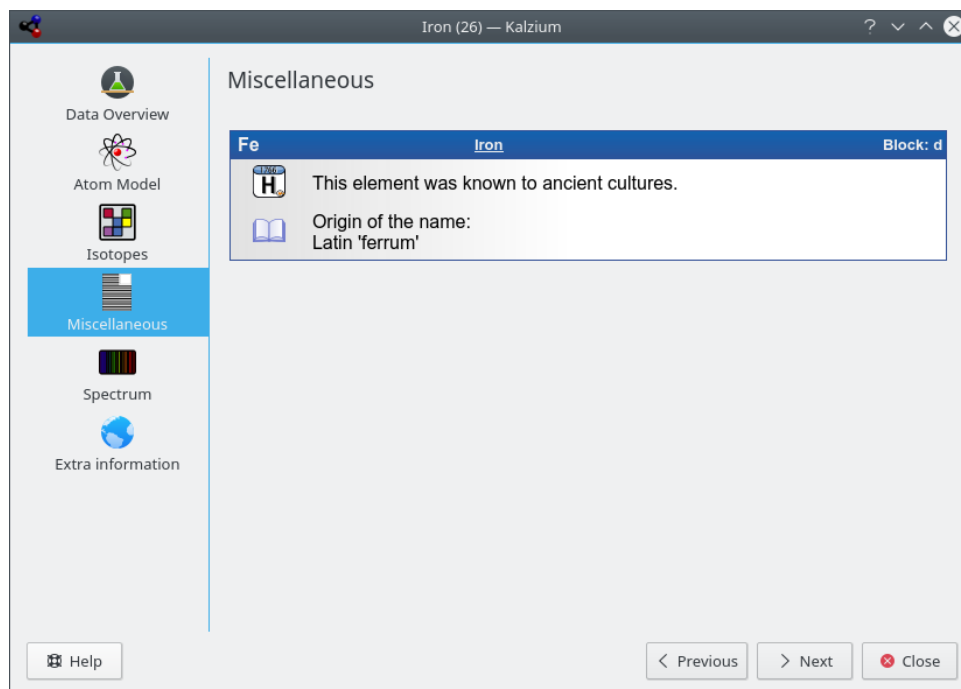
The **Atom Model** tab displays the atomic shells. Every orbit stands for a atomic shell and every yellow circle represents an electron.



3.2.3. Miscellaneous

The **Miscellaneous** tab tells you other information about the current element, including when it was discovered and the origin of the name.

O Manual do Kalzium



3.2.4. Isótopos

The **Isotopes** tab presents information about the isotopes of an element.

Masa

A masa deste isótopo.

Neutróns

O número de neutróns que ten este isótopo.

Porcentaxe

A porcentaxe de átomos existentes que son deste isótopo. Tamén chamada abundancia.

Período de media-vida

Só os isótopos inestábeis teñen período de media-vida. Defínese como o tempo no cal a metade destes isótopos decaen.

Energía e modo de decaemento

Sábese que algúns isótopos emiten partículas de radiación baixo o proceso de decaemento radioactivo. Cada transformación por decaemento libera unha enerxía típica, que está listada xunto co modo de decaemento.

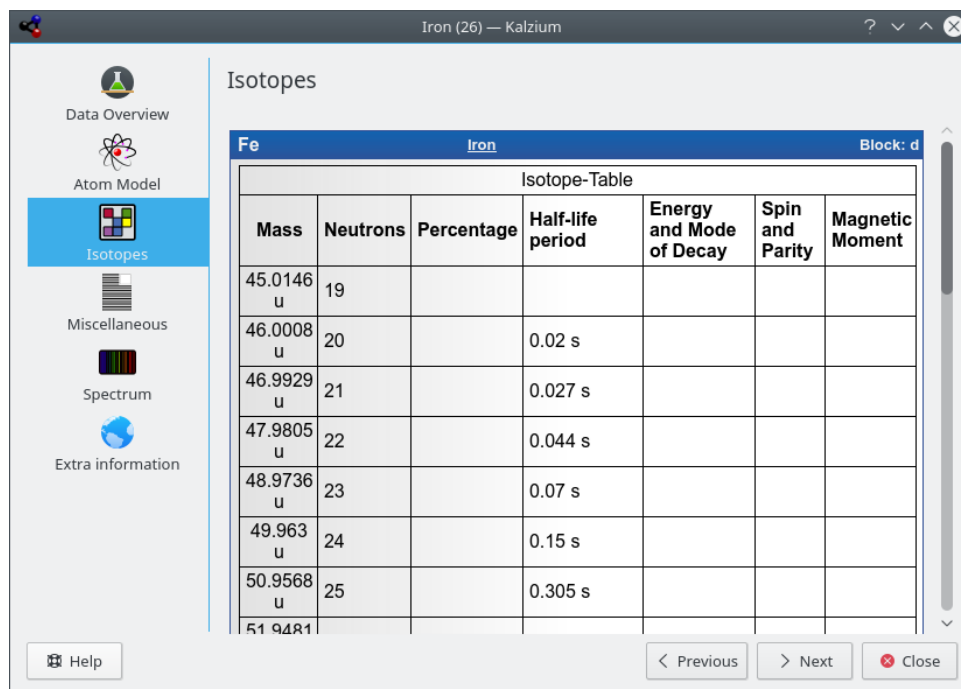
Spin e paridade

A rotación (spin) do núcleo e a súa paridade.

Momento magnético

The magnetic dipolemoment of the nucleus. Measured in units of the nuclear magneton.

O Manual do Kalzium



The screenshot shows the Kalzium software interface for Iron (Fe). The 'Isotopes' tab is selected in the left sidebar. The main window displays a table titled 'Isotope-Table' with the following data:

Mass	Neutrons	Percentage	Half-life period	Energy and Mode of Decay	Spin and Parity	Magnetic Moment
45.0146 u	19					
46.0008 u	20		0.02 s			
46.9929 u	21		0.027 s			
47.9805 u	22		0.044 s			
48.9736 u	23		0.07 s			
49.963 u	24		0.15 s			
50.9568 u	25		0.305 s			
51.9481						

3.2.5. Resumo dos datos

The **Data Overview** tab tells you about different facts related to the element.

Dependendo dos datos dispoñíbeis no Kalzium, vense diferentes raios do elemento. O raio covalente é o radio dun átomo non cargado do elemento nunha molécula. Podería, por exemplo, ser a distancia O-H na auga. O raio atómico é o raio dun átomo elemento, isto é non ligado a nada. O raio de van der Waals defínese como a distancia de dous átomos do mesmo tipo en dúas moléculas iguais, por exemplo, dous átomos de carbono no propano. O último raio posíbel é o raio iónico incluída a súa carga.

A masa dun elemento é a masa media de todos os isótopos en relación á súa porcentaxe.

O Manual do Kalzium

The screenshot shows the 'Data Overview' window for Iron (26) in the Kalzium application. The window title is 'Iron (26) — Kalzium'. On the left, there is a sidebar with navigation options: Data Overview (selected), Atom Model, Isotopes, Miscellaneous, Spectrum, and Extra information. The main area displays the following data:

Property	Value
Melting Point	1808 K
Boiling Point	3023 K
Electron Affinity	0.151 eV
Electronic configuration	[Ar] 3d ⁶ 4s ²
Covalent Radius	125 pm
van der Waals Radius	205 pm
Atomic mass	55.845 u
First Ionization energy	7.902 eV
Electronegativity	1.83
Oxidation states	6, 3, 2, 0, -2

At the bottom of the window, there are buttons for 'Help', '< Previous', '> Next', and 'Close'.

3.2.6. Espectro

The screenshot shows the 'Spectrum' window for Iron (26) in the Kalzium application. The window title is 'Iron (26) — Kalzium'. On the left, the sidebar has 'Spectrum' selected. The main area displays an emission spectrum with a table of data:

Wavelength (nm)	Intensity
248.327	1000
248.814	600
249.064	500
252.285	400
271.903	400
278.81	300
344.061	400
358.119	600
371.993	600
373.486	700

Below the spectrum, there are controls for 'Minimum value: 228nm' and 'Maximum value: 458nm', a 'Reset zoom' button, and 'Spectrum Settings' with 'Unit: nanometers (nm)' and 'Type: Emission spectrum'. At the bottom, there are buttons for 'Help', '< Previous', '> Next', and 'Close'.

3.3. Numeración

A numeración é o xeito de numerar os 18 grupos da táboa periódica. Pódese escoller a numeración entre **IUPAC**, **CAS**, ou **vella IUPAC**, ou apagalala.

The following options in the **View Numeration** menu can be used to change the numeration shown:

- **Sen numeración:** se se activa esta opción, non haberá numeración dos períodos.
- **IUPAC** (por omisión): A IUPAC é a *International Union of Pure and Applied Chemistry* ("Unión internacional de química pura e aplicada"). É unha organización que define a maioría dos estándares químicos. O novo sistema da IUPAC numera cada columna con números árabes do 1 (un) ao 18 (dezaoito).
- **CAS:** O CAS é a *Chemical Abstracts Service* ("Servizo de resumos de química"). No sistema CAS designáronse as letras A e B para o grupo principal de elementos (A) e para os elementos de transición (B). A pesar de que a numeración IUPAC é a oficial, a do CAS aínda é usada en aulas e laboratorios.
- **IUPAC vella:** O sistema vello da IUPAC marcaba as columnas con números romanos seguidos polas letras « A » ou « B ». As columnas foron numeradas de maneira que as do un ao sete eran da « IA » á « VIIA », as columnas da 8 á 10 eran a « VIIIA », da 11 á 17 eran numeradas da « IB » á « VIIB » e a columna 18 era numerada « VIII ». Por mor da confusión que creaban os sistemas vello da IUPAC e o do CAS, a IUPAC adoptou o seu novo sistema.

3.4. Esquemas de cor

Kalzium pode mostrar que elementos están onde con respecto ao seu « bloque » e « grupo » na táboa, segundo o comportamento ácido ou polo estado da materia (isto é sólido/líquido/vapor) no que están a unha temperatura dada.

Color schemes can be changed in the **View** → **Scheme** menu.

- **Monochrome:** all the elements have the same color. You can change the default color by choosing **Settings** → **Configure Kalzium...** and going to the **Colors** tab.
- **Bloques:** mostra unha cor para cada bloque.
- **Iconas:** mostra iconas para cada elemento.
- **Familia:** indica cada unha das nove familias cunha cor.
- **Grupos:** mostra unha cor para cada grupo. Un grupo é unha columna vertical da táboa periódica. Hai 18 grupos na táboa estándar. Os elementos de cada grupo teñen configuracións similares nos electróns de valencia, o que lles dá propiedades semellantes.
- **Gradient**
The gradient views displays the elements according to a property you can select below and with a gradient colored scheme. The elements for which the data is not available are displayed in grey.

O Manual do Kalzium

The screenshot shows the Kalzium software interface. The main window displays the periodic table with Beryllium (Be) highlighted. The interface includes a menu bar (File, View, Tools, Settings, Help), a toolbar with options like 'Classic Periodic Table', 'Scheme', 'Gradients', 'Isotope Table', 'Molecular Editor', 'Perform Calculations', and 'Plot Data'. The main window displays the periodic table with Beryllium (Be) selected, showing its atomic number (4) and atomic mass (9.012181999999992 u). A legend at the bottom indicates the color coding for blocks: s-Block (purple), p-Block (green), d-Block (yellow), and f-Block (red).

- Raio covalente
- van der Waals Radius
- Masa atómica
- Punto de ebulición
- Punto de fusión
- Electronegatividade (Pauling)
- Afinidade electrónica
- Data de descubrimento
- First Ionisation

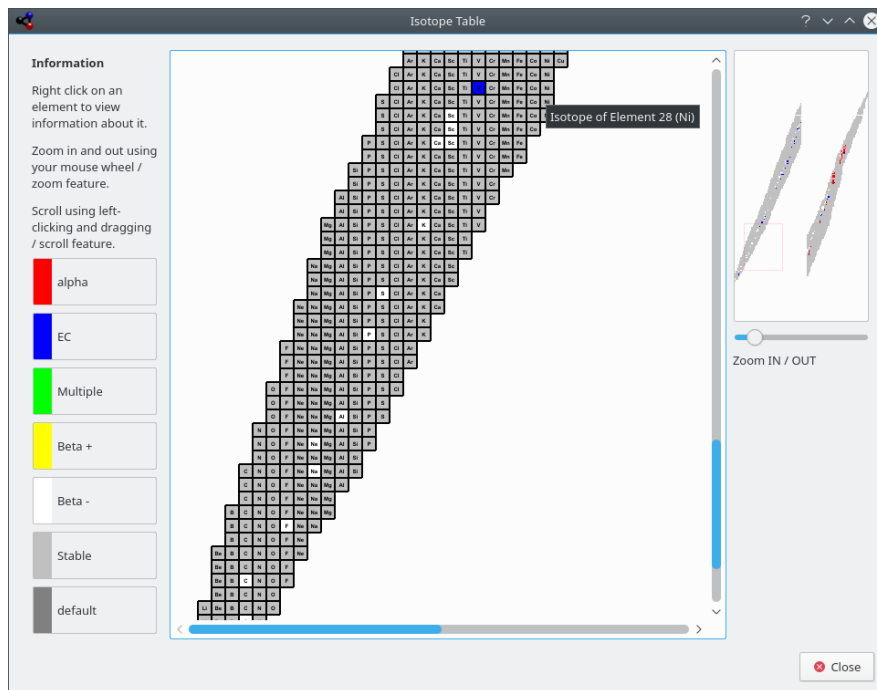
3.5. Ferramentas

3.5.1. Táboa de isótopos

A **táboa de isótopos...** mostra os isótopos dos elementos.

Existen distintos tipos de isótopos, algúns estábeis, outros. Os inestábeis poden decaer como raios alfa ou como dous tipos diferentes de raios beta. As diferenzas reflíctense usando cores diferentes.

O Manual do Kalzium



Kalzium pode mostrar os isótopos dun intervalo de elementos

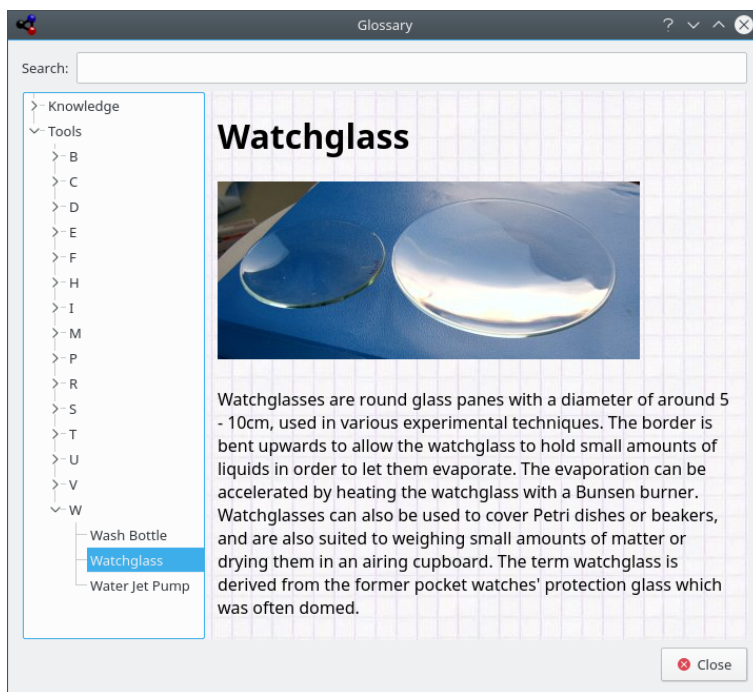
3.5.2. Frases de risco/seguranza

As Frases R/S, coñecidas tamén como Oracións de risco e seguranza ou números R/S, é un sistema de códigos e frases de perigo para etiquetar produtos e compostos químicos perigosos. A frase R/S dun composto consiste nunha parte de risco (R) e unha parte de seguranza (S), seguida cada unha delas por unha combinación de números. Cada número corresponde cunha frase. A frase que corresponde á combinación de letras e números ten o mesmo significado en diferentes idiomas.

3.5.3. Glosario

O glosario fornece definicións das ferramentas máis usadas na química, así como algúns datos. Á esquerda da xanela pódese ver a lista de elementos. Encima hai termos químicos, en baixo hai outra lista de ferramentas de laboratorio.

Na parte superior do widget hai unha barra de procuras. Se se escribe algo na barra, as árbores axústanse de inmediato. O botoniño que hai á dereita da barra de procuras límpaa.



3.5.4. Representar datos

O diálogo **Representar datos...** permite representar algúns datos dos elementos. O eixo X representa un intervalo de elementos (desde un número até o outro). Pódese mudar este intervalo usando os campos **Primeiro elemento** e **Último elemento** do diálogo. O gráfico non será actualizado até que se prema o botón **Representar**.

O diálogo « Representar datos »

O Kalzium pode representar algúns datos dun intervalo de elementos.

3.5.5. Equation Solver

The **Equation Solver** enables the user to solve chemical equations. This is an example:



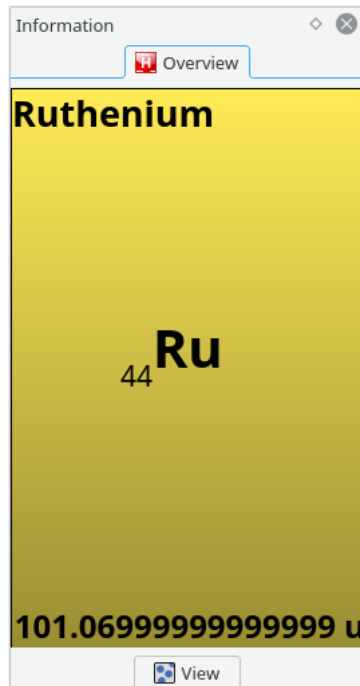
The computed equation will be displayed on the right side of the window. As you can see in the first example you can also define the value of one or more coefficients. The other coefficients will be adjusted. Furthermore, it is possible to use brackets around elements or electronic charges as shown in the last two examples.

the « Equation Solver » Dialog

Kalzium can solve chemical equations

3.5.6. Barra lateral

3.5.6.1. Resumo



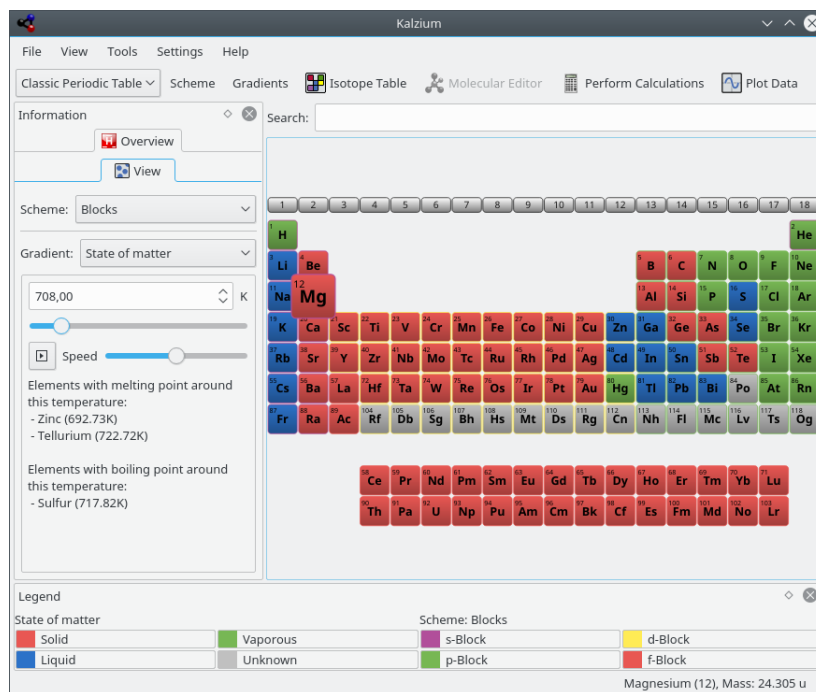
A páxina **Resumo** é a primeira e mostra un resumo do elemento sobre o que está o rato.

3.5.6.2. Estado da materia

A páxina **Estado da materia** é a segunda do panel de navegación.

En primeiro lugar móstranse as iconas e texto seguintes:

O Manual do Kalzium



Kalzium pode mostrar que elementos son sólidos/líquidos/gases a unha temperatura dada.

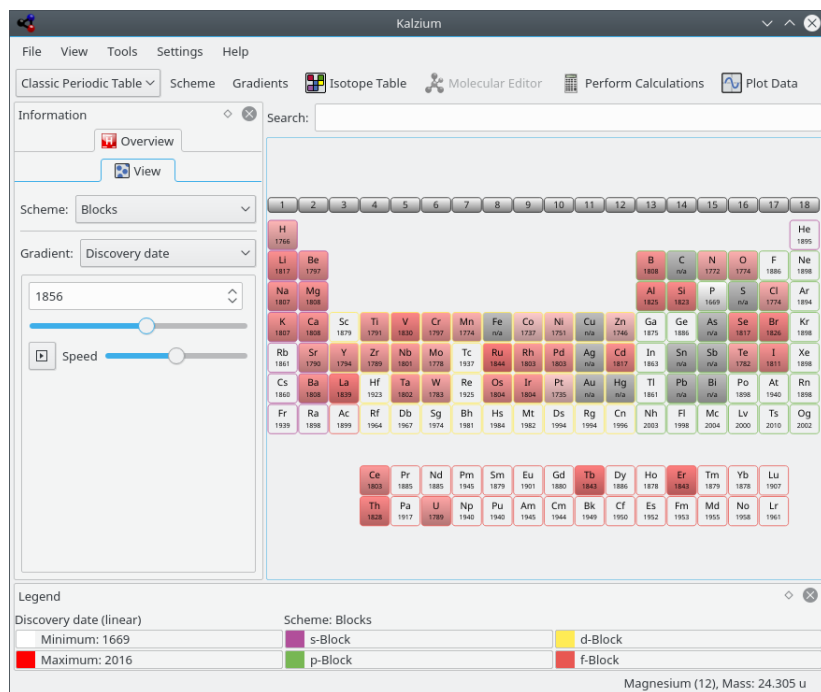
3.5.6.3. Timeline

The **Timeline** feature allows you to explore the elements of the set time period. This is great for getting a feel for how the PSE evolved over time, as more and more elements were discovered. If you move the slider you will notice that some elements disappear if you move it to the left and reappear if you move it to the right. Furthermore the number will change constantly.

O número representa a data na que se está a procurar. Se moves a barra para isto é 1856 só verás os elementos que eran coñecidos no ano 1856.

You will notice that some elements are not even shown in the current year. This is because some of the elements have not been discovered yet but are predicted to exist.

O Manual do Kalzium



A táboa periódica no pasado (elementos coñecidos en 1856)

3.5.6.4. Calcular

A lapela **Calcular** é o derradeiro da barra lateral. Permite calcular pesos moleculares.

En primeiro lugar móstranse as iconas e texto seguintes:

Calcular

Calcular

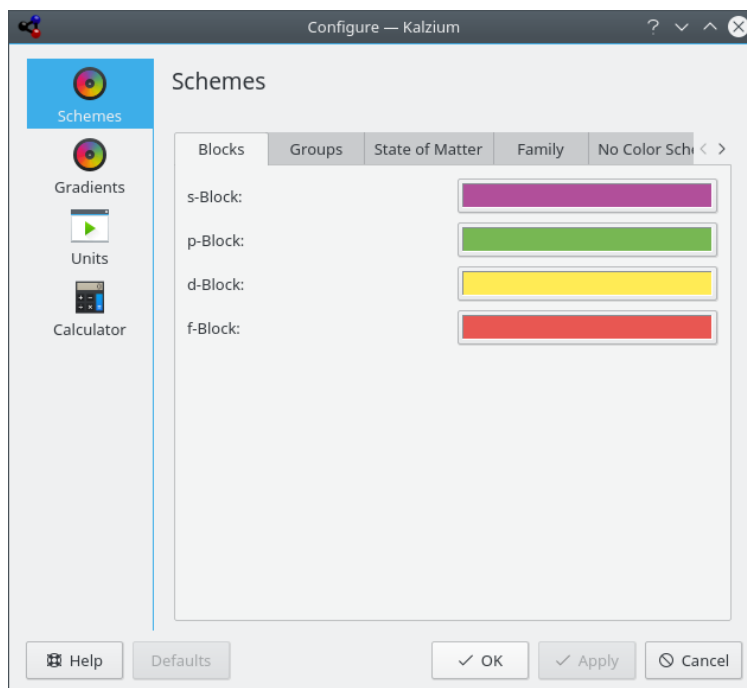
3.5.6.5. Show Legend

The **Show Legend** action allows you to display the legend for the scheme you are in (Groups, Family, Blocks). The legend is displayed by default but if you hide it, it will stay hidden until you choose to show it. Kalzium will keep this setting in its configuration file, so that the next time you run it, the setting will be as you left it.

Capítulo 4

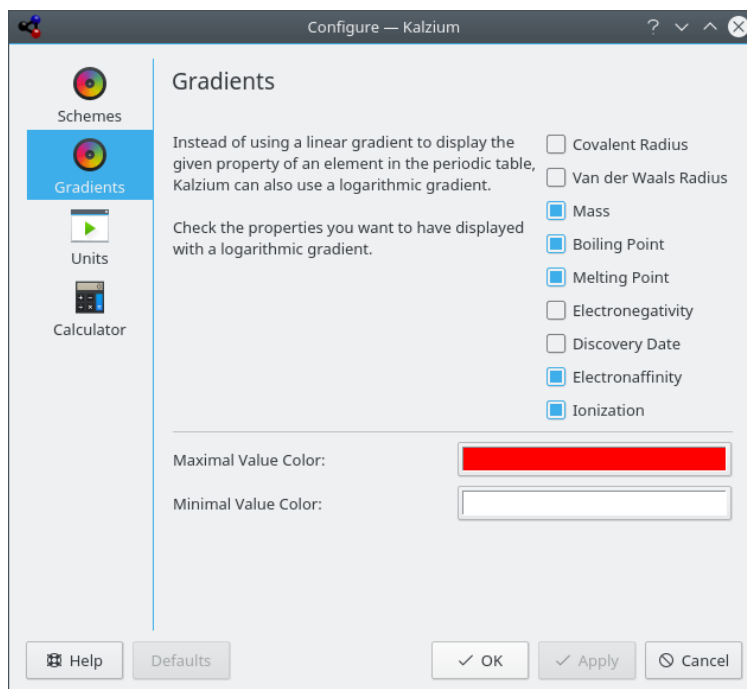
Configuración de Kalzium

Kalzium ten múltiples opcións de configuración, ás que se pode acceder abrindo o diálogo de configuración mediante **Configuración** → **Configurar Kalzium...** no menú.

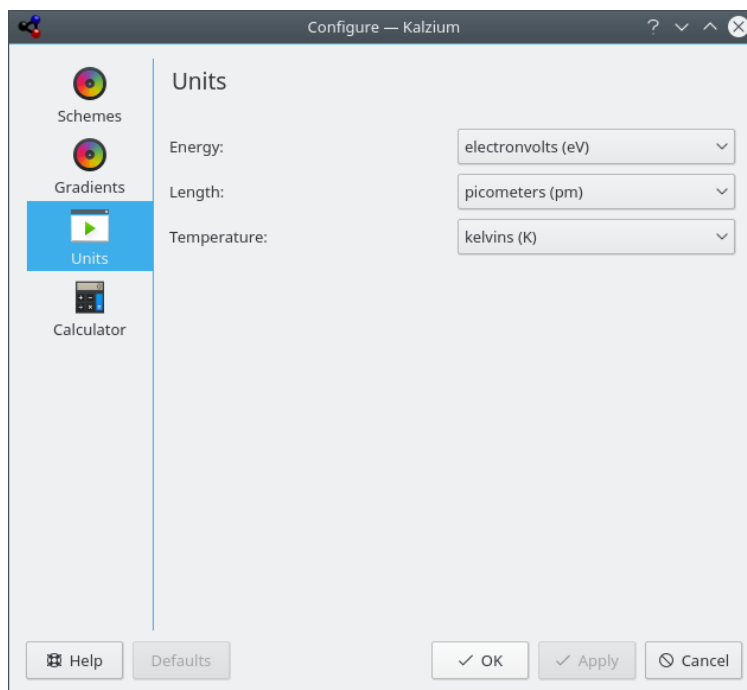


In the **Colors** tab, you can change the different colors for each scheme.

O Manual do Kalzium



In the **Units** tab, you can choose the units. You can select if you prefer kJ/mol by default or you can choose eV. The Temperature is in Kelvin by default but you can change to degrees Celsius or degrees Fahrenheit.



In the **Miscellaneous** tab, you can select to display the atomic mass or only the element numbers in the PSE.

Capítulo 5

Referencia das ordes

5.1. Menús e atallos do teclado

5.1.1. The File Menu

Ficheiro → **Gardar como...**

Save Kalziums table as image.

Ficheiro → **Saír (Ctrl+Q)**

Sae de Kalzium.

5.1.2. The View Menu

Vista → **Numeración** → **Sen numeración**

Non mostrar ningún esquema de numeración

Vista → **Numeración** → **IUPAC**

Mostrar a numeración da IUPAC.

Vista → **Numeración** → **CAS**

Mostrar a numeración CAS.

Vista → **Numeración** → **IUPAC vella**

Mostrar a antiga numeración da IUPAC.

View → **Scheme** → **One Color**

Mostrar todos os elementos cunha cor de fondo.

Vista → **Esquema** → **Bloques**

Mostrar os catro bloques dos elementos.

Vista → **Esquema** → **Iconas**

Mostrar iconas por cada elemento.

Vista → **Esquema** → **Familia**

Mostrar as familias dos elementos.

Vista → Esquema → Grupos

Mostrar os grupos de elementos.

View → Gradient → No Gradient

Desactivar os gradientes da táboa.

View → Gradient → Covalent Radius

Display the elements covalent radius.

View → Gradient → van Der Waals

Display the elements van der Waals radius.

View → Gradient → Atomic Mass

Display the elements atomic mass.

View → Gradient → Boiling Point

Display the elements boiling point.

View → Gradient → Melting Point

Display the elements melting point.

View → Gradient → Electronegativity (Pauling)

Display the elements electronegativity.

View → Gradient → Electronaffinity

Display the elements electron affinity.

View → Gradient → Discovery date

Mostrara data de descuberta de cada elemento con cores de fondo distintas para cada século.

View → Gradient → First Ionisation

Display the elements energy of first ionisation.

View → Tables → Table: Classic Periodic Table

Mostrar a táboa periódica clásica con todos os elementos.

View → Tables → Table: Short Periodic Table

Mostrar unha táboa periódica sen os elementos de transición.

View → Tables → Table: Transition Elements

Mostrar unha táboa periódica con só os elementos de transición.

View → Tables → Table: DZ Periodic Table

Este elemento representa a táboa DZ *Deutscher Zentralausschuss* suxerida polo “Comité Central Alemán”.

View → Show/Hide Legend

Toggle the legend view.

View → Show/Hide Sidebar

Comutar a barra lateral.

5.1.3. The Tools Menu

Ferramentas → Representar datos...

Abrir o diálogo Representar datos.

Ferramentas → Táboa de isótopos...

Abrir a xanela coa táboa de isótopos.

Ferramentas → Glosario...

Abrir o glosario.

Ferramentas → Solucionador de ecuacións...

Abrir o diálogo de Resolución de Ecuacións

Tools → Convert chemical files...

Open a dialog to import and export a wide range of chemical file formats and data types with the Open Babel library.

Ferramentas → Frases R/S

Abrir o diálogo de **Frases de risco e seguranza**.

Ferramentas → Táboas...

Mostrar un diálogo co **Alfabeto grego** e os **prefixos numéricos e numerais romanos**.

View → Tools → Molecular Editor...

Abrir o diálogo do Editor de moléculas.

Tools → Export Data...

Opens a dialog where you can select **Elements** and their **Properties** to export them to a HTML file.

5.1.4. The Settings Menu

Configuración → Mostrar a barra de ferramentas

Conmutar a barra de ferramentas principal.

Configuración → Mostrar a barra de estado

Toggle the Statusbar.

Configuración → Configurar os atallos de teclado...

Configurar as teclas que usar para acceder ás diferentes accións.

Configuración → Configurar as barras de ferramentas...

Configurar os elementos que aparecen na barra de ferramentas.

Configuración → Configurar Kalzium...

Mostrar o diálogo de configuración de Kalzium.

5.1.5. The Help Menu

Axuda → Manual do Kalzium (F1)

Inicia o sistema de axuda de KDE, mostrando na documentación do Kalzium. (este documento).

Axuda → Que é isto? (Maiúsc+F1)

Muda o cursor do rato para unha mistura de unha frecha cun sinal de interrogación. Ao premer nos itens de Kalzium abrirá una fiestra de axuda (de habela para o ítem) que explica a función do ítem.

Axuda → Informar dun erro...

Abre o diálogo de Enviar informes de erro mediante o que pode comunicar un erro ou « pedir » unha funcionalidade.

Axuda → Acerca de Kalzium

Mostra a versión do programa e a información de autoría.

Axuda → Acerca de KDE

Mostra a versión de KDE e outra información básica.

Capítulo 6

Preguntas e respostas

1. *Terei que pagar algunha vez por Kalzium?*

Non, nunca. Pero o autor sempre agradecerá un correo dándolle azos ou un DVD dándolle as « grazas ». Kalzium é distribuído sob a licenza [GPL](#), polo que nunca terá que pagar por este programa.

Capítulo 7

Como podo contribuír?

1. *Axúdeme cos datos.*

No mundo da ciencia, o avance é bastante rápido. Se algunha vez acha un valor incorrecto ou a faltar, envíeme un email.

2. *Atope erros ou faga suxestións*

Se atopa erros no programa ou ten suxestións para melloralo, fágamo saber en cniehaus@kde.org.

Capítulo 8

Recoñecementos e licenza

Kalzium

Copyright do programa, 2001-2005 Carsten Niehaus cniehaus@kde.org

Colaboradores:

- Pino Toscano toscano.pino@tiscali.it

mvillarino@users.sourceforge.net

Xoséxosecalvo@gmail.com

Esta documentación está licenciada sob os termos da [GNU Free Documentation License](#).

Este programa está licenciado sob os termos da [Licenza Pública Xeral de GNU](#).

Apéndice A

Instalación

A.1. Como obter Kalzium

Kalzium forma parte do proxecto KDE <http://www.kde.org/> .

Pode encontrar Kalzium no paquete kdedu en <ftp://ftp.kde.org/pub/kde/> , o servidor principal do proxecto KDE.

A.2. Requirements

Kalzium pódese atopar na [páxina web de Kalzium](#) e fai parte do proxecto KDE-Edu

A.3. Compilación e instalación

Para poder compilar e instalar o Kalzium no sistema, escriba os seguintes comandos no directorio raíz da distribución de Kalzium:

```
% ./configure
% make
% make install
```

Dado que Kalzium emprega **autoconf** e **automake** non debera ter ningún problema a compilalo. Se o tiver, comuníquelo nas listas de KDE.