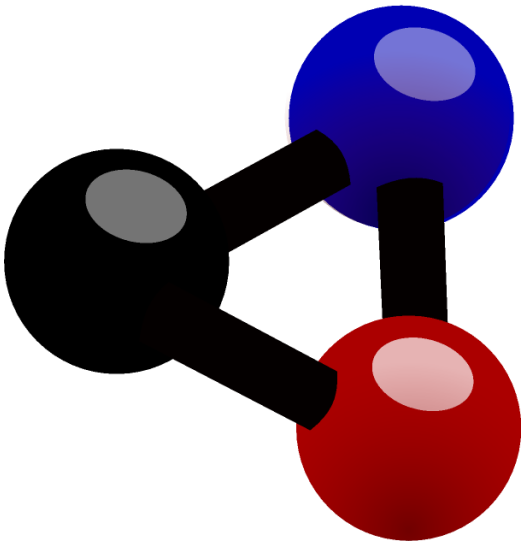
Das Handbuch zu Kalzium

Carsten Niehaus
Deutsche Übersetzung: Thorsten Mürell
Deutsche Übersetzung: Christoph Hamann



Inhaltsverzeichnis

1 Einführung **6**

2 Kalzium Kurzanleitung **7**

3 Kalzium verwenden **10**

3.1 Übersicht zur Benutzung von Kalzium . . . 10

3.2 Der Informationsdialog . . . 10

3.2.1 Daten-Übersicht . . . 11

3.2.2 Bohrsches Orbitalmodell . . . 11

3.2.3 Isotope . . . 12

3.2.4 Sonstiges . . . 13

3.2.5 Spektrum . . . 14

3.2.6 Zusätzliche Information . . . 14

3.3 Tabellen . . . 15

3.4 Nummerierung . . . 16

3.5 Farbschemata . . . 16

3.6 Farbverläufe . . . 17

3.7 Extras . . . 18

3.7.1 Moleküleditor . . . 18

3.7.2 Isotopentabelle . . . 18

3.7.3 Daten grafisch darstellen . . . 19

3.7.4 Berechnungen durchführen . . . 20

3.7.5 Risiko- und Sicherheitssätze . . . 25

3.7.6 Glossar . . . 26

3.7.7 Tabellen . . . 27

3.7.8 Seitenleiste . . . 27

3.7.8.1 Übersicht . . . 27

3.7.8.2 Anzeigen . . . 28

4 Kalzium einrichten **30**

5 Befehlsreferenz **33**
5.1 Menüs und Tastenkürzel 33
5.1.1 Das Menü Datei 33
5.1.2 Das Menü Ansicht 33
5.1.3 Das Menü Extras 35
5.1.4 Die Menüs „Einstellungen" und „Hilfe" 36

6 Fragen und Antworten **37**

7 Wie kann ich helfen? **38**

8 Danksagungen und Lizenz **39**

Zusammenfassung

Kalzium ist ein Programm, das Ihnen das Periodensystem der Elemente (PSE) zeigt. Sie können Kalzium verwenden, um nach Informationen über Elemente zu suchen oder um Fakten über das PSE zu lernen.

Kapitel 1

Einführung

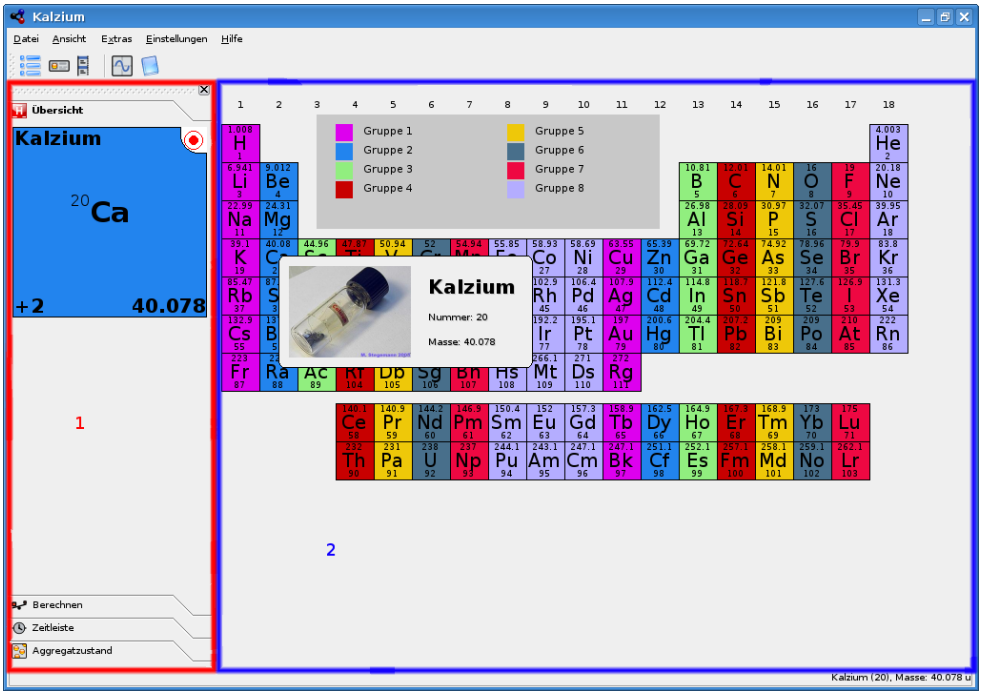
Kalzium bietet Ihnen alle Informationen über das PSE (Periodensystem der Elemente). Sie können viele Informationen über die Elemente nachschlagen und die Elemente auch nach verschiedenen Kriterien farbig hervorheben. Kalzium ist frei und lizenziert unter der GNU Public License.

Sie können im Periodensystem die Elemente nach Gruppen, Blöcken und Familien durch Farben markieren. Für einen Bereich von Elementen können Sie Daten grafisch darstellen (Gewicht, Masse pro Neutron, Ionisationsenergie, zweite Ionisationsenergie, Elektronegativität). Und es gibt eine Zeitleiste, mit der Sie für ein bestimmtes Datum alle damals bekannten Elemente anzeigen lassen können. Auch gibt es einen Rechner, mit dem Sie molekulare Masse von Molekülen berechnen können.

Kapitel 2

Kalzium Kurzanleitung

Hier sehen Sie Kalzium beim ersten Start, entweder aus dem Anwendungsstarter **Programme** → **Lernprogramme** → **Wissenschaft** → **Kalzium** oder mit **Alt**+**F2** und der Eingabe **kalzium**.

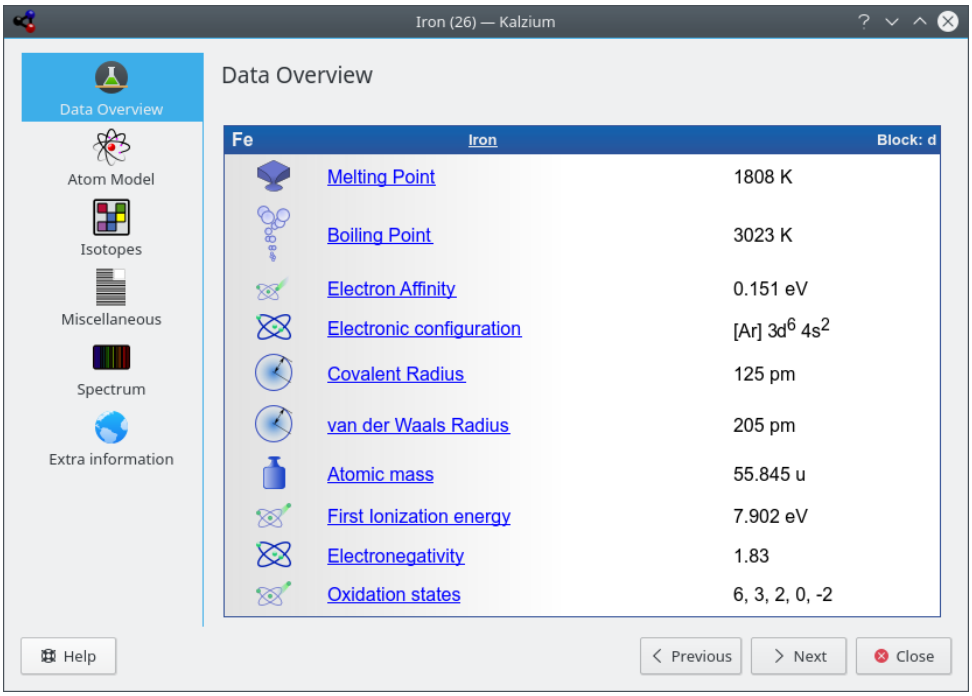


Das Hauptfenster von Kalzium ist unterteilt in eine Seitenleiste links im Hauptfenster (Rot), in das Periodensystem der Elemente auf der rechten Seite (Blau) und die Legende unten (Grün). Das Standardmenü erlaubt Ihnen, die Art der Anzeige des Periodensystems auszuwählen, und die Statuszeile zeigt weitere Informationen an. Sie können die Seitenleiste, die Tabelleninformation und die Legende mit den zugehörigen Einträgen im Menü **Ansicht** ausblenden. Für die Leiste Informationen wählen Sie dazu im Menü **Ansicht** → **Informationen**.

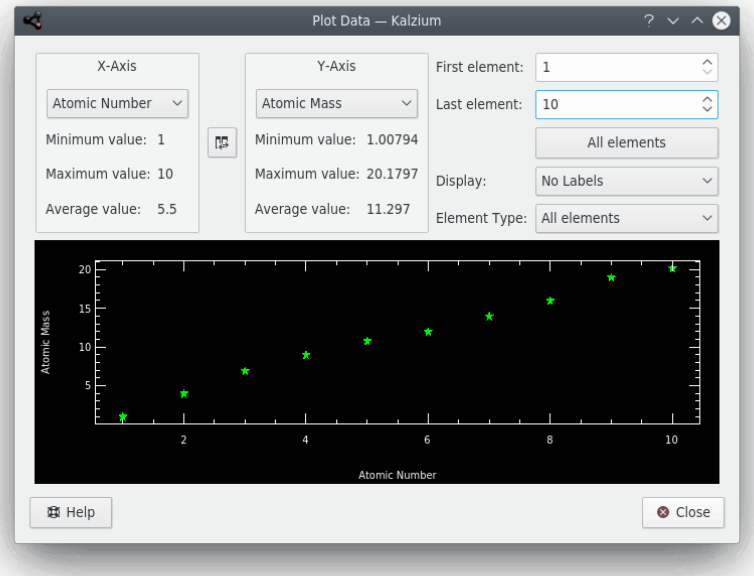
Wenn Sie den Mauszeiger über ein Element im Periodensystem bewegen, wird eine kurze Information über dieses Element in der Seitenleiste „Informationen“ auf der Karteikarte **Übersicht** angezeigt.

Sie können unterschiedliche Ansichten für das Periodensystem auswählen: Klassisches Periodensystem, Kurzperiodensystem, Langperiodensystem usw. Das Nummerierungsschema lässt sich ändern und die Elemente lassen sich mit Kennzeichnung von Familie, Gruppe, Kristallstruktur und dem Säureverhalten, usw. anzeigen. Alles dies können Sie im Menü **Ansicht** ändern.

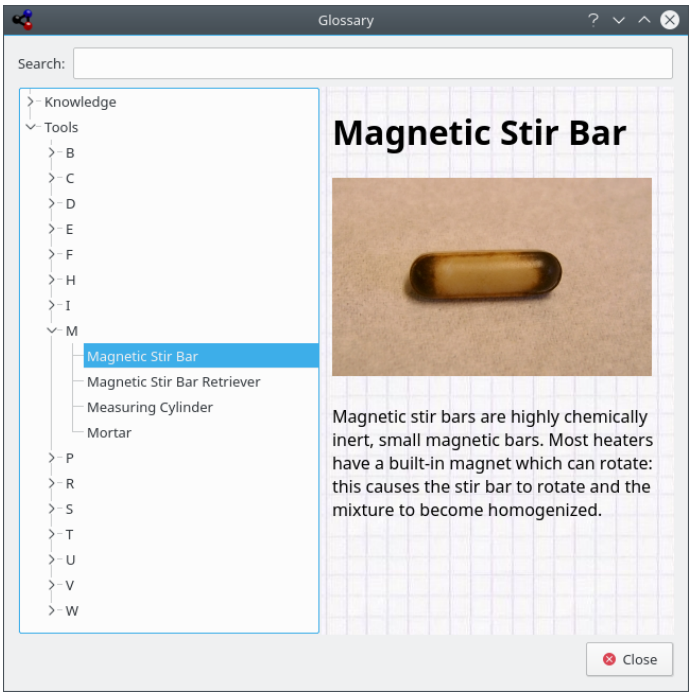
Wenn Sie genauere Informationen über ein Element erhalten möchten, klicken Sie im Periodensystem auf das betreffende Element und der ausführliche Informationsdialog wird angezeigt.



Sie können sich Daten grafisch darstellen lassen, indem Sie **Extras** → **Daten grafisch darstellen ...** wählen. Für die y-Achse wählen Sie, was Sie grafisch darstellen möchten und für die x-Achse die Anzahl der Elemente, die dargestellt werden sollen. Das Bildschirmfoto unten zeigt die Atommasse der Elemente 1 bis 10 in der grafischen Darstellung. Klicken Sie auf den Knopf **x- und y-Achse tauschen** zwischen den beiden Achsenbereichen, um die X- und Y-Achse zu vertauschen.



Das Glossar (**Extras** → **Glossar ...**) erklärt die wichtigsten chemischen Fachbegriffe und zeigt Bilder der gebräuchlichsten Geräte zusammen mit einer Beschreibung.


Glossary
Search:
Knowledge
Tools
B
C
D
E
F
H
I
M
Magnetic Stir Bar
Magnetic Stir Bar Retriever
Measuring Cylinder
Mortar
P
R
S
T
U
V
W
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.
Close

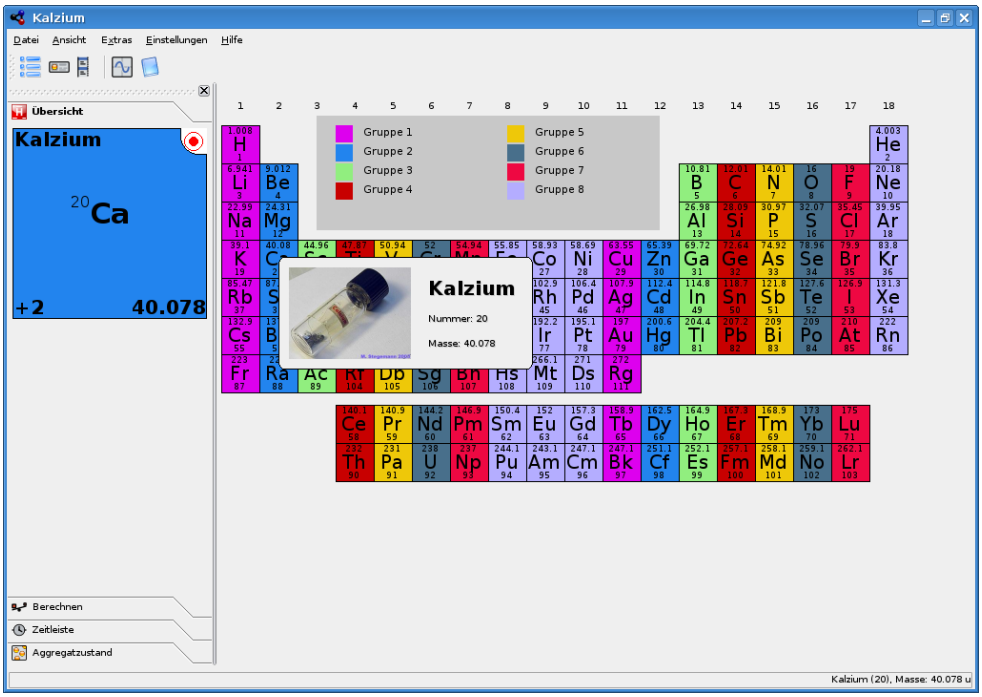
Kapitel 3

Kalzium verwenden

3.1 Übersicht zur Benutzung von Kalzium

Sie sehen, dass Kalzium einfach zu verwenden ist und nützlich für alle für Studierende aller Altersstufen. Es ähnelt sehr einer schnellen und kleinen Datenbank.

Hier ist ein Bildschirmfoto von Kalzium in Aktion:



3.2 Der Informationsdialog

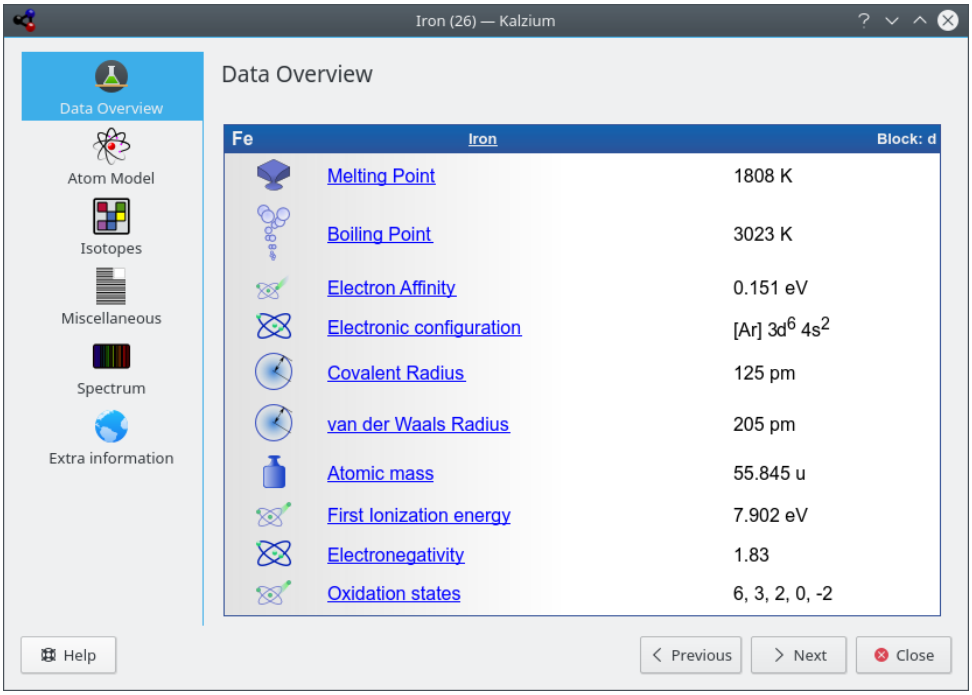
Sie erreichen den Informationsdialog, wenn sie mit der linke Maustaste auf ein Element klicken. In diesem Dialog bekommen Sie alle Informationen zum jeweiligen Element. Mit den Knöpfen im unteren Teil des Dialogs können Sie ganz schnell auf das nächste Element wechseln, ohne den Dialog schließen zu müssen.

3.2.1 Daten-Übersicht

Die Seite **Daten-Übersicht** gibt Ihnen Informationen über verschiedene Energiedaten des ausgewählten Elements.

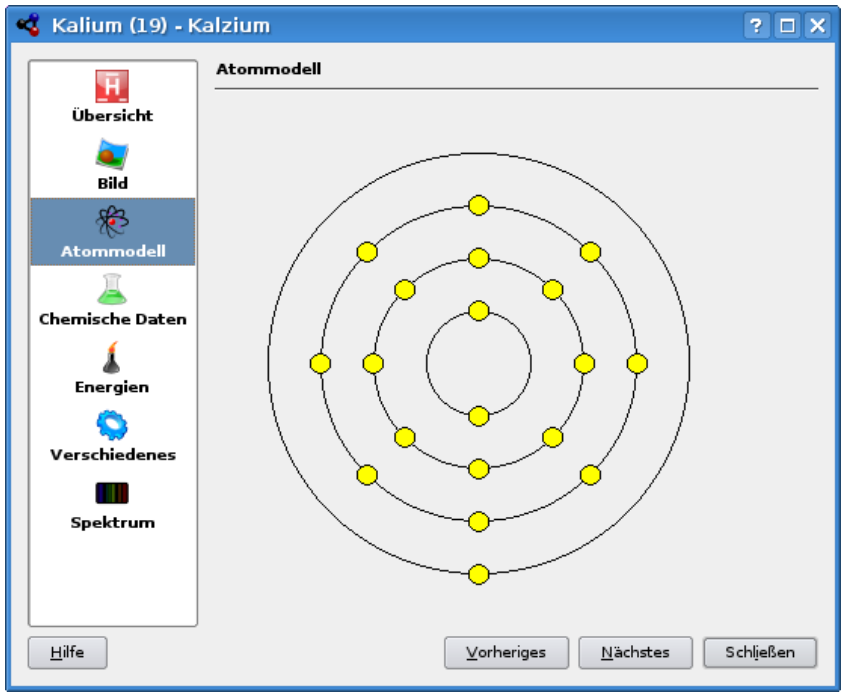
Abhängig von den vorhanden Daten in Kalzium sehen Sie verschiedene Radien des Elements. Der Kovalenzradius ist der Radius eines nicht geladenen Atoms des Elements in einer Molekülverbindung. Das könnte z. B. der Abstand zwischen O-H in Wasser sein. Der atomare Radius hingegen ist der Radius des Atoms im elementaren Zustand, wenn es z. B. keinerlei Verbindung zu einem anderen Atom hat. Der Van-der-Waals-Radius ist als Abstand zwischen zwei Atomen der gleichen Art in zwei gleichen Molekülen definiert. Zum Beispiel zwei Kohlenstoffatome in Propan. Der letzte mögliche Radius ist der Radius eines ionisierten Atoms, der die Ladung enthält.

Die Masse eines Elements ist der Durchschnitt der Massen aller Isotope in Relation zu ihrer prozentualen Häufigkeit.



3.2.2 Bohrsches Orbitalmodell

Die Seite **Atommodell** zeigt die Atomschalen an. Jedes Orbital steht für eine Atomschale und jeder gelbe Kugel stellt ein Elektron dar.



3.2.3 Isotope

Die Seite **Isotope** gibt Ihnen Informationen über verschiedene Isotope des ausgewählten Elements.

Masse
Die Masse dieses Isotops.

Neutronen
Die Anzahl der Neutronen, die dieses Isotop besitzt.

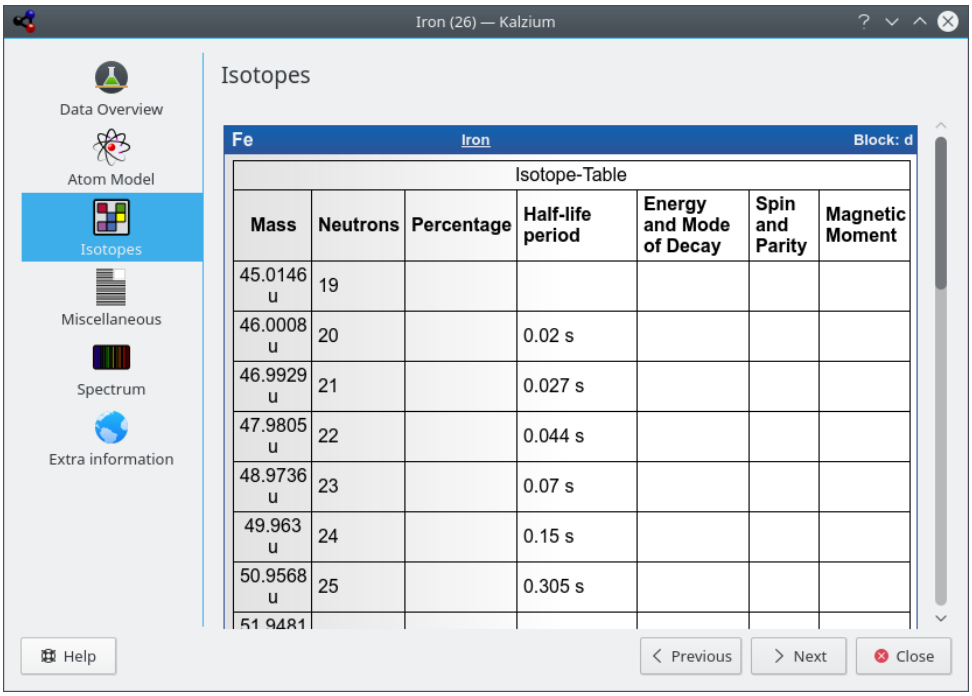
Prozent
Der Prozentsatz an vorkommenden Atomen, die von diesem Isotopentyp sind, wird auch Isotopenhäufigkeit genannt.

Halbwertszeit
Nur instabile Isotope haben eine Halbwertszeit. Die Halbwertszeit ist als ein Zeitwert definiert, in dem die Hälfte des vorliegenden Isotops zerfallen ist.

Energie und Zerfallsart
Manche Isotope sind bekannt dafür, dass sie beim radioaktiven Zerfall Teilchenstrahlung aussenden. Jede Umwandlung durch radioaktiven Zerfall weist eine typische Energiemenge auf, die neben der Zerfallsart aufgelistet ist.

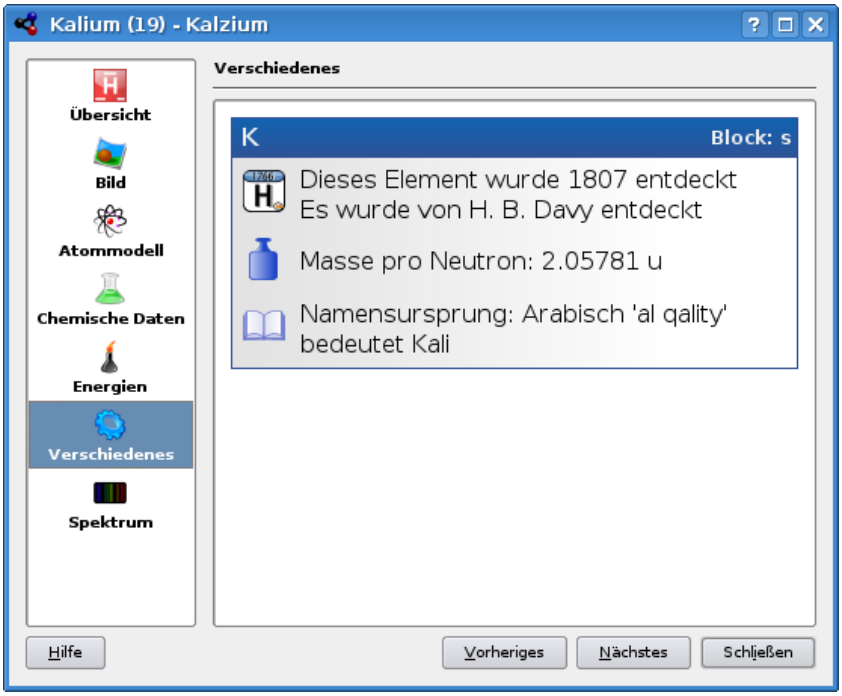
Spin und Parität
Der Spin des Kerns und seine Parität.

Magnetisches Dipolmoment
Das magnetische Dipolmoment des Kerns. Wird in Einheiten des nuklearen Magnetons gemessen.



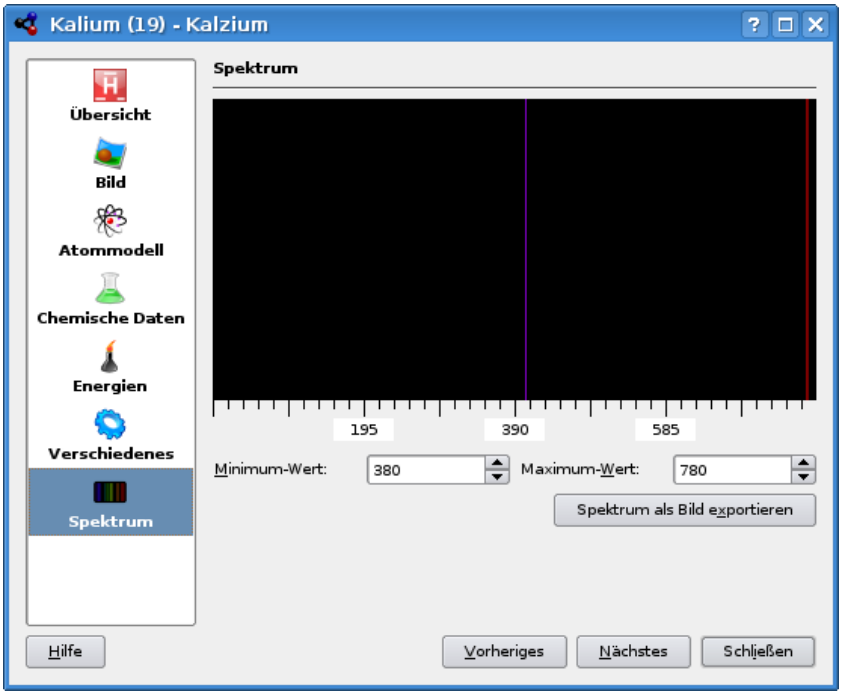
3.2.4 Sonstiges

Die Seite **Sonstiges** gibt Ihnen weitere Informationen zum aktuellen Element, z. B. das Jahr, in dem es entdeckt wurde und die Herkunft des Namens.



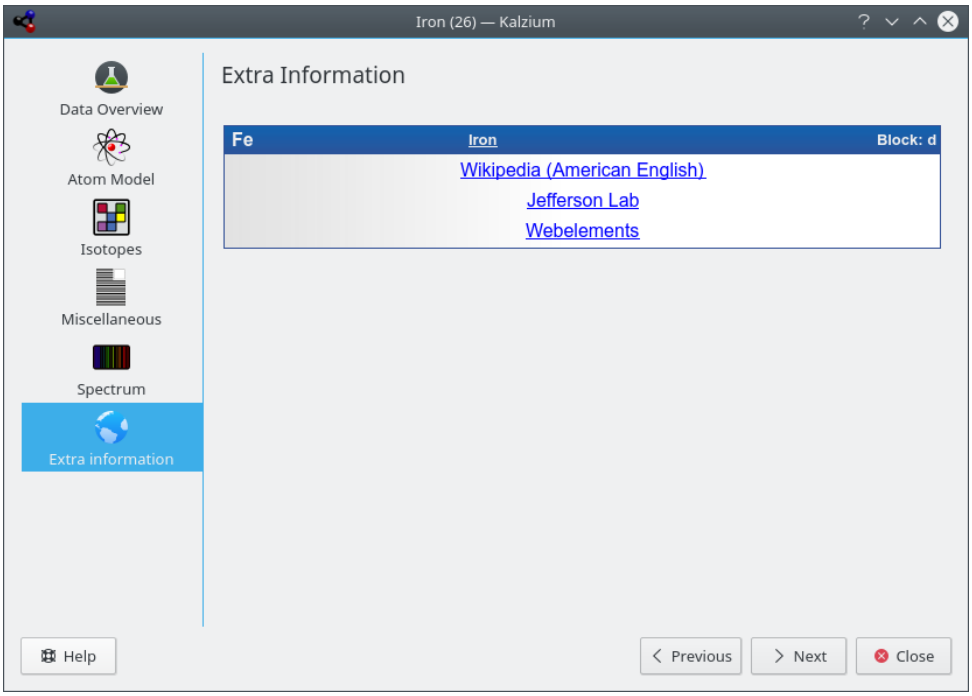
3.2.5 Spektrum

Auf dieser Seite wird das Spektrum des ausgewählten Elements angezeigt. Der Bereich der angezeigten Wellenlängen und der Typ des Spektrums kann geändert werden. Rechts unten auf der Seite wird die Intensität als Tabelle dargestellt.



3.2.6 Zusätzliche Information

Auf der Seite **Zusätzliche Informationen** finden Sie Verknüpfungen zu Seiten über das Element in der Wikipedia, Jefferson Lab, und WebElements.



3.3 Tabellen

Das Periodensystem kann auf mehrere Arten angezeigt werden. Die Anzeige wird im Menü **Ansicht** oder im Auswahlfeld in der Werkzeugleiste geändert.

Im Menü **Ansicht** → **Tabellen** finden Sie folgende Optionen, um die Anzeige der Tabelle einzustellen:

Klassisches Periodensystem

Zeigt das klassische Periodensystem mit allen Elementen an.

Kurzperiodensystem

Zeigt ein Periodensystem ohne die Übergangselemente an. Zitat aus der deutschen Wikipedia: „Die chemischen Elemente mit den Ordnungszahlen von 21 bis 30, 39 bis 48, 57 bis 80 und 89 bis 112 werden üblicherweise als Übergangselemente bezeichnet. Da diese Elemente alle Metalle sind, wird auch der Ausdruck Übergangsmetalle verwendet. Dieser Name ist in ihrer Position im Periodensystem begründet, da sich dort der Übergang durch die aufeinanderfolgende Zunahme von Elektronen in den d-Atomorbital entlang jeder Periode zeigt. Übergangselemente werden chemisch von der IUPAC als Elemente, die eine unvollständige d-Schale besitzen oder Ionen mit einer unvollständigen d-Schale ausbilden, definiert. ”

Langperiodensystem

Zeigt ein Periodensystem mit den Übergangselementen (F-Elemente) an. Zitat aus der deutschen Wikipedia: „Die chemischen Elemente mit den Ordnungszahlen von 21 bis 30, 39 bis 48, 57 bis 80 und 89 bis 112 werden üblicherweise als Übergangselemente bezeichnet. Da diese Elemente alle Metalle sind, wird auch der Ausdruck Übergangsmetalle verwendet. Dieser Name ist in ihrer Position im Periodensystem begründet, da sich dort der Übergang durch die aufeinanderfolgende Zunahme von Elektronen in den d-Atomorbital entlang jeder Periode zeigt. Übergangselemente werden chemisch von der IUPAC als Elemente, die

eine unvollständige d-Schale besitzen oder Ionen mit einer unvollständigen d-Schale ausbilden, definiert. ”

Übergangselemente

Zeigt ein Periodensystem nur mit den Übergangselementen an.

DZ-Periodensystem

Diese Darstellung des Periodensystems entspricht dem Vorschlag des „Deutschen Zentralausschusses” für Chemie.

3.4 Nummerierung

Die Nummerierung ist eine Möglichkeit, die 18 Gruppen im Periodensystem zu kennzeichnen. Sie können die Nummerierung auf **IUPAC**, **IUPAC (alt)** oder **CAS** einstellen oder sie ganz ausschalten.

Im Menü **Ansicht** → **Nummerierung** finden Sie folgende Optionen, um die Nummerierung einzustellen:

- **Keine Nummerierung**. Wenn diese Option angekreuzt ist, wird keine Hauptgruppennummerierung angezeigt.
- **IUPAC** (Standard): Die IUPAC ist die *International Union of Pure and Applied Chemistry* (deutsch etwa: Internationale Vereinigung der reinen und angewandten Chemie). Das ist eine Organisation, die die meisten Standards für Chemiekonzerne festlegt. Das neue UPAC System nummeriert die Spalten mit arabischen Ziffern von 1 (eins) bis 18 (achtzehn).
- **CAS**: Der CAS ist der *Chemical Abstracts Service*. Im CAS System werden die Buchstaben A und B verwendet, um die Elemente der Hauptgruppe (A) und die Übergangselemente (B) zu kennzeichnen. Obwohl die Benennung der IUPAC das offizielle System ist, wird die Nummerierung des CAS immer noch in Schulen und Labors verwendet.
- **IUPAC (alt)**: Das alte IUPAC System kennzeichnet die Spalten mit römischen Zahlen, gefolgt entweder vom Buchstaben „A” oder „B”. Die Spalten 1 bis 7 werden von „IA” bis „VIIA” nummeriert, die Spalten 8 bis 10 mit „VIIIA”, die Spalten 11 bis 17 mit „IB” bis „VIIB” und Spalte 8 mit „VIII”. Weil das alte IUPAC-und das CAS-System sehr verwirrend waren, hat die IUPAC ihr neues System eingeführt.

3.5 Farbschemata

Kalzium kann die Position des Elementes gemäß „Block” und „Gruppe” im Periodensystem, das Säureverhalten und den Aggregatzustand (d. h. fest, flüssig, gasförmig) bei einer gegebenen Temperatur anzeigen.

Die Farbschemata können Sie im Menü **Ansicht** → **Schema**, Im Auswahlfeld in der Werkzeugleiste oder auf der Karteikarte Anzeige der Seitenleiste ändern.

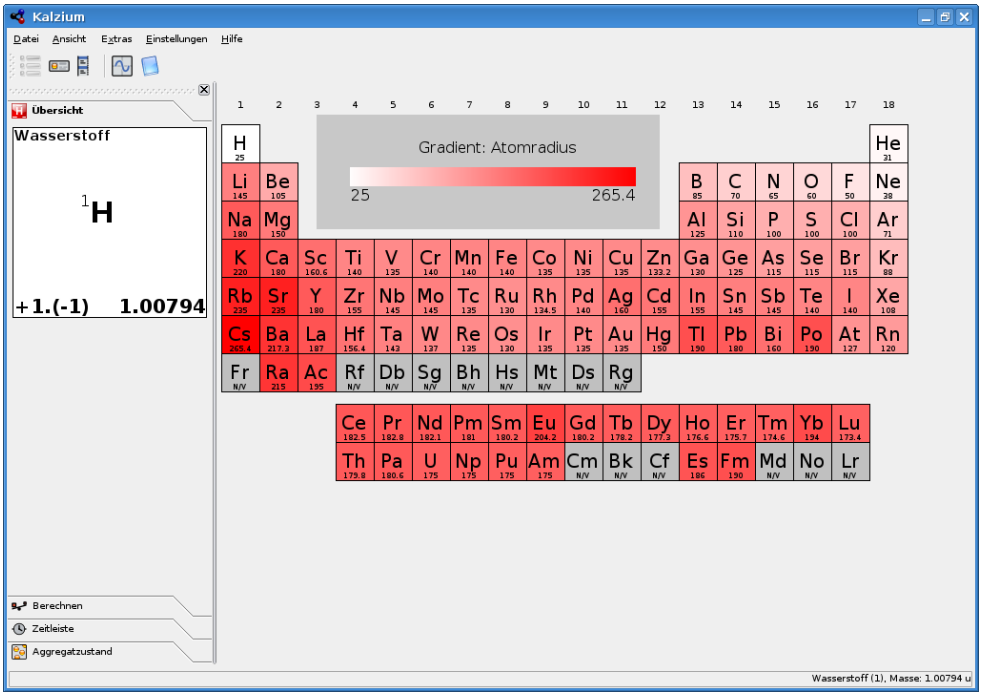
- **Schwarzweiß**: Alle Elemente werden in der gleichen Farbe dargestellt. Die Standardfarbe können Sie im Menü **Einstellungen** → **Kalzium einrichten ...** auf der Seite **Schemata** ändern.
- **Blöcke**: jeder Block wird in einer eigenen Farbe dargestellt.
- **Symbolisch**: Jedes Element wird als Symbol dargestellt.
- **Familien**: Jedes Element der neun Familien werden in einer eigenen Farbe dargestellt.

- **Gruppen**: Zeigt jede Gruppe in einer anderen Farbe an. Eine Gruppe ist eine senkrechte Spalte im Periodensystem der Elemente. Im Standard-Periodensystem gibt es 18 Gruppen. Elemente einer Gruppe haben ähnliche Konfigurationen ihrer valenten Schalenelektronen, daher weisen sie ähnliche Eigenschaften auf.
- **Farben**: Schöne Farben ohne Bedeutung. Aus dem OpenBabel-Projekt.

3.6 Farbverläufe

Die Farbverläufe zeigen die Elemente gemäß den Einstellungen an, die Sie unten vornehmen können. Elemente, für die keine Daten vorliegen, werden in grau angezeigt.

Die Farbverläufe können Sie im Menü **Ansicht** → **Farbverläufe**, Im Auswahlfeld in der Werkzeugleiste oder auf der Karteikarte Anzeige der Seitenleiste ändern.



Folgende Farbverläufe stehen zur Verfügung, einige Listeneinträge können angeklickt werden:

- **Keine**: Farbverläufe werden in der Anzeige nicht verwendet.
- Aggregatzustand
- Kovalenter Radius
- Van der Waals: Farbverlauf nach dem Van-der-Waals-Radius
- Atommasse
- Siedepunkt
- Schmelzpunkt
- Elektronegativität (Pauling)
- Elektroaffinität
- **Entdeckungsdatum**
- Erste Ionisierungsenergie

3.7 Extras

3.7.1 Moleküleditor

Im Moleküleditor können Sie mit Hilfe der Avogadro 2-Bibliotheken Moleküle anzeigen und bearbeiten.

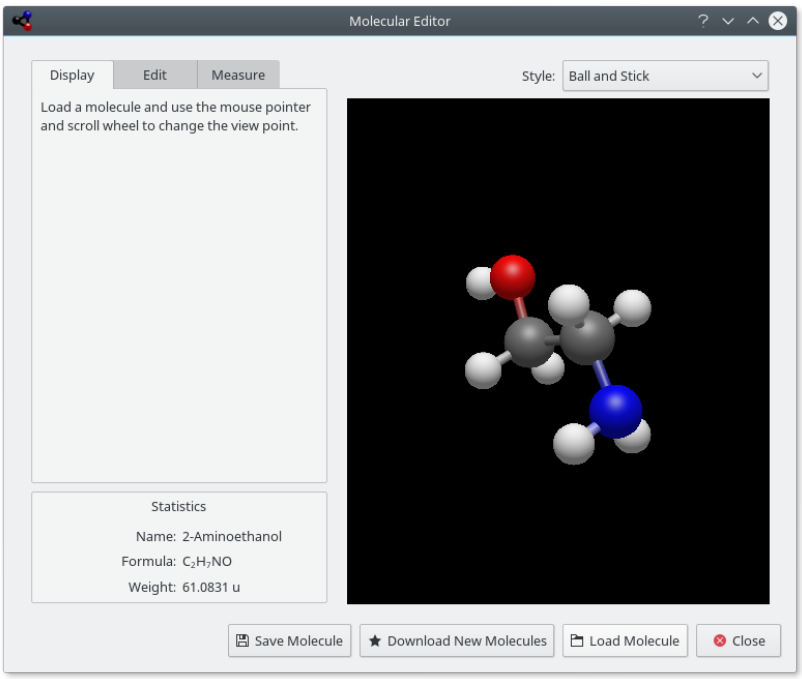
Auf den Karteikarten links im Dialog können Sie die Ansichtsparameter ändern, Moleküle bearbeiten und messen. Es gibt drei Karteikarten: **Anzeige**, **Bearbeiten** und **Messen**. Oben im Fenster können Sie als **Stil** der Anzeige **Kugel-Stab**, **Stab** **Van der Waals**, **Van der Waals (AO)** (AO bedeutet „Ambient Occlusion" bzw „Umgebungsverdeckung") oder **Drahtmodell**. Mit den Knöpfen unten im Dialog können Sie ein **Molekül speichern**, **Neue Moleküle herunterladen**, **Moleküle laden** und den Dialog **Schließen**. Die heruntergeladenen Dateien werden Ihrem Ordner `Dokumente` gespeichert, aus dem Sie sie in den Editor laden können.

Im Abschnitt **Statistik** werden der Name - falls vorhanden, die Formel und die Masse des Moleküls angezeigt.

Auf der Karteikarte **Anzeige** wird ein geladenes Molekül dargestellt. Mit der linken Maustaste drehen Sie ein Molekül, mit der rechten Maustaste verschieben Sie es und mit der mittleren Maustaste können Sie die Ansicht vergrößern und verkleinern.

Die Karteikarte **Bearbeiten** ermöglicht das Ändern von Molekülen. Fügen Sie Elemente hinzu, indem Sie sie im Auswahlfeld **Element** wählen und dann mit der linken Maustaste ins Ansichtfeld klicken.

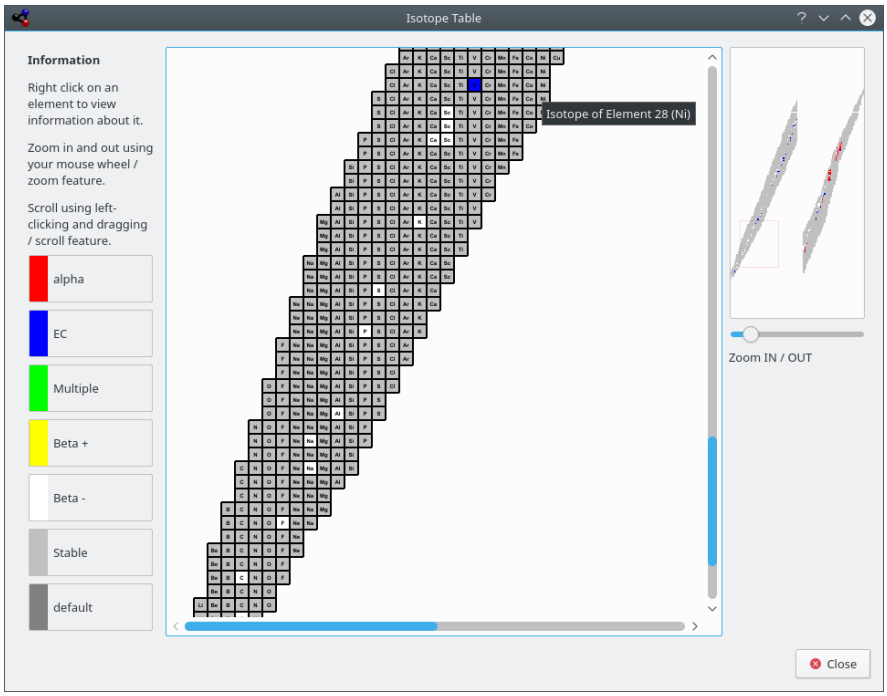
Auf der Karteikarte **Messen** können Sie Längen und Winkel eines Moleküls ermitteln. Folgen Sie dazu den Anweisungen auf der Karteikarte.



3.7.2 Isotopentabelle

Die **Isotopentabelle** zeigt die Isotope der Elemente.

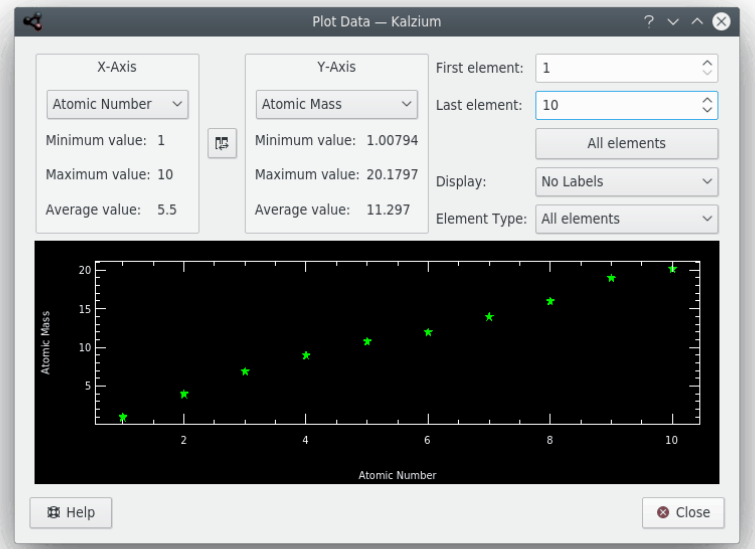
Es gibt verschiedene Arten von Isotopen, einige sind stabil, andere nicht. Die instabilen Isotope können unter Auftreten von Alphastrahlung oder Betastrahlung zerfallen. Die Unterschiede sind farblich gekennzeichnet.



Kalzium kann die Isotope eines Bereichs von Elementen grafisch darstellen.

3.7.3 Daten grafisch darstellen

Im Dialog **Daten grafisch darstellen** können Sie einige Informationen über Elemente als Grafik anzeigen lassen. Auf der X-Achse wird ein Bereich von Elementen als Zahlen angezeigt. Diesen Bereich können Sie mit den Feldern **Erstes Element** und **Letztes Element** im Dialog einstellen. Klicken Sie auf den Knopf **x- und y-Achse tauschen** zwischen den beiden Achsenbereichen, um die X- und Y-Achse zu vertauschen.



Kalzium kann einige Daten über einen Bereich von Elementen grafisch darstellen.

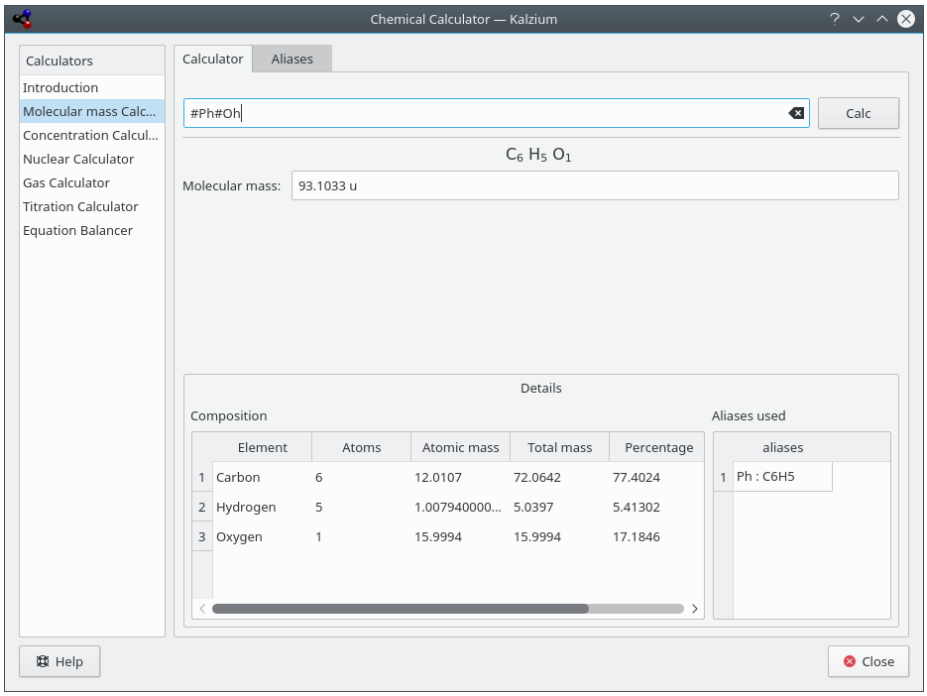
3.7.4 Berechnungen durchführen

Kalzium verfügt über eine Vielzahl von **Rechnern** für verschiedene Anwendungen.

Es gibt folgende Rechner in Kalzium:

Molekülmassen-Rechner

Mit diesem Rechner können Sie die Massen vieler Moleküle ermitteln.
Sie können Kurzformen von Molekülnamen definieren und weitere Aliase einfügen.



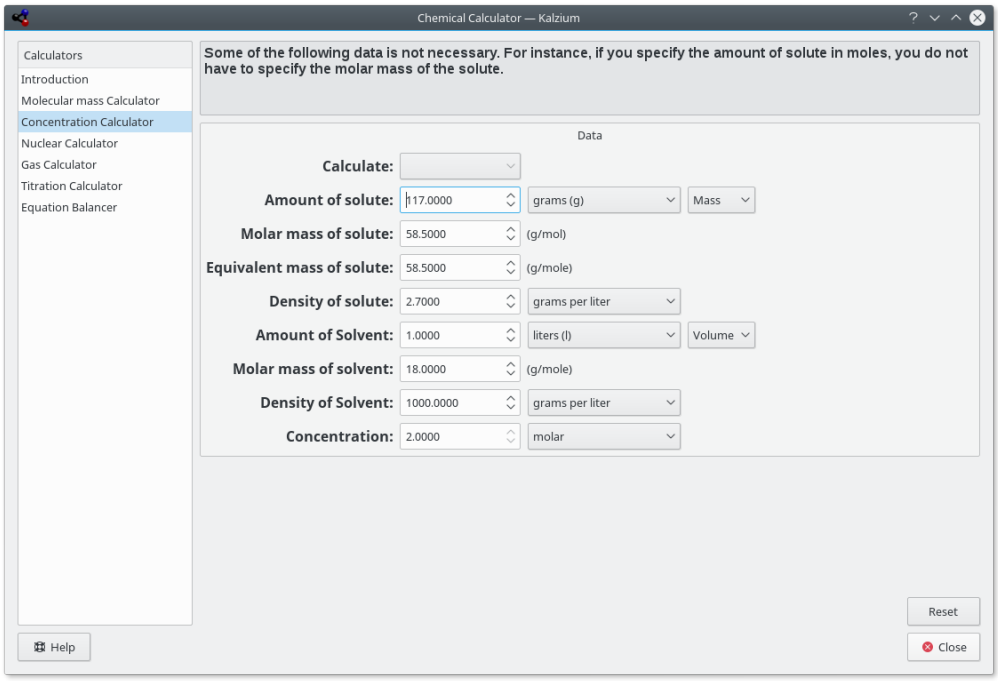
Kalzium berechnet die Molekülmasse von Phenol.

Konzentrations-Rechner

Sie können unter anderem folgende Mengen berechnen:

- Menge des Stoffes
- Dichte des Lösungsmittels
- Dichte des Stoffes:

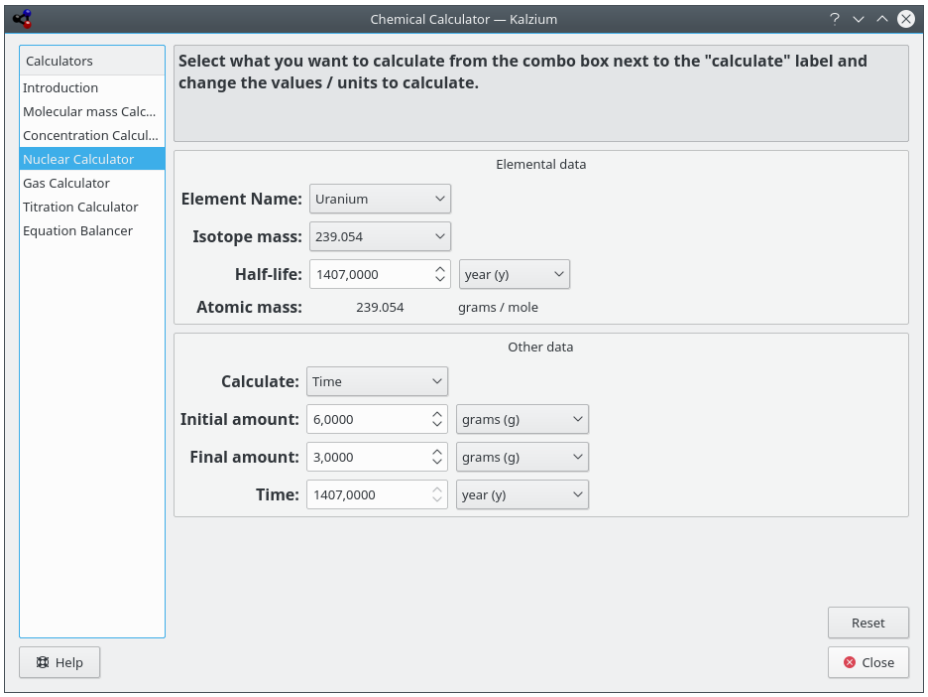
Es gibt einen große Auswahl an Einheiten und verschiedenen Methoden, um Mengen anzugeben.



Kalzium berechnet die Parameter einer Lösung.

Nuklear-Rechner

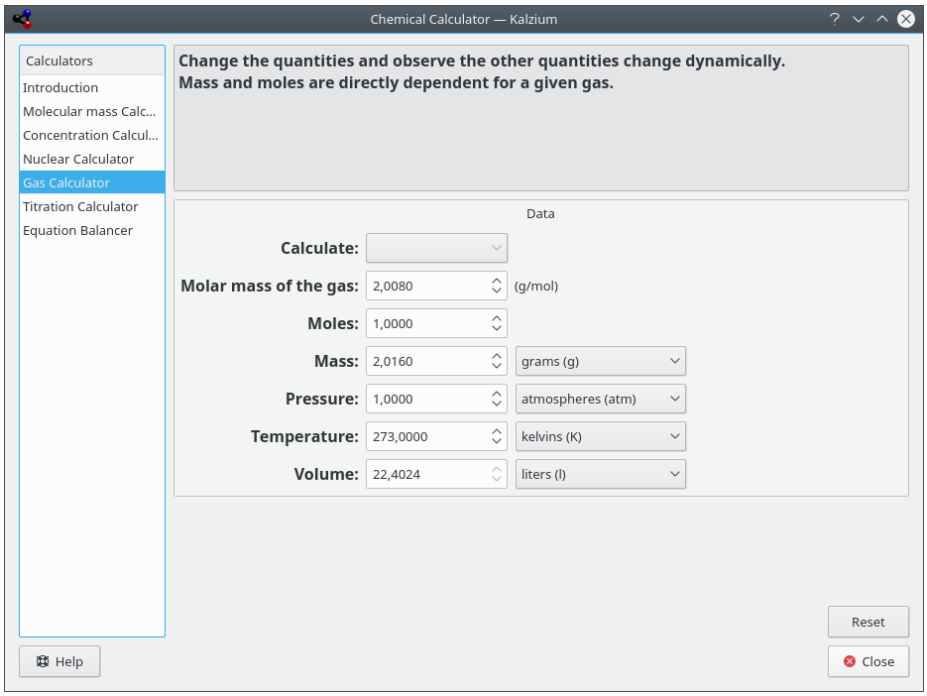
Dieser Rechner verwendet die nuklearen Daten in Kalzium, um die zu erwartenden Menge eines radioaktiven Stoffes nach einer Zerfallszeit zu bestimmen.



Kalzium berechnet die Parameter des Uran-Zerfalls.

Gas-Rechner

Dieser Rechner bestimmt die Temperatur, den Druck, das Volumen, die Gasmenge usw. für verschiedene ideale und reale Gase.



Kalzium berechnet Gas-Parameter.

Titrations-Rechner

Dieser Rechner bestimmt den Äquivalenzpunkt einer mit dem pH-Meter durchgeführten Titration und die beste Anpassung durch eine hyperbolische Tangente. Sie können mit diesem Rechner auch ein System von Gleichungen lösen und zeigen lassen, wie sich die Konzentration eines Ions als Funktion eines anderen ändert.
Es gibt die zwei folgenden Karteikarten auf der Rechnerseite:

Experimentelle Werte

Mit diesem Rechner können Sie einen Graphen Ihrer experimentellen Daten zeichnen, die Sie mit einer Titration ermittelt haben, und das Äquivalenzvolumen ermitteln. Es wird ausdrücklich empfohlen, eine gerade Anzahl von Punkten einzugeben. Damit erhalten Sie den am Besten angepassten Algorithmus, sortiert nach dem Volumen, dem Wert auf der **X-Achse**.

Theoretische Gleichungen

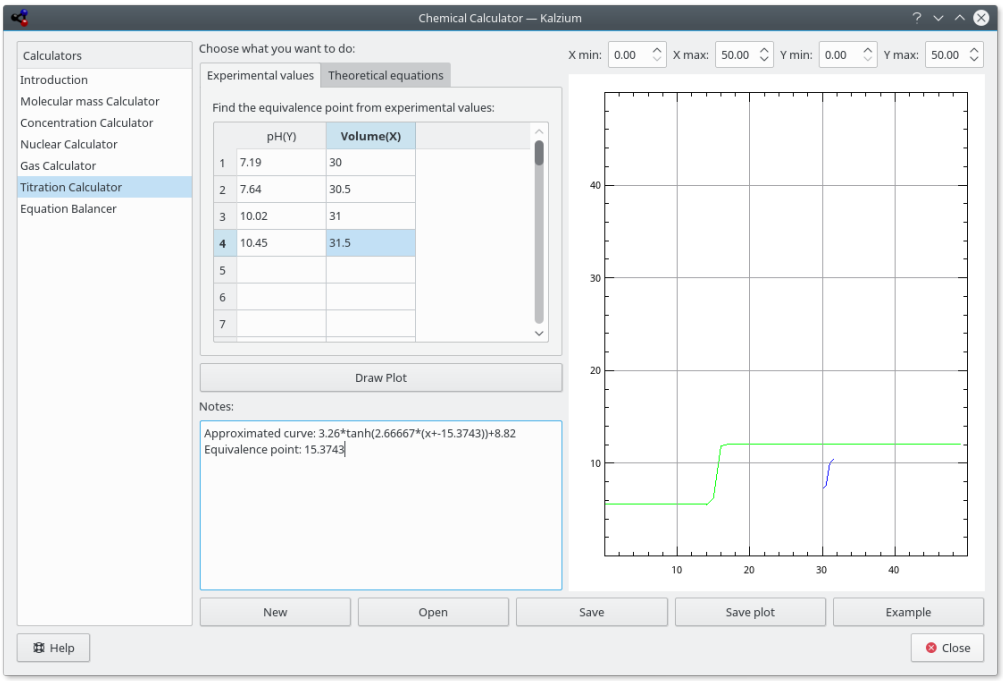
In diese Tabelle können Sie Gleichungen eingeben, die Sie vorher für das chemische Gleichgewicht erhalten haben.
Haben Sie zum Beispiel diese Reaktion *A + B -> C + D*, dann lautet die Gleichung *K=(C*D)/(A*B)*. Daher müssen Sie **`K`** in der Spalte **Parameter** und **`(C*D)/(A*B)`** in der Spalte **Wert** eingeben. Möchten Sie einem Parameter einen bekannten Wert zuweisen, dann geben Sie den numerischen Wert direkt in das Feld **Wert** ein.
Sie können zum Beispiel folgendes System verwenden:

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

Dann tragen Sie **`D`** für die **X-Achse** und **`A`** für die **Y-Achse** ein: Dann ermitteln Sie, wie sich die Konzentration von A als Funktion der Konzentration D ändert.

> ANMERKUNG
> Bitte verwenden Sie für die Exponenten keine Klammern: **`10^-3`** ist korrekt, aber **`10^(-3)`** ist falsch.

Die Ergebnisse können als Grafik dargestellt werden, indem Sie den Knopf **Graphen zeichnen** drücken. In der Grafik wird die aus den theoretischen Berechnungen ermittelte Kurve rot, die im Experiment ermittelte Kurve blau und in grün die angenäherte Kurve für die experimentellen Werte dargestellt. Diese Grafik kann im SVG-Format gespeichert werden.



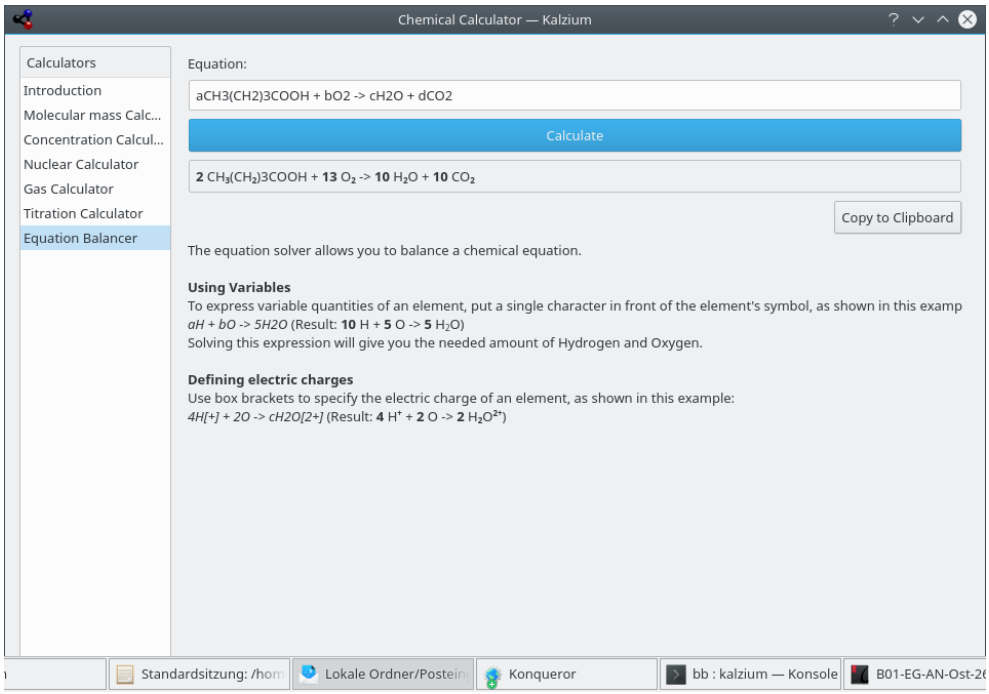
Vorgegebenes Beispiel einer Titrations-Analyse.

Gleichungslöser

Mit dem**Gleichungslöser** können Sie chemische Gleichungen lösen. Hier ein Beispiel:

aH2O + bCO2 -> cH2CO3

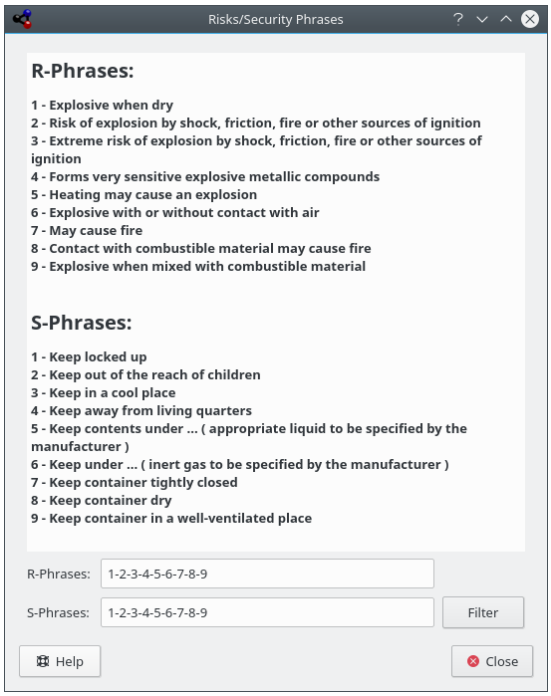
Die errechnete Gleichung wird oben im Fenster angezeigt. Wie Sie im ersten Beispiel erkennen können, ist es möglich den Wert für einen oder mehrere Koeffizienten festzulegen. Die anderen Koeffizienten werden entsprechend angepasst. Weiterhin können auch Klammern um Elemente und Elektronenladungen verwendet werden, wie in den letzten beiden Beispielen gezeigt wird.



Kalzium kann chemische Gleichungen automatisch ausgleichen.

3.7.5 Risiko- und Sicherheitssätze

R- und S-Sätze („Risiko- und Sicherheitssätze“, von engl. risk and safety) sind kodifizierte Warnhinweise zur Charakterisierung der Gefahrenmerkmale von einzelnen Gefahrstoffen (Elementen und chemischen Verbindungen) sowie daraus hergestellten gefährlichen Zubereitungen, welche sich aus der Einstufung dieser Substanzen ergeben. Sie sind zusammen mit den Gefahrenbezeichnungen und den jeweils dazu gehörenden Gefahrensymbolen die wichtigsten Hilfsmittel für die innerhalb der EU vorgeschriebenen Gefahrstoffkennzeichnung. R- und S-Sätze bestehen aus einem Risikoteil (R) und einem Sicherheitsteil (S), beide kombiniert mit einer Zahl. Diese R- und S-Sätze haben in allen Sprachen die gleiche Bedeutung.

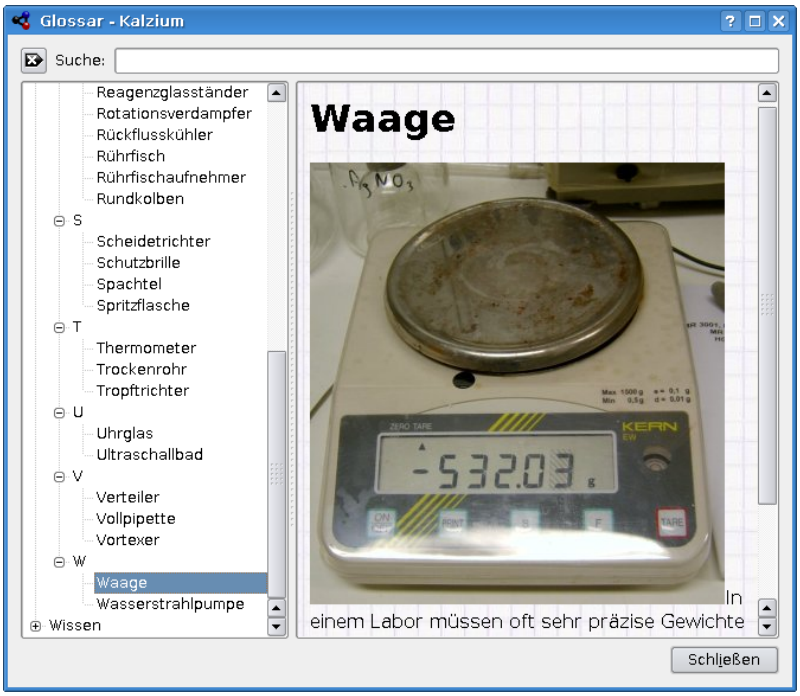


Kalzium kann Risiko- und Sicherheitssätze anzeigen

3.7.6 Glossar

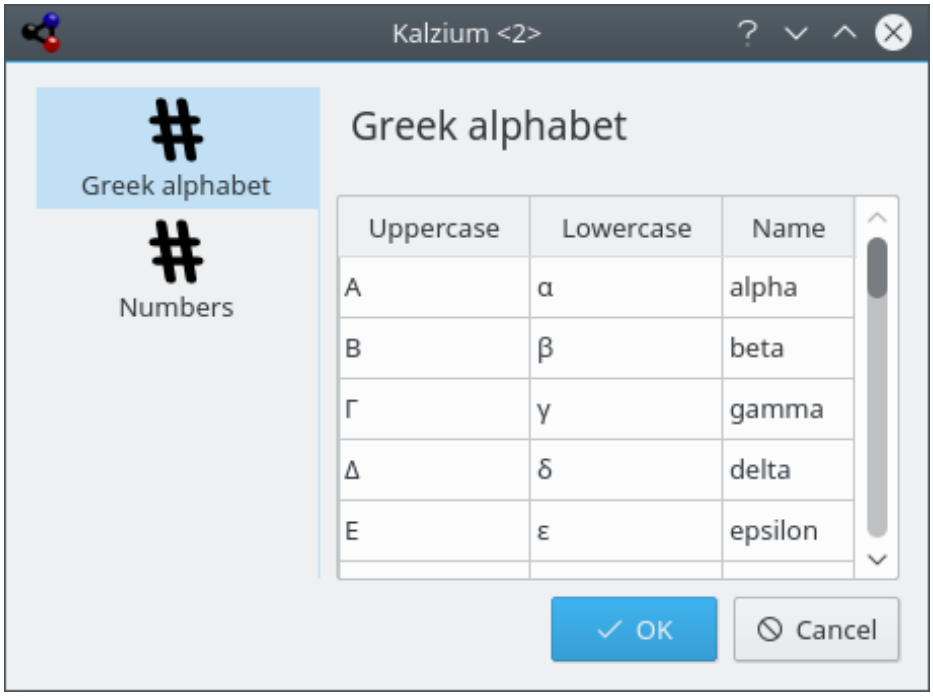
Das **Glossar** bietet Ihnen Definitionen der häufigsten verwendeten chemischen Geräte sowie weitere wissenswerte Informationen. Auf der linken Seite können Sie einen Baum mit den Einträgen sehen. Oben sind chemische Formeln, darunter ein weiterer Baum mit Laborgeräten zu erkennen.

Im oberen Teil des Fensters finden Sie eine Suchleiste. Wenn Sie etwas eingeben, passen sich die Bäume links sofort an. Der kleine Knopf rechts neben der Suchleiste löscht den Inhalt der Leiste.



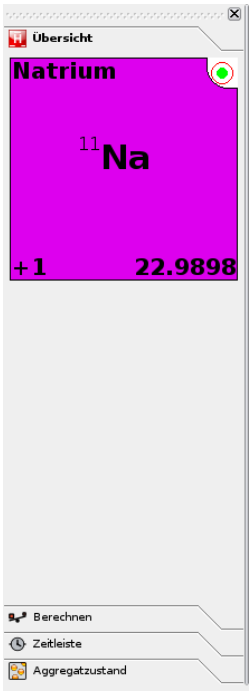
3.7.7 Tabellen

Die **Tabelle** zeigt das griechische Alphabet, das für die Bezeichnung einiger chemischer und physikalischer Einheiten verwendet wird, und die numerische Präfixe und römische Ziffern für arabische Zahlen.



3.7.8 Seitenleiste

3.7.8.1 Übersicht

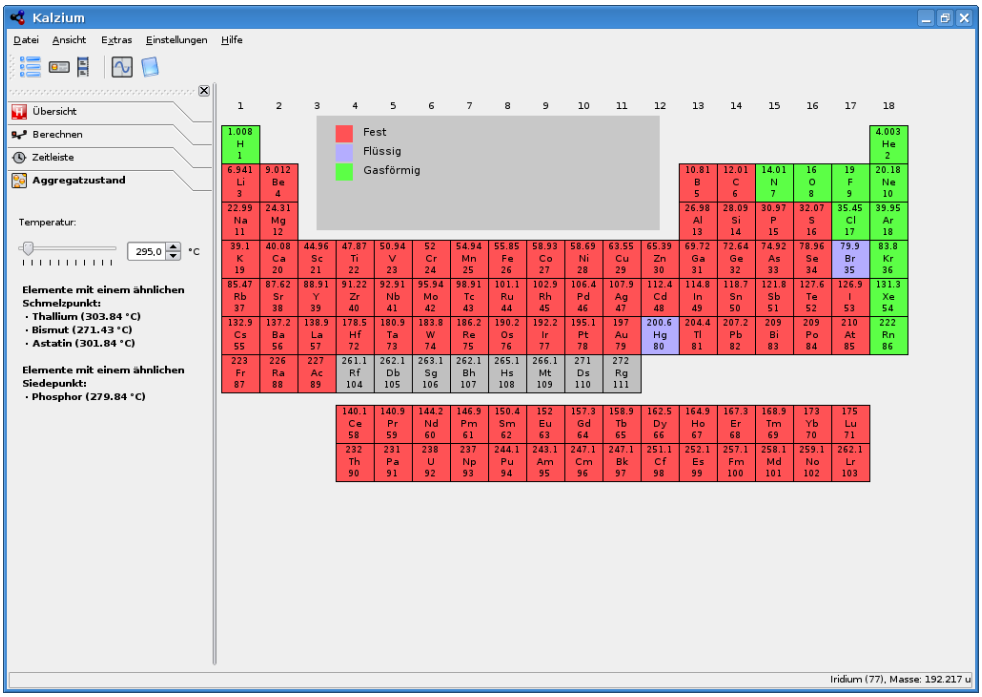


Die Karteikarte **Übersicht** zeigt Ihnen die wichtigsten Informationen des Elements, über dem sich der Mauszeiger befindet.

3.7.8.2 Anzeigen

Die Karteikarte **Anzeigen** ist die zweite Karteikarte in der Seitenleiste.

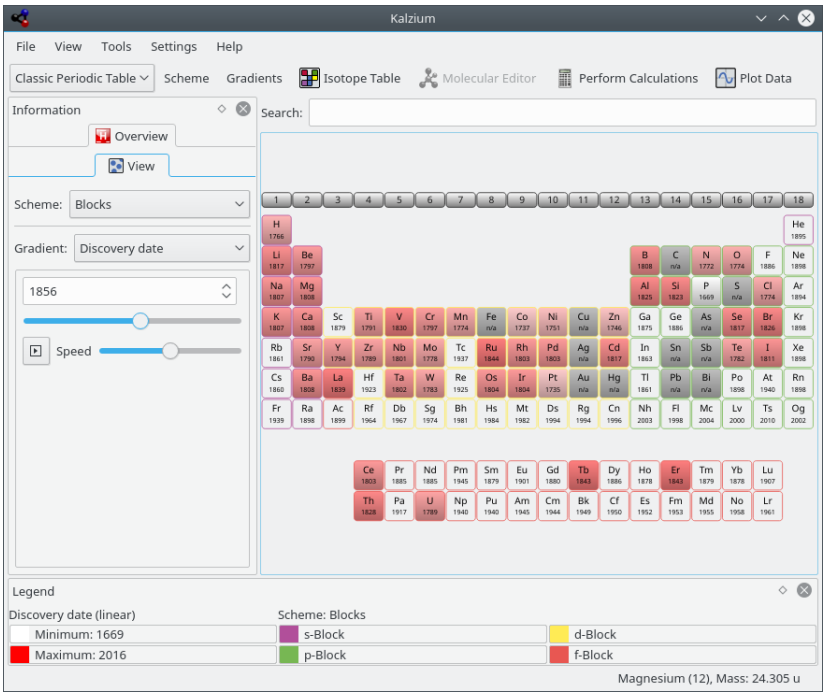
Als erstes werden Ihnen folgende Symbole und Text gezeigt:



Kalzium kann Ihnen anzeigen, welche Elemente bei einer bestimmten Temperatur fest/flüssig/gasförmig sind.

Mit der Karteikarte **Ansehen** können Sie die angezeigten Elemente im Periodensystem filtern. Sie können zum Beispiel erkunden, welche Elemente zu einer bestimmten Zeit bekannt waren. Das ist eine großartige Möglichkeit, ein Gefühl für die Entwicklung des Periodensystems der Elemente zu bekommen. Wählen Sie **Datum der Entdeckung** aus dem Auswahlfeld **Farbverlauf**. Wenn Sie den Schieberegler bewegen, werden Sie feststellen, dass die Farbe einiger Elemente verschwindet, wenn Sie ihn nach links bewegen, sie erscheint wieder, wenn Sie ihn zurück nach rechts bewegen. Außerdem verändert sich gleichzeitig die angezeigt Jahreszahl.

Die Jahreszahl zeigt das eingestellte Jahr an. Wenn Sie den Regler z. B. auf 1856 bewegen, sehen Sie nur die Elemente, die im Jahr 1856 bekannt waren.

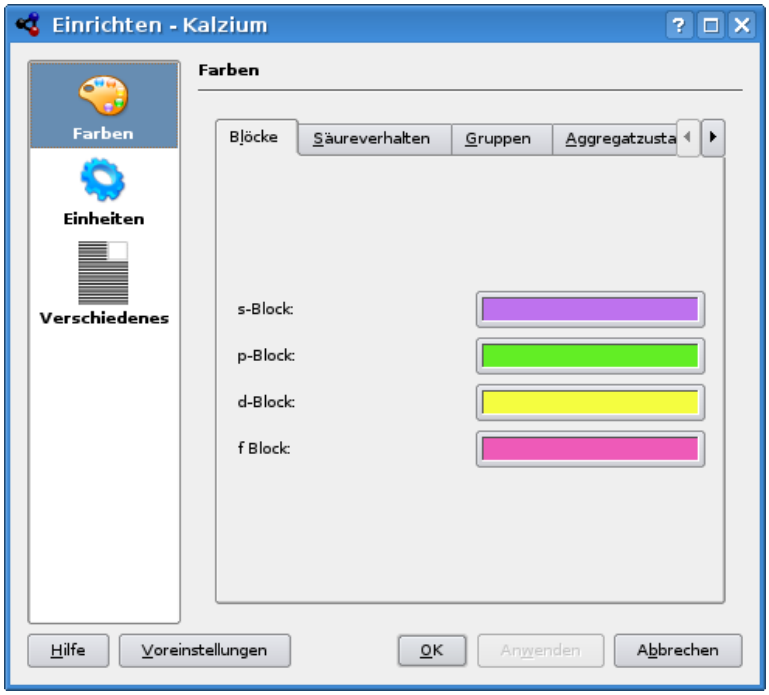


Das Periodensystem in der Vergangenheit (bekannte Elemente im Jahr 1856)

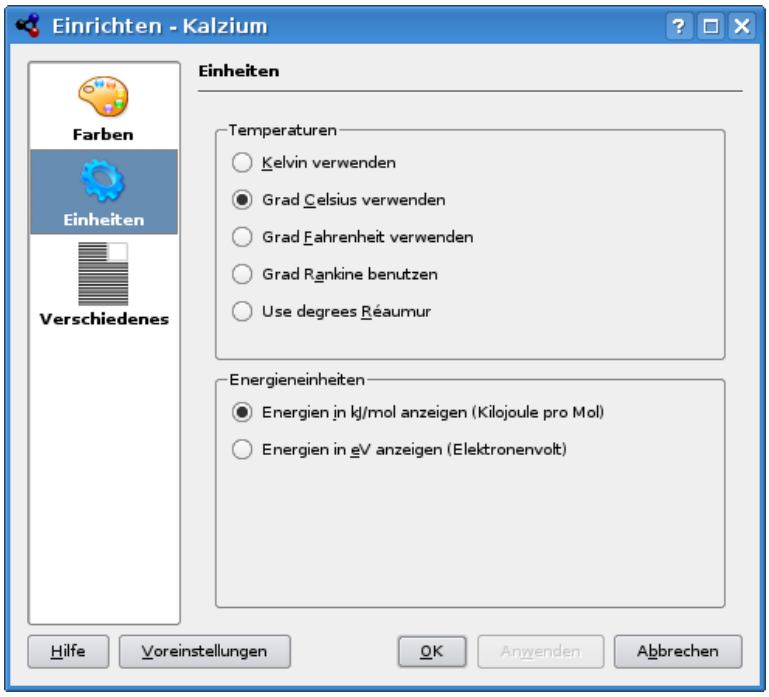
Kapitel 4

Kalzium einrichten

Kalzium hat viele Optionen, die Sie im Dialog zur Einstellung im Menü unter **Einstellungen** → **Kalzium einrichten ...** > erreichen können.



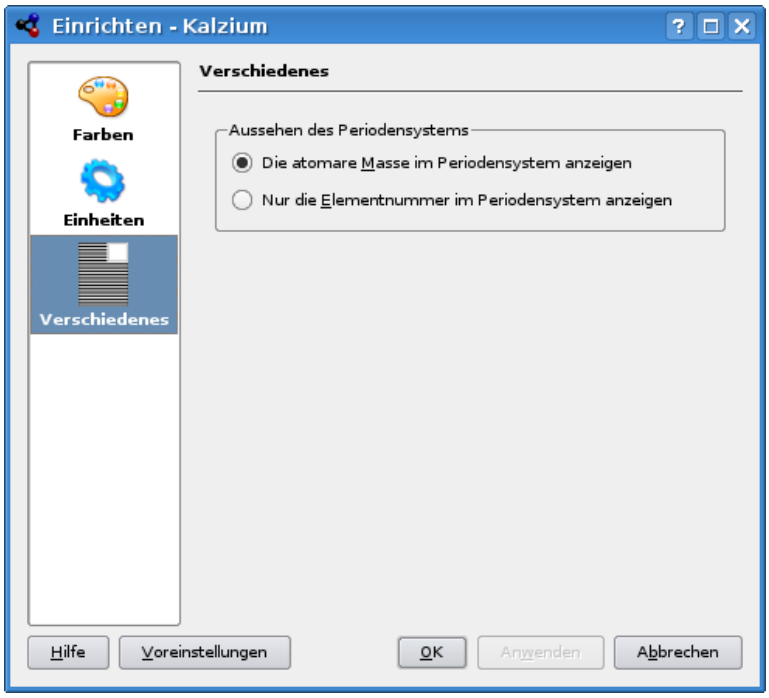
Auf der Seite **Schemata** wählen Sie die unterschiedlichen Farben für jedes Schema.



Anstatt einen linearen Farbverlauf für die Anzeige der gegebenen Eigenschaften eines Elements im Periodensystem zu verwenden, kann Kalzium auch einen logarithmischen Farbverlauf verwenden.

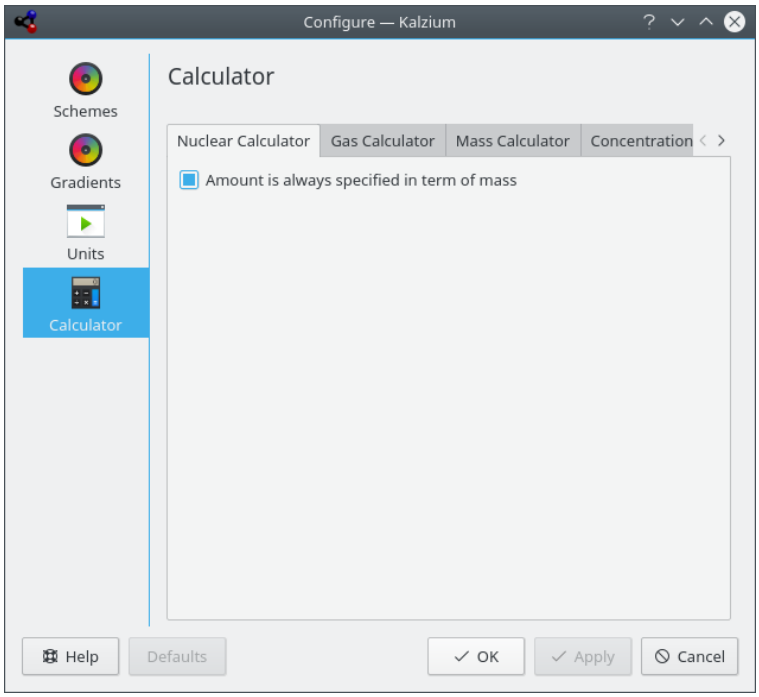
Auf der Seite **Verläufe** können Sie die Eigenschaften der Elemente wählen Sie, die mit einem logarithmischen Farbverlauf dargestellt werden sollen.

Sie können außerdem die **Farbe für maximalen Wert** und die **Farbe für minimalen Wert** des Farbverlaufs festlegen.



Auf der Seite **Einheiten** können Sie die Einheiten für Temperatur, Länge und Energie einstellen. Sie können auswählen, ob Sie lieber Elektronenvolt (eV) oder KiloJoule je Mol (kJ/mol) oder Joule je Mol (J/mol) oder als Voreinstellung Joule (J) als Einheiten anzeigen lassen. Als Länge

können Sie Picometer (pm), Nanometers (nm) oder Ångström (Å) als Voreinstellung auswählen. Die Temperatur ist in der Voreinstellung in Kelvin, Sie können aber auch Celsius (C), Fahrenheit (F) und Réaumur (Ré) einstellen.



Auf der Seite **Rechner** können Sie Standardeinstellungen für die Rechner in Kalzium bestimmen.

Kapitel 5

Befehlsreferenz

5.1 Menüs und Tastenkürzel

5.1.1 Das Menü Datei

Datei → Speichern unter ... (Strg+Umschalt+S)

Speichert das angezeigte Periodensystem als Bild.

Datei → Daten exportieren ...

Öffnet einen Dialog, in dem Sie **Elemente** und deren **Eigenschaften** für den Export der Daten in eine HTML- oder CSV-Datei auswählen können.

Datei → Chemiedaten-Dateien konvertieren ...

Öffnet einen Dialog, in dem Sie eine große Anzahl von verschiedenen chemischen Dateiformaten und Datentypen mithilfe der Bibliothek Open Babel importieren und exportieren können.

Datei → Beenden (Strg+Q)

Beendet Kalzium.

5.1.2 Das Menü Ansicht

Ansicht → Tabellen

Zeigt ein Untermenü mit verschiedenen Periodensystemen. Folgende Einstellungen sind möglich:

Klassisches Periodensystem

Zeigt das klassische Periodensystem mit allen Elementen an.

Kurzperiodensystem

Zeigt ein Periodensystem ohne die Übergangselemente an. Zitat aus der deutschen Wikipedia: „Die chemischen Elemente mit den Ordnungszahlen von 21 bis 30, 39 bis 48, 57 bis 80 und 89 bis 112 werden üblicherweise als Übergangselemente bezeichnet. Da diese Elemente alle Metalle sind, wird auch der Ausdruck Übergangsmetalle verwendet. Dieser Name ist in ihrer Position im Periodensystem begründet, da sich dort der Übergang durch die aufeinanderfolgende Zunahme von Elektronen in den d-Atomorbital entlang jeder Periode zeigt. Übergangselemente werden chemisch von der IUPAC als Elemente, die eine unvollständige d-Schale besitzen oder Ionen mit einer unvollständigen d-Schale ausbilden, definiert. ”

Langperiodensystem

Zeigt ein Periodensystem mit den Übergangselementen (F-Elemente) an. Zitat aus der deutschen Wikipedia: „Die chemischen Elemente mit den Ordnungszahlen von 21 bis 30, 39 bis 48, 57 bis 80 und 89 bis 112 werden üblicherweise als Übergangselemente bezeichnet. Da diese Elemente alle Metalle sind, wird auch der Ausdruck Übergangsmetalle verwendet. Dieser Name ist in ihrer Position im Periodensystem begründet, da sich dort der Übergang durch die aufeinanderfolgende Zunahme von Elektronen in den d-Atomorbital entlang jeder Periode zeigt. Übergangselemente werden chemisch von der IUPAC als Elemente, die eine unvollständige d-Schale besitzen oder Ionen mit einer unvollständigen d-Schale ausbilden, definiert. ”

Übergangselemente

Zeigt ein Periodensystem nur mit den Übergangselementen an.

DZ-Periodensystem

Diese Darstellung des Periodensystems entspricht dem Vorschlag des „Deutschen Zentralausschusses” für Chemie.

Ansicht → Nummerierung

Zeigt ein Untermenü mit verschiedenen Nummerierungsschema. Folgende Einstellungen sind möglich:

Keine Nummerierung

Zeigt keine Nummerierungsschema.

IUPAC

Zeigt die IUPAC-Nummerierung an.

CAS

Zeigt die CAS-Nummerierung an.

IUPAC (alt)

Zeigt die alte IUPAC-Nummerierung an.

Ansicht → Schema

Zeigt ein Untermenü mit verschiedenen Schemata. Folgende Einstellungen sind möglich:

Schwarzweiß

Zeigt alle Elemente in einer Farbe an.

Blöcke

Zeigt die vier Blöcke der Elemente an.

Symbolisch

Zeigt jedes Element als Symbol an.

Familie

Zeigt die Familien der Elemente an.

Gruppen

Zeigt die Gruppen der Elemente farbig an.

Farben

Zeigt die Elemente farbig an.

Ansicht → Farbverläufe

Zeigt ein Untermenü mit verschiedenen Farbverläufen. Folgende Einstellungen sind möglich:

Kein

Zeigt keine Farbverläufe in der Tabelle an.

Aggregatzustand

Zeigt den Aggregatzustand der Elemente an.

Kovalenzradius
Zeigt den Kovalenzradius der Elemente an.

Van der Waals
Zeigt den Van-der-Waals-Radius der Elemente an.

Atommasse
Zeigt die Atommasse der Elemente an.

Siedepunkt
Zeigt den Siedepunkt der Elemente an.

Schmelzpunkt
Zeigt den Schmelzpunkt der Elemente an.

Elektronegativität (Pauling)
Zeigt die Elektronegativität der Elemente an.

Elektronenaffinität
Zeigt die Elektronenaffinität der Elemente an.

Entdeckungsdatum
Zeigt das Entdeckungsdatum für jedes Element an, jedes Jahrhundert wird in einer anderen Hintergrundfarbe dargestellt.

Erste Ionisation
Zeigt für alle Element die erforderliche Energie für die erste Ionisation an.

Ansicht → Legende

Hier schalten Sie die Anzeige der Legende für das gewählte Schema (Gruppen, Familien, Blöcke) ein und aus. In der Voreinstellung wird die Legende angezeigt, aber wenn Sie die Anzeige ausschalten, gilt dies auch für die anderen Schemata, bis Sie die Anzeige wieder einschalten. Kalzium speichert diese Einstellung beim Programmende, sodass beim nächsten Start des Programms diese Einstellung wiederhergestellt wird.

Ansicht → Informationen
Blendet die Seitenleiste ein bzw. aus.

Ansicht → Tabelleninformation
Schaltet die Anzeige der Tabelleninformation ein und aus.

5.1.3 Das Menü Extras

Extras → Moleküleditor ...

Öffnet den Dialog **Moleküleditor**.

Extras → Isotopentabelle ...

Öffnet einen Dialog mit der **Isotopentabelle** aller Elemente.

Extras → Daten grafisch darstellen ...

Öffnet den Dialog **Daten grafisch darstellen**.

Extras → Berechnungen durchführen ...

Öffnet den Dialog **Rechner**.

Extras → R- und S-Sätze ...
Öffnet den Dialog **Risiko- und Sicherheitssätze**.

Extras → Glossar ...
Öffnet den Dialog **Glossar**.

Extras → Tabellen ...
Zeigt einen Dialog mit dem **Griechischen Alphabet** und **Numerischen Präfixen und römischen Ziffern**.

5.1.4 Die Menüs „Einstellungen” und „Hilfe”

Kalzium verwendet die bekannten KDE-Menüeinträge **Einstellungen** und **Hilfe**. Mehr dazu erfahren Sie in den Abschnitten zu den Menüs Einstellungen und Hilfe in den KDE-Grundlagen.

Kapitel 6

Fragen und Antworten

1. *Muss ich irgendwann etwas für Kalzium bezahlen?*

   Nein, niemals. Aber der Autor freut sich immer über eine nette Mail oder eine DVD als „Dankeschön". Kalzium ist unter der GPL lizenziert, deshalb müssen Sie nie für das Programm bezahlen.

Kapitel 7

Wie kann ich helfen?

1. *Unterstützen Sie mich mit Daten.*
   In der Welt der Wissenschaft ist der Fortschritt unglaublich schnell. Wenn Sie einen falschen Wert finden oder einen Wert vermissen, schicken Sie mir eine E-Mail.
2. *Suchen Sie Fehler oder machen Sie Verbesserungsvorschläge.*

   Wenn Sie Fehler im Programm finden oder Vorschläge für Verbesserungen haben, lassen Sie es mich wissen unter cniehaus@kde.org.

Kapitel 8

Danksagungen und Lizenz

Kalzium
Programm Copyright 2001-2005 Carsten Niehaus cniehaus@kde.org
Mitwirkende:

- Pino Toscano toscano.pino@tiscali.it

Übersetzung: Thorsten Mürell thorsten@muerell.de

Übersetzung: Christoph Hamann chhamann@gmx.de

Diese Dokumentation ist unter den Bedingungen der GNU Free Documentation License veröffentlicht.
Dieses Programm ist unter den Bedingungen der GNU General Public License veröffentlicht.