Carsten Niehaus Traduction française : Ludovic Grossard Traduction française : Gérard Delafond Traduction française : Anne-Marie Mahfouf Traduction française : Yohann Hamon Traduction française : Olivier Delaune Traduction française : Xavier Besnard



Table des matières

1	Intro	oduction	1	6
2	Gui	de de dé	marrage rapide de Kalzium	7
3	Utili 3.1 3.2 3.3 3.4 3.5 3.6 3.7	isation of Vue d'e La boît 3.2.1 3.2.2 3.2.3 3.2.4 3.2.5 3.2.6 Tableau Numér Modèle Gradie: Outils 3.7.1 3.7.2 3.7.3 3.7.4 3.7.5 3.7.6	le Kalzium ensemble de l'usage de Kalzium e de dialogue d'information Vue d'ensemble des données Orbitales de Bohr Orbitales de Bohr Isotopes Divers Spectre Informations supplémentaires Ix otation es de couleurs nts Éditeur moléculaire Table des isotopes Tracer les données Réaliser les calculs Phrases de risque / sécurité	10 10 10 11 11 12 13 14 15 16 16 17 18 19 20 24 25
		3.7.7 3.7.8	Tableaux	26 27 27 27
4	Con	figuratio	on de Kalzium	30
5	Réfé 5.1	érence d Menus 5.1.1 5.1.2 5.1.3	es commandes et touches de raccourci	 33 33 33 35
		5.1.4	Les menus Configuration et Aide	35

6	Questions et réponses	36
7	Comment puis-je contribuer?	37
8	Remerciements et licence	38

Résumé

Kalzium est un programme qui vous montre le tableau périodique des éléments. Vous pouvez utiliser Kalzium pour rechercher des informations sur les éléments ou pour apprendre des choses sur le tableau périodique.

Chapitre 1

Introduction

Kalzium vous fournit toutes sortes d'informations sur le tableau périodique des éléments. Vous pouvez découvrir beaucoup d'informations sur les éléments et utiliser l'afficheur pour les voir. C'est libre et sous licence GNU.

Vous pouvez afficher le tableau périodique des éléments par groupe, par bloc et par famille. Vous pouvez tracer des données pour un ensemble d'éléments, telles que la température de vaporisation ou la masse atomique, pour un éventail d'éléments. Vous pouvez revenir dans le temps et voir quels éléments étaient connus à une date donnée. Vous pouvez également calculer la masse molaire de molécules.

Chapitre 2

Guide de démarrage rapide de Kalzium

Voilà comme est l'application Kalzium la première fois que vous la lancez, soit en sélectionnant**Applications** \rightarrow **Éducation** \rightarrow **Science** \rightarrow **Kalzium** à partir du lanceur d'applications ou avec **Alt+F2** et en saisissant **kalzium** dans la zone de saisie.



Kalzium est divisé en un panneau de navigation sur la gauche (en rouge), l'affichage du tableau (en bleu) affichant les éléments du tableau périodique et un panneau de légende en bas (en vert). La barre de menu standard vous permet de choisir ce que vous voulez afficher et la barre d'état affiche les données. Vous pouvez cacher le tableau et les panneaux en utilisant le menu Affichage. Par exemple, vous pouvez cacher le panneau d'informations avec Affichage \rightarrow Informations.

Lorsque vous déplacez le pointeur de la souris sur un élément du tableau, une vue d'ensemble de l'élément courant est affichée dans l'onglet **Vue d'ensemble** du panneau de navigation.

Vous pouvez choisir plusieurs types d'affichage pour le tableau : tableau périodique classique, tableau périodique court, tableau périodique étendu, etc.. Il est également possible de modifier le

schéma de numérotation ou d'afficher les éléments par famille, par groupe, par structure cristalline, en fonction de leur comportement acide, etc.. Vous pouvez changer tout cela dans le menu **Affichage**.

Si vous voulez connaître certaines données sur un élément particulier, cliquez dessus dans le tableau et la boîte d'information s'affichera.



Vous pouvez tracer des données en utilisant l'élément du menu **Outils** \rightarrow **Tracer les données...** Vous choisissez ce que vous voulez tracer sur l'axe des « y » et une sélection d'éléments à tracer sur l'axe des « x ». Cliquer sur le bouton **d'échange** entre les panneaux d'axes pour intervertir les axes « x » et « y ».





Le glossaire (**Outils** \rightarrow **Glossaire...**) définit les mots de la chimie les plus importants et vous affiche des images des instruments les plus communs ainsi qu'une explication.

Chapitre 3

Utilisation de Kalzium

3.1 Vue d'ensemble de l'usage de Kalzium

Kalzium est simple à utiliser. Il est spécialement destiné aux étudiants de tous âges pour utiliser une base de données simple et rapide.

Voici une capture d'écran de Kalzium en action :



3.2 La boîte de dialogue d'information

La boîte de dialogue d'information est obtenue en cliquant avec bouton gauche de la souris sur n'importe quel élément. C'est l'endroit où vous obtenez des informations sur un élément. À l'aide des boutons en bas de la boîte de dialogue, vous pouvez changer l'élément qui est affiché sans fermer la boîte de dialogue.

3.2.1 Vue d'ensemble des données

La page **Vue d'ensemble des données** vous donne des informations sur différentes données relatives à l'élément.

En fonction des données disponibles dans Kalzium vous verrez différents rayons pour l'élément. Le rayon de covalence est le rayon d'un atome neutre de l'élément dans une molécule. Un exemple pourrait par exemple être la distance O-H dans l'eau. Le rayon atomique est le rayon d'un atome élémentaire, c'est-à-dire non lié à quoi que ce soit. Le rayon de van der Waals est défini comme la distance de deux atomes du même élément dans deux molécules identiques, par exemple deux atomes de carbone dans le propane. Le dernier rayon disponible est le rayon ionique qui prend en compte la charge.

La masse d'un élément est la moyenne des masses de ses isotopes pondérées par leur pourcentage respectif.



3.2.2 Orbitales de Bohr

La page **Modèle de l'atome** affiche les orbitales atomiques. Chaque cercle représente une orbitale atomique et chaque point jaune un électron.



3.2.3 Isotopes

La page **Isotopes** vous donne des informations sur les isotopes d'un élément.

Masse

La masse de cet isotope.

Neutrons

Le nombre de neutrons que cet isotope possède.

Pourcentage

Le pourcentage d'atomes étant de ce type d'isotope. Aussi appelé abondance.

Temps de demi-vie

Seuls les isotopes instables ont un temps de demi-vie. Il est défini comme le temps au cours duquel la moitié des isotopes s'est désintégrée.

Énergie et mode de désintégration

Quelques isotopes sont connus pour émettre des particules radiatives durant le processus de désintégration radioactive. Chaque désintégration dégage une quantité donnée d'énergie, laquelle est notée avec le mode de désintégration.

Spin et parité

Le spin du noyau et sa parité.

Moment magnétique

Le moment magnétique dipolaire du noyau. Mesuré en unités de magnéton nucléaire.

\odot		Fer	(26) – Kalzium		 S S
	Isotopes				
Vue d'ensemble des données	Fe		<u>Fer</u>		Groupe : d
×			٦	Table des isoto	opes
ièle de l'atome	Masse	Neutrons	Pourcentage	Demi-vie	Énergie et mode de désintégratior
Isotopes	45,0146 u	19			
Divers	46,0008 u	20		0,02 s	
Spectre	46,9929 u	21		0,027 s	
mation	47,9805 u	22		0,044 s	
émentaire	48,9736 u	23		0,07 s	
	49,963 u	24		0,15 s	
	50,9568 u	25		0,305 s	
	51,9481 u	26		29 790 s	
	<				
Aide			- <u>P</u>	récédent 🕨 🕨	Suivant 🙆 Eerme

3.2.4 Divers

La page **Divers** vous donne d'autres informations sur l'élément courant, incluant sa date de découverte et l'origine de son nom.



3.2.5 Spectre

La page **Spectre** vous donne le spectre des éléments. Vous pouvez choisir la gamme de longueurs d'onde, les unités et le type de spectre. Le tableau d'intensité peut être vu dans la partie en bas à droite de la page.



3.2.6 Informations supplémentaires

La page **Informations supplémentaires** vous donne des liens vers les articles de Wikipédia, du Laboratoire « Jefferson » et de WebElements.



3.3 Tableaux

Le tableau périodique peut être représenté de différentes manières. Vous pouvez modifier la vue du tableau à partir du menu **Affichage** ou de la liste déroulante de la barre d'outils.

Les options suivantes dans le menu Affichage \rightarrow Tables peuvent être utilisées pour changer le tableau affiché :

Tableau périodique classique

Affiche un tableau périodique classique avec tous les éléments.

Tableau périodique court

Affiche un tableau périodique sans les éléments de transition.

Tableau périodique long

Affiche un tableau périodique avec les éléments de transition (bloc f) inclus.

Éléments de transition

Affiche un tableau périodique composé uniquement des éléments de transition.

Tableau périodique des éléments DZ

Cet objet représente la table que la DZ *Deutscher Zentralausschuss* « German Central Committee » propose.

3.4 Numérotation

La numérotation est la façon de numéroter les 18 groupes du tableau périodique. Vous pouvez changer la numération en **IUPAC**, **ancien IUPAC** ou **CAS** ou encore la désactiver complètement.

Les options suivantes dans le menu **Affichage Numérotation** peuvent être utilisées pour changer les numérotations affichées :

 Pas de numérotation : si cette option est activée, aucune numérotation de groupe ne sera utilisée.

- IUPAC (par défaut) signifie International Union of Pure and Applied Chemistry. C'est une organisation qui définit les standards en ce qui concerne la chimie. Le nouveau système IUPAC numérote chaque colonne avec des chiffres arabes de 1 (un) à 18 (dix-huit).
- CAS signifie Chemical Abstracts Service. Dans le système CAS, les lettres A et B désignent les éléments du groupe principal (A) et les éléments de transition (B). Bien que la numérotation IUPAC soit la numérotation officielle, la numérotation CAS est toujours utilisée dans les salles de classe et les laboratoires.
- L'ancien système IUPAC numérotait les colonnes avec des chiffres romains suivis soit par la lettre "A", soit par la lettre "B". Les colonnes étaient numérotées de la façon suivante : les colonnes de un à sept étaient numérotées de "IA" à "VIIA ", les colonnes de 8 à 10 étaient numérotées "VIIIA", les colonnes de 11 à 17 étaient numérotées "IB" à "VIIB " et la colonne 18 était numérotée "VIII". À cause de la confusion entre les systèmes de l'ancien IUPAC et du CAS, l'organisation IUPAC adopta son nouveau système.

3.5 Modèles de couleurs

Kalzium peut vous montrer où sont les éléments en fonction de leur "bloc" et "groupe" périodique, leur comportement avec l'acide et sous quel état de la matière (c'est-à-dire solide, liquide, gaz) ils se trouvent à une température donnée.

Les modèles de couleur peuvent être changés dans le menu Affichage \rightarrow Modèle de couleurs, dans la liste déroulante de la barre d'outils, ou dans l'onglet Affichage du panneau latéral.

- Monochrome : tous les éléments ont la même couleur. Vous pouvez changer la couleur par défaut en choisissant Configuration → Configurer Kalzium... puis en allant dans la pageCouleurs.
- Blocs : affiche une couleur différente pour chaque bloc.
- Iconique : affiche une icône pour chaque élément.
- Famille : représente chacune des neuf familles à l'aide d'une couleur.
- Groupes : affiche une couleur pour chaque groupe. Un groupe est une colonne verticale dans le tableau périodique des éléments. Il y a 18 groupes dans le tableau périodique standard. Les éléments d'un même groupe ont des configurations similaires dans leurs couches de valence électroniques, ce qui leur donne des propriétés similaires.
- Couleurs : de jolies couleurs sans signification. (A partir du projet Open Babel).

3.6 Gradients

L'affichage graduel présente les éléments, en fonction d'une propriété que vous pouvez sélectionner en dessous, à l'aide d'une variation de couleurs. Les éléments pour lesquels les données ne sont pas disponibles sont affichés en gris.

Les gradients peuvent être changés dans le menu **Affichage** \rightarrow **Gradients**, dans la liste déroulante de la barre d'outils, ou dans l'onglet Affichage du panneau latéral.

🔩 💿						Ka	zium										۲	 ×
Tableau périodique des éléments classique V Modèle de	couleuray	Gradiente	, 📳 i	fable des iso	otopes	칥 Édites	ir molécula	ire 🗐	Réaliser le	es calculs	Tra	icer les dor	nées					
Information O X	Cherche	r : 🚺			_													
🔢 Vue d'ensemble																		
Béryllium																		
	1	2	3	4	5	6	7		9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
	H 37																	He 32
	: Li 134	Be 90											B 82	C 17	N 75	0 73	F 71	Ne 69
	Na 154	Mg 130											Al 118	Si 111	P 106	S 102	Cl 99	Ar 97
Bo	K 194	Ca 174	Sc 144	Ti 136	V 125	Cr 127	Mn 139	Fe 125	C o 126	Ni 121	Cu 138	Zn 121	Ga 126	Ge 122	A s 119	Se 116	Br 114	Kr 110
4	Rb 211	Sr 192	Y 162	Zr 148	Nb 137	M o 145	Tc 156	Ru 126	Rh 135	P d 131	Ag 153	Cd 148	In 144	Sn 141	S b 138	Te 135	 133	Xe 130
	C s 225	B a 198	La 169	Hf 150	Ta 138	W 146	Re 159	0 s 128	lr 137	Pt 128	Au 144	Hg 149	Tİ 148	Pb 147	Bi 146	Po nia	At Na	Rn 145
	Fr nia	Ra n/a	Ac n/a	Rf n/a	Db n/a	Sg nia	Bh n/a	Hs n/a	Mt Na	D s n/a	R.g n(a	Cn n/a	Uut n/a	Uuq n/a	Uup n/a	Uuh Na	Uus nia	Uuo n/a
				Ce Na	Pr n/a	Nd n/a	Pm n/a	Sm n/a	Eu N/A	Gd Wa	Tb nia	Dy nia	Ho n/a	Er n/a	Tm n/a	Yb n'a	Lu 160	
9.012182 u				Th n/a	Pa n/a	U n°a	Np n/a	Pu n/a	Am n/a	Cm N/a	Bk n/a	Cf nla	Es n/a	Fm n/a	Md Na	No nia	Lr n(a	
Calculer																		
Légende																		• ×
Minimum : 32 pm			B	ae coule oc s	urs : Bloo	cs					В	oc d						
Maximum : 225 pm			BI	ocp							BI	loct			Rénd	ium (4)	massa · I	012182

Les gradients suivants sont implémentés (vous pouvez cliquer sur certains éléments listés) :

- Aucun : ne pas utiliser les dégradés.
- État de la matière
- Rayon de covalence
- Van der Waals : gradient par rayon de van der Waals.
- Masse atomique
- Point d'ébullition
- Point de fusion
- Électronégativité (Pauling)
- Affinité électronique
- Date de découverte
- Énergie d'ionisation

3.7 Outils

3.7.1 Éditeur moléculaire

L'éditeur moléculaire vous permet d'afficher et de modifier des molécules en utilisant les bibliothèques Avogadro.

En utilisant le tableau de bord sur la gauche, vous pouvez modifier les paramètres d'affichage, modifier une molécule ou mesurer des molécules. Il y a trois onglets dans ce tableau de bord : **Affichage, Modifier**, et **Mesure**. En haut de la fenêtre, il y a un bouton permettant de choisir l'afficheur de **Style :** (peut être **Boules et bâtons, Licorice, Van der Waals, Van der Waals (AO)** (AO signifie "Association ambiante") ou **Fil de fer**). Les boutons le long le bas de la fenêtre peuvent être utilisés pour**Charger une Molécule, Télécharger de Nouvelles Molécules, Enregistrer une molécule** et **Fermer** la fenêtre. Les fichiers téléchargés seront enregistrés dans votre dossier Docu ment s à partir duquel vous pourrez les charger dans l'éditeur.

Le panneau **Statistiques** affiche le nom (si disponible), la formule, et la masse de la molécule.

L'onglet « Affichage » peut être utiliser pour afficher une molécule chargée. En cliquant dans la vue avec le pointeur de souris, vous pouvez modifier l'angle d'affichage. Utilisez le bouton gauche de la souris pour tourner la molécule, le bouton droit de la souris pour la bouger, et le bouton central de la souris pour zoomer.

L'onglet **Modifier** permet de modifier une molécule. Vous pouvez ajouter des éléments en les choisissant dans la liste déroulante **Éléments** et en cliquant avec le bouton gauche de la souris dans le panneau d'affichage sur la droite.

L'onglet **Mesure** peut être utilisé pour mesurer des distances et des angles dans une molécule. Pour réaliser la mesure, utilisez les instructions données dans cet onglet.



3.7.2 Table des isotopes

La Table des isotopes vous présente les isotopes des éléments.

Il existe plusieurs sortes d'isotopes, certains sont stables, d'autres ne le sont pas. Les isotopes instables peuvent décroître par rayonnement alpha ou par un des deux rayonnement bêta qui existent. Ces différences sont schématisées par différentes couleurs.



Kalzium peut afficher les isotopes d'un ensemble d'éléments.

3.7.3 Tracer les données

La boîte de dialogue **Tracer les données** vous permet de tracer certaines informations sur des éléments. L'axe des abscisses représente une plage d'éléments (d'un nombre donné jusqu'à un nombre plus élevé). Vous fixez cette plage en utilisant les champs **Premier élément :** et **Dernier :** et **Dernier élément :** et **Dernier :** et **Dern**



Kalzium peut tracer des données pour une plage d'éléments.

3.7.4 Réaliser les calculs

Réaliser les calculs correspond au calculateur de Kalzium. Ce calculateur contient une variété de calculateurs pour différentes tâches réalisant différents calculs.

Vous pouvez trouver les calculateurs suivants dans Kalzium :

Calculateur de masse moléculaire

Ce calculateur vous aide à calculer les masses moléculaires de différentes molécules. Vous pouvez saisir des noms abrégés pour la molécule en rajoutant des alias.

Calculateurs Calculateur Actions Calculateur Actions Calculateur Actions Solveur d'équations Solveur d'équations Ce He O1 Masse moléculaire : 94.1112 u Détails Composition Compo				Calzium	Calculateur moléculaire – H			
Détails Détails Calculateur d'égastions C 6 He 01 Calculateur d'égastions C 6 He 01 Masse moléculaire : 94 1112 u Détails Cemposition Détails Élément : Atomes : Masse atomique : Masse atomique : Passe totale : Pourcentage Allas utilisés Élément : Atomes : Masse atomique : Masse atomique : Passe totale : Pourcentage 1 1 : Carbone : 6 : 12:017 : 72,0642 : 76,5734 1 2 : Hydrogène : 6 : 1.00794 : 6,04764 : 6,42605 1 3 : Oxygène : 1 : 15:3994 : 15:3994 : 17,0005 1							ulateur Alias	teurs Ca
Calculater di ega at Solvear d'équations Ce He O1 Masse moléculaire : 94.1112 u Cemposition Composition Composition Cemposition Cemposition Cempos	Calc.						201	culateur de masse culateur de conce
Détails Allas utilisés Composition Détails Allas utilisés Élément Atomes Masse atomique Masse atomique 1 Carbone 6 12.017 72,0642 76,5734 2 Hydrogène 6 1.00794 6,04764 6,42605 1 3 Oxygène 1 15.9994 15,5994 17,0005 I				C6 H6 01			100H	culateur nucléaire culateur de gaz veur d'équations
Détails Allas utilisés Cemposition Alas utilisés Élément : Atomes : Masse atomique : Masse atomique : Peurcentage Allas utilisés I Garbone 6 12:0107 72:0642 75:573.4 1 2 Hydropène 6 1.00794 6.04764 6.42605 1 3 Oxygène 1 15:9994 15:3994 17:0005 1						94.1112 u	se moléculaire :	Ma
Détails Allas utilisés Élément : Atomes : Masse atomique : Masse atomique : Pourcentage 1 Carbone 6 120197 72,0642 76,5734 allas 2 Hydrogène 6 1.00794 6,02764 6,42605 1 3 Oxygène 1 15,5994 15,8994 17,0005 I								
Détails Allas utilisés Composition Flément Atomes Masse atomique Masse totale Pourcentage alias 1 Carbone 6 12,0107 72,0642 76,5734 1 2 Hydrogène 6 1,00794 6,04764 6,42605 1 3 Oxygène 1 15,9994 17,0005 I I								
Détails Allas utilisés Élément : Atomes : Mass atomique : Masse atomicue : Masse at								
Détails Allas utilisés Composition Élément : Atomes : Masse atomique : Masse atomique : Pourcentage Allas utilisés 1 Carbone 6 12:0107 72:0642 76;5734 1 2 Hydrogène 6 1.00794 6:04764 6:42605 6 3 Øxygène 1 15:5994 15;5994 17;0005 1								
Détails Allas utilisés Composition Allas utilisés Élément Atomes : Masse atomique : Masse atomique : Pourcentage 1 Carbone 6 120107 72,0642 76,5734 2 Hydropène 6 1.00794 6,04764 6,42665 3 Oxygène 1 15,9994 15,3994 17,0005								
Détails Composition Elément : Atomes : Masse atomique : Masse totale : Pourcentage Carbone 6 12.0107 72.0642 76.5734 Hydrogène 6 1.00754 6.04764 6.42605 Oxygène 1 15.9594 15.9594 17.0005 C								
Détails Composition Allas utilisés Élément Atomes Masse atomique Masse totale Pourcentage 1 Carbone 6 12,0107 72,0642 76,5734 1 2 Hydrogène 6 1,00794 6,02764 6,42605 1 3 Oxygène 1 15,9994 15,9994 17,0005 I								
Détails Allas utilisés Élément Atomes Masse atomique Masse atomique Pourcentage I Carbone 6 12.0107 72,0642 76,5734 I 2 Hydrogène 6 1.00794 6,04764 6,42605 I I 3 Oxygène 1 15.9994 15,3994 17,0005 I								
Détails Allas utilisés Composition Allas utilisés Élément: Atomes : 1 Carbone 2 Hydropène 3 Oxygène 1 15,3994 15,3994 17,0005								
Composition Allas utilisés Élément Atomes Masse atomique Masse atomique Pourcentage 1 Carbone 6 12.0107 72.9642 76,5734 1 2 Hydrogène 6 1.00794 6,04764 6,42665 1 3 Oxygène 1 15.9994 15,9994 17,0005				Détails				
Élément Atomes Masse atomique Masse totale Peurcentage allas 1 Carbone 6 12.0107 72.0642 76.5734 1 1 Ph: C6H5 2 Hydrogène 6 1.00794 6.04764 6.42665 3 0.ygène 1 15.9594 17,0005 <td< td=""><td></td><td>lias utilisés</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td>mposition</td><td>c</td></td<>		lias utilisés					mposition	c
1 Carbone 6 12.0107 72.0642 76.5734 1 Ph: C6HS 2 Hydrogène 6 1.00794 6.04764 6.42605 3 Oxygène 1 15.9994 17,0005		alias	Pourcentage	Masse totale	Masse atomique	Atomes	Élément	
2 Hydrogène 6 1.00794 6,04764 6,42605 3 Oxygène 1 15,9994 15,9994 17,0005		1 Ph : C6H5	76,5734	72,0642	12.0107	6	Carbone	
3 Oxygène 1 15.9994 15,9994 17,0005			6 42605	6 0 4764	1.00794	6	Hudrogène	
3 0xygène 1 15.5994 15.5994 17,0005			6,42605	6,04/64	1.00794	6	Hydrogene	
			17,0005	15,9994	15.9994	1	Oxygène	
	_		< >					<
2 <u>A</u> ide	🛛 🙆 <u>F</u> erm							ie

Kalzium calcule la masse moléculaire du phénol.

Calculateur de concentrations

Vous pouvez calculer des quantités qui incluent :

- Quantité de soluté
- Densité du solvantDensité du soluté

Il existe une large gamme d'unités à choisir et différentes méthodes pour indiquer les quantités

		Calculateur moleculaire –	Kalzium	1		
Calculateurs Introduction Calculateur de masse Calculateur de conce Calculateur nucléaire Calculateur de gaz Solveur d'équations	Certaines des données suiv quantité de soluté en mole:	vantes ne sont pa s, vous n'avez pa:	s né s à ir	cessaires. Par exe adiquer la masse m	mple, si vous ir olaire de solut	idiquez la é
			Do	nnées		
	Calculer :	Concentration	~			
	Quantité de soluté :	117,0000	٥	grammes	v	
	Masse molaire du soluté :	58,5000	٥	(g/mol)		
	Équivalent du soluté :	58,5000	٥	(g/mole)		
	Densité du soluté :	2,7000	٥	grammes par litre	×	
	Quantité de solvant :	1,0000	٥	litre	×	
	Masse molaire du solvant :	18,0000	٥	(g/mole)		
	Densité du solvant :	1000,0000	٥	grammes par litre	×	
	Concentration :	2,0000	٥	molaire	v	
	Le volume du solvant est nul.					
						Réinitialisez
Aide						😣 <u>F</u> ermer

Kalzium calcule les paramètres de la solution.

Calculateur nucléaire

Ce calculateur utilise les données nucléaires disponibles dans Kalzium pour prédire la masse attendue d'un matériau au bout d'un certain temps.

<3 ⊙		Calcu	lateur moléculai	re – Kalzium	$\otimes \otimes \otimes$
Calculateurs Introduction Calculateur de masse Calculateur de conce Calculateur de gaz Solveur d'équations	Sélectionnez ce qu "Calculer" et modif	ie vous voulez ier les valeurs	calculer à / unités à	partir de la liste déroulante à côté de l' calculer.	étiquette
				Données par élément	
	Nom de l'élément :	Uranium	~		
	Masse isotopique	239.054	~		
	Demi-vie :	1407,0000	années	v	
	Masse atomique	239.054	grammes	/ mole	
				Autres données	
	Calculer :	Temps V)		
	Quantité initiale :	6,0000	grammes	v	
	Quantité finale :	3,0000	grammes	<u> </u>	
	Temps:	0.0000 0	années	▼	
					Réinitialisez
Aide					S <u>F</u> ermer

Kalzium calcule les paramètres de décroissance de l'uranium.

Calculateur de gaz

Ce calculateur permet de calculer les valeurs de température, pression, volume, quantité de gaz, etc. pour différents gaz, parfaits ou non.

1 •		Calculateur molé	culaire – Kalzium	
Calculateurs - Introduction - Calculateur de masse - Calculateur de conce - Calculateur nucléaire - Calculateur nucléaire - Calculateur de gaz - Solveur d'équations	Changez les quantités Masse et moles sont dir	et observez les a ectement tribut	autres quantités changer de manière dynamique. aires d'un gaz donné.	
	Calculer : masse molaire du gaz : moles : Masse : Pression : Température : Volume :	Volume V 2.080 0 1.0000 0 2.0160 0 273.0000 0 273.0000 0 2.24024 0	Données (g/mol) grammes v (atmosphères v kelvins v	
2 Aide		V		<u>R</u> éinitialisez

Kalzium calcule des paramètres de gaz.

Calculateur de titrage

Ce calculateur essaie de trouver le meilleur point d'équivalence d'un titrage suivi par pHmètre en utilisant une tangente hyperbolique. Vous pouvez aussi le laisser résoudre un

système d'équations à l'équilibre et voir comment la concentration d'une espèce évolue en fonction d'une autre.

Il y a deux onglets dans la page du calculateur, à savoir :

Valeurs expérimentales

Vous pouvez utiliser ce calculateur pour tracer les données expérimentales que vous avez obtenues durant le titrage et trouver le volume d'équivalence. Il est fortement recommandé d'insérer un nombre pair de points, du fait de l'algorithme de meilleur ajustement, triés par volume (la valeur de l'**axe X**).

Équations théoriques

Vous pouvez ici remplir le tableau avec les équations que vous obtenues précédemment pour l'équilibre chimique.

Par exemple, si vous avez cette réaction $A + B \rightarrow C + D$ alors vous aurez cette équation $K=(C^*D)/(A^*B)$ ainsi vous devrez écrire **K** dans la colonne **Paramètre** et **(C*D) / (A*B)** dans la colonne **Valeur**. SI vous voulez assigner une valeur connue à un paramètre, vous pouvez simplement écrire la valeur numérique dans le champ **Valeur**.

Par exemple, vous pouvez utiliser le système

```
A= (C*D) / (B*K)

K=10<sup>-3</sup>

C=OH

OH= (10<sup>-14</sup>) /H

H=10<sup>-4</sup>

B=6* (10<sup>-2</sup>)

Alors vous devez écrire D pour l'axe X : et A pour l'axe Y : : ainsi, vous trouverez

comment la concentration de A évolue en fonction de la concentration de D.
```

NOTE

N'utilisez pas de parenthèse pour les exposants 10^-3 est correct, tandis que $10^(-3)$ ne l'est pas.

Les résultats peuvent être affichés en appuyant sur le bouton **Tracer**. Le graphique affiche en rouge la courbe prévue par la théorie, en bleu les points expérimentaux, et en vert la courbe approximative des points expérimentaux. Vous pouvez enregistrer le graphique au format SVG.

3	Chemical Calculator — Kalzium	? ~ ^
Calculators	Choose what you want to do: X min: 0.00 X max: 50.00 Y min: 0.00 Image: Choose what you want to do:	Y max: 50.00
Introduction	Experimental values Theoretical equations	
Molecular mass Calculator	Find the equivalence point from experimental values:	
Concentration Calculator	pH(Y) Volume(X)	
auciear Calculator	1 7.19 30	
itration Calculator	2 7.64 30.5 40	
quation Balancer	3 10.02 31	
	4 10.45 31.5	
	5	
	6	
	7	
	Draw Plot	
	Notes:	
	Approximated curve: 3.26*tanh(2.66667*(x+-15.3743))+8.82	
	Equivalence point: 15.3743	
	10 20 30	40
	New Open Save Save plot	Example
🛱 Help		S Clo

Exemple prédéfini d'un résultat de titrage.

Solveur d'équations

Le **Solveur d'équations** permet à l'utilisateur de résoudre des équations chimiques. En voici un exemple :

aH2O + bCO2 -> cH2CO3

L'équation résolue sera affichée en haut de la fenêtre. Comme vous pouvez le constater avec le premier exemple, vous pouvez également définir la valeur d'un ou de plusieurs coefficients. Les autres coefficients seront ajustés. De plus, il est possible d'utiliser des crochets autour des éléments ou des charges électroniques comme cela est montré dans les deux exemples suivant.

1 •	Calculateur moléculaire – Kalzium	0 0 0
Calculateurs	Équation :	
- Calculateur de masse	aCr2(S04)3 +bKMn04 + cH20 -> dK2Cr207 + eMn(0H)4 +fH2S04	•3
Calculateur de conce Calculateur nucléaire	Calculer	
☐ Calculatour de gaz Solvaur d'àquations		
	1 Cry(S0J3 + 2 MMn0.+ 7 H50 → 1K5Cr50,+ 2 Mm(OH)4 + 3 H550.	
2 Aide	Aide	Capier Serve

Kalzium calcule des équations chimiques.

3.7.5 Phrases de risque / sécurité

Les **phrases R / S**, aussi appelées phrases de risques / sécurité, ou encore conseil de prudence pour les phrases S, est un système de codes et de phrases de danger utilisé pour l'étiquetage des composés et produits chimiques dangereux. La phrase R / S d'un composé est constituée d'une partie liée au risque (R) et d'une autre liée à la sécurité (S), suivis chacune par une combinaison de chiffres. Chaque numéro correspond à une phrase. La phrase correspondant à une combinaison de lettre /numéro a la même signification dans les différentes langues.

≪3 ⊚	Phrases de risque/sécurité – Kalzium	
Phases R :		ô
1-		
3 - 4 -		
5 - 6 -		
7-8-		
2-		
Phases S :		
1-		
3-		
5 - 6 -		
7-8-		~
Phases R : 1-2-3-4-5-6-7-8-9		
Phases <u>S</u> : 1-2-3-4-5-6-7-8-9		Filtrer
D Aide		C Farmer
<u>Tine</u>		<u> </u>

Kalzium peut afficher des phrases de risque / sécurité

3.7.6 Glossaire

Le **glossaire** vous donne des descriptions des instruments les plus utilisés en chimie ainsi que des connaissances générales. Sur le côté gauche de la fenêtre, vous pouvez voir l'arborescence des points traités. En haut, il y a les termes chimiques, et sous cela il y a une seconde arborescence pour les instruments de laboratoire.

En haut de la fenêtre, vous pouvez voir une barre de recherche. Si vous saisissez quelque chose, l'arborescence sera modifiée en conséquence immédiatement. Le petit bouton à l'extrémité droite de la barre de recherche la réinitialisera.



3.7.7 Tableaux

Les **tableaux** vous montrent les tableaux pour l'alphabet grec qui est utilisé pour nommé certaines quantités chimiques et physiques, et pour les préfixes latin et les nombres romains qui correspondent au nombres arabes standards.

#	Alphabet g	rec	#
Alphabet grec	Majuscule	Minuscule	Nom 8
#	A	α	alpha
Nombres	В	β	bêta
	г	Ŷ	gamma
	Δ	δ	delta
	E	ε	epsilon
	z	ζ	zêta
	u .		â+5. V
🔽 Aide			🙆 <u>F</u> ermer

3.7.8 Panneau latéral

3.7.8.1 Vue d'ensemble





3.7.8.2 Affichage

L'onglet Affichage est le second du panneau de navigation.

Il vous est d'abord présenté les icônes et le texte suivant :



Kalzium peut vous montrer quels éléments sont solides / liquides / gazeux à une température donnée.

L'onglet **Affichage** peut être utilisé pour filtrer le tableau périodique des éléments. Par exemple, cette fonctionnalité vous permet d'explorer l'élément sur une période de temps. C'est très bien pour avoir une idée de comment le tableau périodique a évolué avec le temps, au fur et à mesure que les éléments ont été découverts. Choisissez **Date de découverte** dans la liste **Gradient :**. Si vous déplacez le curseur, vous noterez que certains éléments disparaissent si vous la déplacez vers la gauche et réapparaissent si vous la déplacez vers la droite. De plus, le nombre changera en permanence.

Ce nombre représente la date que vous recherchez. Si vous déplacez le curseur par exemple à 1856, vous ne verrez que les éléments qui étaient connus en 1856.

🔩 🕞	on Aide						Ка	lzium										۲	<u>ی</u> ک
Tableau périodique des éléments classique V	Modèle de	couleuray	Gradiente	~ 🔛 1	able des iso	otopes	칥 Édites	ır molécula	ire 🗍	Réaliser le	es calculs	Tra	icer les don	nées					
Information	۰×	Cherche	er : [
🔢 Vue d'ensemble																			
Affichage																			
Modèle : Blocs	v	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Gradient : Date de découverte	~	H 1766																	He 1895
1856	٥	E Li 1817	Be 1797											B 1808	C N/A	N 1772	0 1774	F 1886	N e 1898
Vitesse		Na 1897	Mg 1808											Al 1825	Si 1823	P 1669	S NA	Cl 1774	Ar 1894
		K 1897	Ca 1808	Sc 1879	Ti 1791	V 1830	Cr 1797	Mn 1774	Fe n/a	C o 1737	Ni 1751	Cu n/a	Zn 1746	Ga 1875	G e 1886	As n/a	Se 1817	Br 1826	Kr 1898
		Rb 1861	Sr 1790	Y 1794	Zr 1789	Nb 1801	M o 1778	Tc 1937	Ru 1844	Rh 1803	P d 1803	Ag n(a	Cd 1817	In 1863	Sn n/a	Sb n/a	Te 1782	1	Xe 1898
		C 5 1860	Ba 1808	La 1839	Hf 1923	Ta 1802	W 1783	Re 1925	0 s 1804	ir 1804	Pt 1735	Au n/a	Hg n/a	T 1861	Pb n/a	Bi n/a	Po 1898	At 1940	Rn 1898
		Fr 1939	Ra 1898	Ac 1899	Rf 1964	Db 1967	Sg 1974	Bh 1981	Hs 1984	Mt 1982	D s 1994	Rg 1994	Cn 1996	Uut 2003	Uuq 1998	Uup 2004	Uuh 2000	Uus n/a	Uuo 2002
					Ce 1803	Pr 1885	Nd 1885	Pm 1945	Sm 1879	Eu 1901	Gd 1880	Tb 1843	Dy 1886	Ho 1878	Er 1843	Tm 1879	Yb 1878	Lu 1907	
					Th 1828	Pa 1917	U 1789	Np 1940	Pu 1940	Am 1945	Cm 1944	Bk 1949	Cf 1950	Es 1952	Fm 1953	Md 1955	No 1958	Lr 1961	
Calculer																			
Légende Date de découverte (linéaire)				Modèle	 de coule	urs : Bloo	cs												• ×
Minimum : 1669				BI								B	oc d						
				0	P							DI DI				Gadoli	nium (64	l), masse	: 157.25 u

Le tableau périodique des éléments dans le temps (éléments connus en 1856)

Chapitre 4

Configuration de Kalzium

Kalzium dispose de plusieurs options de configuration auxquelles vous pouvez accéder en ouvrant la boîte de dialogue de configuration, en choisissant **Configuration** \rightarrow **Configurer Kalzium...** depuis le menu.

⊲ ⊙	Configuration – Kalzium	S S S
*	Modèles	ŝ
Modèles	Blocs Groupes État de la matière Famille A	ucun modèle de couleurs
Gradients	Blocs:	
	Blocp:	
Unités	Bloc d :	
Calculateur	Bloc f:	
Aide	Réglages par <u>d</u> éfaut	c 🖉 Appliguer 🕜 Annuler

Dans l'onglet **Modèles**, vous pouvez changer les différentes couleurs pour chacun des types de modèles.

\odot	ConFiguration – Kalzium	
Modèles	Gradients	ß
Gradients	Au lieù o ucuiser un gradient incaire pour amicher les proprietes d'un élément dans let tableau périodique des éléments, Kalzium peut également utiliser un gradient logarithmique. Cochez les propriétés que vous souhaitez afficher avec un gradient logarithmique.	Rayon de covalence Rayon de <u>v</u> an der Waals
Vnités		<u>Point d'ébullition</u> Tampérature de fusion
Calculateur		<u>É</u> lectronégativité
		Affinité électronique
	Couleur de la valeur maximale :	
Aide	Réglages par <u>d</u> éfaut	🖉 Appliguer 🔗 Annuler

Au lieu d'utiliser un gradient linéaire pour afficher les propriétés d'un élément dans le tableau périodique, Kalzium peut utiliser un gradient logarithmique.

Dans l'onglet **Gradients**, vous pouvez vérifier les propriétés que vous souhaitez afficher avec un gradient logarithmique.

Vous pouvez choisir la **couleur de la valeur maximale :** et la **couleur de la valeur minimale** pour le gradient.

•••	Configuration - Kalzium	2 × × ×
120	Gradients	2
Madeles		<u>Lv</u>
- PA	As lieu d'utilizer un gradient linéaire pour afficher les propri d'un élément dans le tableau périodique des éléments, Kalzi peut également stilizer un gradient logarithmique.	teisBayon de cavalence
Gradeets	Cochez les propriétés que vous souhaitez afficher avec un gradient legarithmique.	Rayon de yan der Waals
0		V Paint dihaliting
Unitia		Jempérature de fusion
		Électronégativité
Calculateur		Datg de décenverte
		🖌 Affritá électronique
		🖌 [enisation
	Couleur de la valeur maximale :	
	Couleur de la valeur minimale :	
1 2 da	(r) hiphipis per felore. 🗳 😫	Ander Street
P gra	P: Malani rezillez. ♥⊉	V Anglunt V Angle
B Brie	De technine ples Take a <u>H</u> ew Snapsho Capture mode: Window Ur	t nder Cursor
P 84	De Moherner alden Take a New Snapsho Capture mode: Window Ur Snapshot gelay. No delay	t t
	Printeneration	t ader Cursor
Include	Capture mode: Window Ur Snapshot gelay: No delay e window decorations:	e ange

Dans l'onglet **Unités**, vous pouvez choisir les unités d'énergie, de longueur et de température. Vous pouvez choisir si vous préférez électronvolt (eV), kilojoule par mole (kJ / mol), joule par mole (J / mol) ou joules (J) par défaut. Pour les longueurs, choisissez picomètres (pm), nano-

mètres (nm) ou Angström (Å) par défaut. La température est en Kelvin par défaut mais vous pouvez la changer pour des degrés Celsius (C), des degrés Fahrenheit (F) et des degrés Réaumur (Ré).



En utilisant la page Calculateur, vous pouvez configurer les calculateurs de Kalzium.

Chapitre 5

Référence des commandes

5.1 Menus et touches de raccourci

5.1.1 Le menu Fichier

Fichier \rightarrow Enregistrer sous... (Ctrl+Maj+S)

Enregistre les tableaux de Kalzium en tant qu'image.

Fichier \rightarrow Exporter des données...

Ouvre une boîte de dialogue dans laquelle vous pouvez sélectionner les **éléments** et leurs **propriétés** pour les exporter dans un fichier HTML, XML, ou CSV.

Fichier \rightarrow Convertir des fichiers...

Ouvrir une boîte de dialogue pour importer et exporter un large éventail de formats de fichiers de chimie et de types de données avec la bibliothèque Open Babel.

Fichier \rightarrow Quitter (Ctrl+Q)

Quitte Kalzium.

5.1.2 Le menu Affichage

Affichage → **Tableaux**

Affiche un sous-menu avec différentes tables périodiques. Les options suivantes sont disponibles :

Tableau périodique classique des éléments

Affiche un tableau périodique classique avec tous les éléments.

Tableau périodique court des éléments

Affiche un tableau périodique sans les éléments de transition.

Tableau périodique long des éléments

Affiche un tableau périodique avec les éléments de transition (bloc f) inclus.

Éléments de transition

Affiche un tableau périodique composé uniquement des éléments de transition.

Tableau périodique des éléments DZ

Cet objet représente la table que la DZ *Deutscher Zentralausschuss* "German Central Committee" propose.

Affichage → **Numérotation**

Affiche un sous-menu avec différents modes de numérotation. Les options suivantes sont disponibles :

Aucune numérotation

N'affiche aucun schéma de numérotation.

IUPAC

Affiche la numérotation IUPAC.

CAS

Affiche la numérotation CAS.

Ancien IUPAC

Affiche la numérotation de l'ancien IUPAC.

$\textbf{Affichage} \rightarrow \textbf{Thème}$

Affiche un sous-menu avec différents thèmes. Les options disponibles sont :

Monochrome

Affiche tous les éléments avec une seule couleur de fond.

Blocs

Affiche les quatre blocs d'éléments.

Iconique

Affiche une icône pour chaque élément.

Famille

Affiche les familles d'éléments.

Groupes

Affiche les groupes d'éléments.

Couleurs

Affiche les couleurs des éléments.

$\mathbf{Affichage} \to \mathbf{Dégrad\acute{es}}$

Affiche un sous-menu avec différents dégradés. Les options suivantes sont disponibles :

Aucun

N'affiche aucun gradient dans le tableau.

État de la matière

Affiche l'état de la matière des éléments.

Rayon de covalence

Affiche le rayon de covalence des éléments.

Van Der Waals

Affiche le rayon de van der Waals des éléments.

Masse atomique

Affiche la masse atomique des éléments.

Point d'ébullition

Affiche le point d'ébullition des éléments.

Température de fusion

Affiche la température de fusion des éléments.

Électronégativité (Pauling)

Affiche l'électronégativité des éléments.

Affinité électronique

Affiche l'affinité électronique des éléments.

Date de découverte

Affiche la date de découverte de chaque élément avec une couleur de fond différente pour chaque siècle.

Première ionisation

Affiche l'énergie de première ionisation des éléments.

Affichage → **Légende**

Affiche / cache le panneau de légende. Cela vous permet d'afficher la légende pour le type d'affichage dans lequel vous êtes (groupes, familles, blocs). La légende est affichée par défaut mais si vous la cachez, elle restera cachée jusqu'à ce que vous choisissiez de l'afficher à nouveau. Kalzium va conserver cette configuration dans son fichier de configuration, de sorte que la prochaine fois que vous le lancerez, vous retrouverez la configuration comme vous l'avez laissée.

Affichage \rightarrow **Information**

Active / désactive l'affichage du panneau latéral.

Affichage \rightarrow **Information sur la table**

Active / désactive le panneau d'information sur le tableau.

5.1.3 Le menu Outils

Outils \rightarrow **Éditeur moléculaire...**

Ouvre la boîte de dialogue de l'Éditeur moléculaire.

Outils \rightarrow **Table des isotopes...**

Ouvre la fenêtre de la table des isotopes.

Outils → Tracer les données...

Ouvre la boîte de dialogue des Tracer les données.

Outils \rightarrow **Réaliser** les calculs...

Ouvre la boîte de dialogue pour la réalisation de calculs.

Outils → Phrases R/S...

Ouvre la boîte de dialogue des Phrases de risque / sécurité.

 $Outils \rightarrow Glossaire...$

Ouvre le glossaire.

 $\mathbf{Outils} \to \mathbf{Tables...}$

Affiche une boîte de dialogue avec **l'alphabet grec** et les **nombres**, **préfixes et chiffres romains**.

5.1.4 Les menus Configuration et Aide

Kalzium dispose des éléments standards de menu **Configuration** et **Aide** communs) KDE. Pour plus d'informations, veuillez consulter les sections sur le menu Configuration et le menu Aide dans les pages « Fondamentaux » de KDE.

Chapitre 6

Questions et réponses

 Est-ce que je dois payer pour Kalzium? Non, jamais. Mais l'auteur reçoit toujours volontiers un courrier électronique sympathique ou un DVD comme "Remerciements". L'application Kalzium est sous licence GPL. Ainsi, vous n'aurez jamais à payer pour ce programme.

Chapitre 7

Comment puis-je contribuer?

1. *Aidez moi avec des données.* Dans le monde des sciences, le progrès est plutôt rapide. Si vous trouvez une valeur incorrecte ou une valeur manquante, prévenez moi par courrier électronique.

 Trouvez des bogues ou fournissez nous quelques suggestions. Si vous trouvez des bogues dans le programme, ou avez quelques suggestions d'améliorations, veuillez me le faire savoir à cniehaus@kde.org.

Chapitre 8

Remerciements et licence

Kalzium

Programme sous copyright, 2001-2005 Carsten Niehaus cniehaus@kde.org

Collaborateurs :

— Pino Toscano toscano.pino@tiscali.it

Traduction française par Ludovic Grossard grossard@kde.org, Gérard Delafond gerard@delafond.org, Anne-Marie Mahfouf annemarie.mahfouf@free.fr, Yohann Hamon yohann_hamon@yahoo.fr, Olivier Delaune olivier.delaune@wanadoo.fr et Xavier Besnard ktranslator31@yahoo.fr.

Cette documentation est soumise aux termes de la Licence de Documentation Libre GNU (GNU Free Documentation License).

Ce programme est soumis aux termes de la Licence Générale Publique GNU (GNU General Public License).