الجمهوريـــة الجزائريـــة الديمقراطيـــة الشعبيـــة

وزارة التربيـــة الوطنيـــة

المفتشيـــة العامـــة للبيداغوجيـــا

يوم تكويني لفائدة

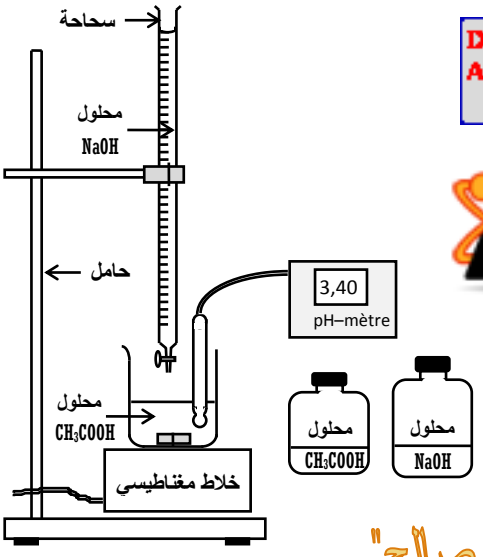
أساتذة العلوم الفيزيائية في التعليم الثانوي

المقاطعة 3 - سطيف -

يـــــوم: 14 مـــــارس 2012

بثانوية: ســـــراي الضـــــحوي – قـــــلال

الورشة الخاصة بالبرمجيات



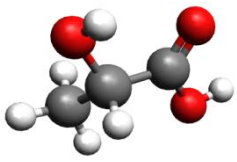
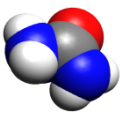
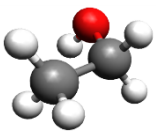
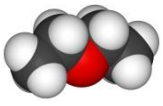
ـ البرمجية: DOZZACID.

ـ البرمجية: AVOGADRO.

ـ متفرقات.

من إعداد و إشراف: مفتش التربية الوطنية

لمادة العلوم الفيزيائية "خليفي صالح"

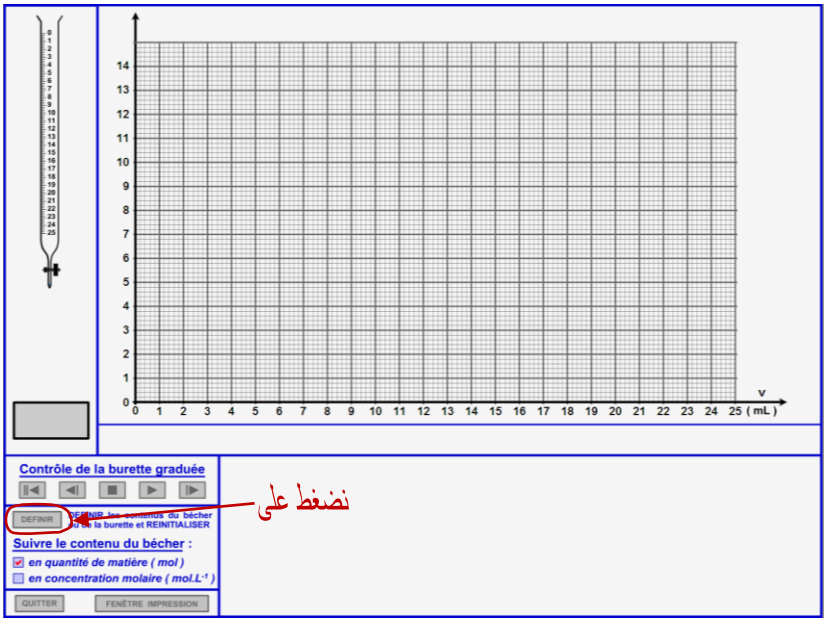
I) البرمجية DOZZACID:

بعد تثبيت البرمجية على جهاز الكمبيوتر، انقر على رمز الاختصار

الموجود على سطح المكتب. تنفتح أول نافذة للبرنامج كالتالي:

(يستحسن ضبط أبعاد شاشة العرض على القيمة: 1024×768 *pixels*)

انقر (بزر الفأرة الأيسر) على **Continuer** فتظهر لك نافذة أخرى كالتالي:



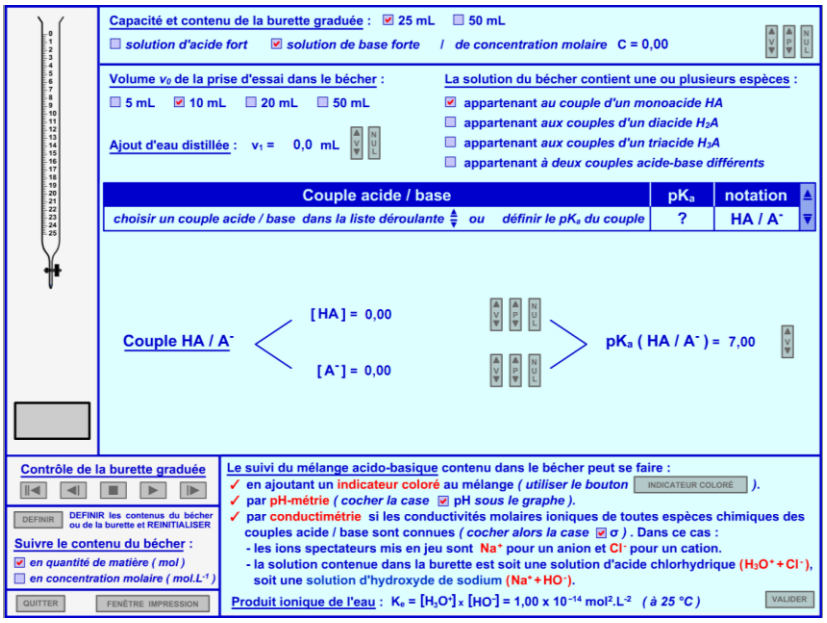
انقر الآن على الزر **DEFINIR** بعد أن تحدد **أحد الخيارين** لمتابعة محتوى كأس البيشر:

✓ بدلالة: **كميات المادة** (mol).

أو:

✓ بدلالة: **التراكيز المولية** ($mol.L^{-1}$).

فتظهر النافذة التالية:



في هذه النافذة يتم إتباع الخطوات التالية:

1- <u>سعة و محتوى السحاحة المدرجة (المحلول المعايِّر)</u>:

نختار إما:

✓ **محلول حمض قوي و تركيزه المولي:** $C = 0.00 \times 10^{-0.0}\ mol.L^{-1}$ ▲V▼ ▲P▼ NUL

(من أجل: معايرة أساس قوي أو ضعيف بحمض قوي).

أو نختار:

✓ **محلول أساس قوي و تركيزه المولي:**

(من أجل: معايرة حمض قوي أو ضعيف بأساس قوي).

<u>ملاحظة</u>: الرمز: ▲V▼ لتغيير قيمة التركيز $C = 0.00$ بالزيادة ▲ أو بالنقصان▼.

الرمز: ▲P▼ لتغيير قيمة الأس السالب للعدد $10^{-0.0}$ بالزيادة ▲ أو بالنقصان▼.

الرمز: NUL للعودة إلى القيمة 0.00 للتركيز C.

2- الحجم (V_0) المأخوذ في كأس البيشر من المحلول المعايَر:

✓ نختار قيمة لـــ V_0 من بين القيم المقترحة:

☑ 5 mL أو: ☑ 10 mL أو: ☑ 20 mL أو: ☑ 50 mL

ملاحظة: يمكن إضافة حجم معين V_1 من الماء المقطر للحجم V_0، ليصبح حجم المحلول المعاير في هذه الحالة: $V_{titré} = V_0 + V_1$ (مع الأخذ في الحسبان قيمة حجم المزيج النهائي $V_{totale} = V_0 + V_1 + V_{ajouté}$ عند حساب التركيزين: [HA] ؛ [A^-] فيما بعد)

✓ نختار كذلك ما إذا كان المحلول في كأس البيشر يحتوي فرد أو عدة أفراد كيميائية:

☑ تنتمي لثنائية حمض أحادي HA.

☑ تنتمي لثنائية حمض ثنائي H_2A.

☑ تنتمي لثنائية حمض ثلاثي H_3A.

☑ تنتمي لثنائيتين حمض– أساس مختلفتين.

3- تحديد الثنائية (acide/base) و الثابت pK_a المرافق:

✓ نختار قيمة للثابت pK_a توافق الثنائية (acide/base) الحاضرة في المحلول المراد معايرته و ذلك بالنقر على الزر ▲▼ أمام رمز الثنائية HA/A^- (لأعلى ▲ أو لأسفل ▼) فتظهر قيم مختلفة للثابت pK_a مرفقة أليا برمز الثنائية HA/A^- الموافقة حيث نختار القيمة المناسبة.

نضغط على

Couple acide / base	pK_a	notation
choisir un couple acide / base dans la liste déroulante ▲▼ ou définir le pK_a du couple	?	HA / A^- ▲▼

✓ نحسب قيمتي التركيزين الموليين للفرد الحمضي [HA] و الفرد الأساسي [A^-]:

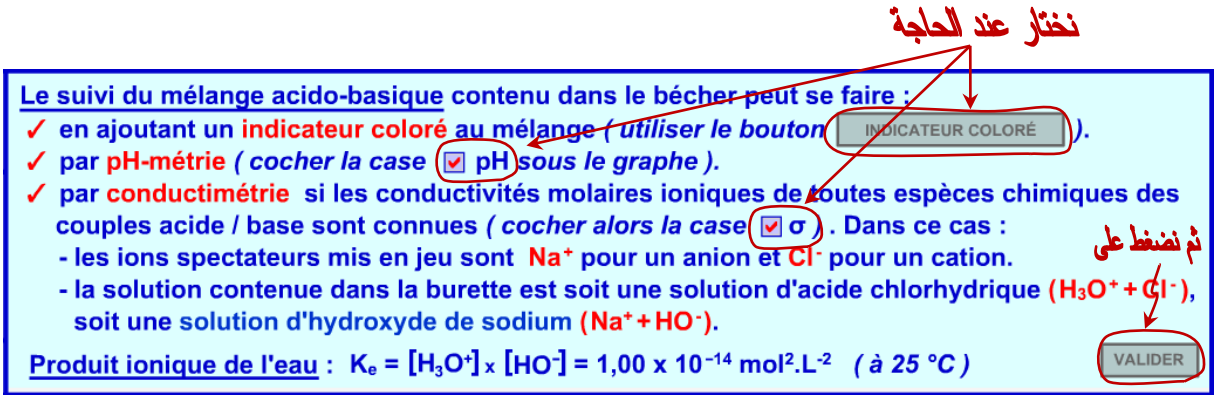
$[HA] = 0.00 \times 10^{-0.0}\ mol.L^{-1}$ ▲V▼ ▲P▼ NUL

$[A^-] = 0.00 \times 10^{-0.0}\ mol.L^{-1}$ ▲V▼ ▲P▼ NUL

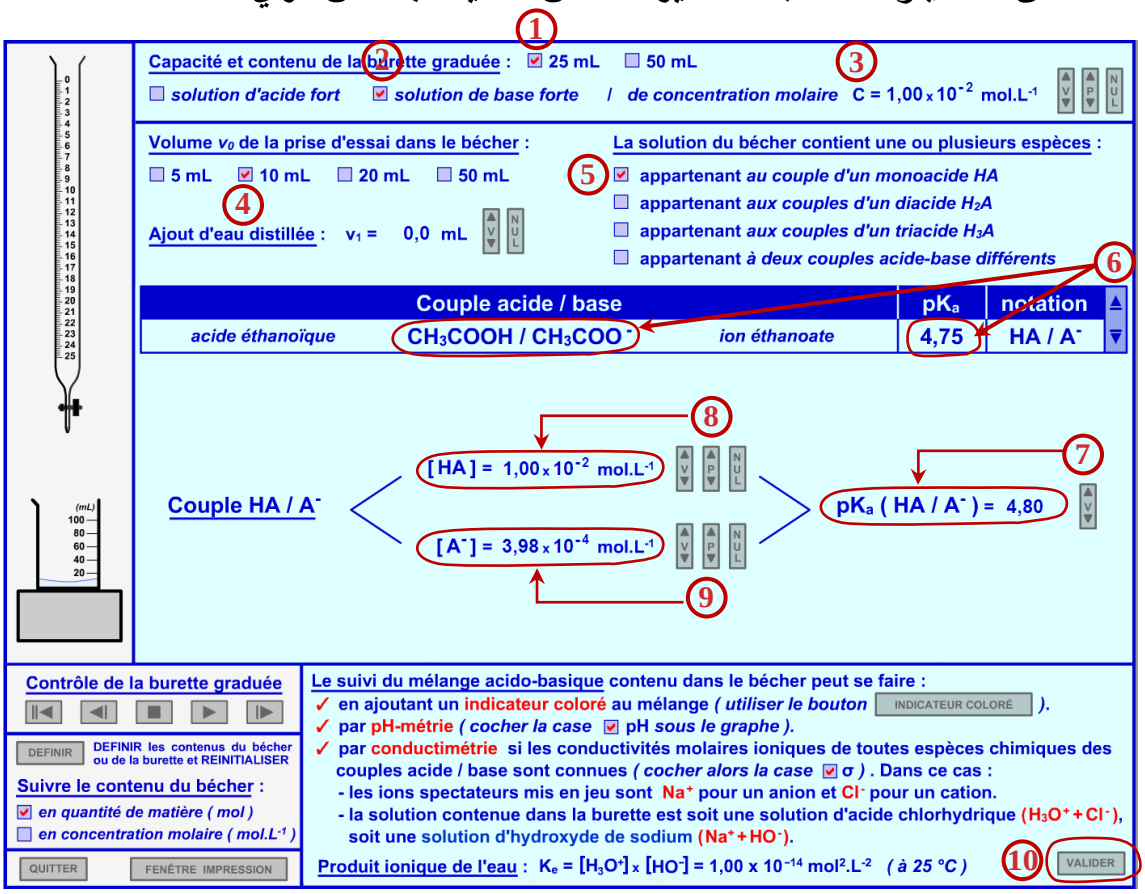
Couple HA / A^- ← [HA] = 0,00 ▲V▼ ▲P▼ NUL ; [A^-] = 0,00 ▲V▼ ▲P▼ NUL → pK_a (HA / A^-) = 7,00

نتابع التوجيهات المرفقة من أجل تحديد طريقة المتابعة لعملية المعايرة حمض– أساس:

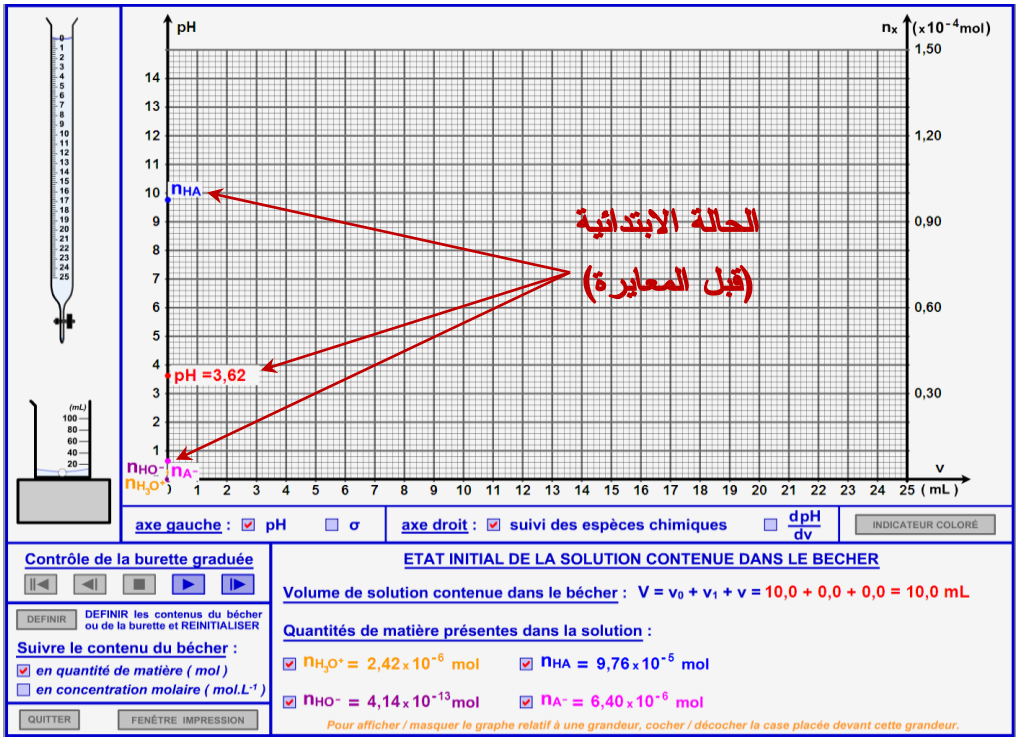
- ✓ إما بإضافة كاشف ملون و تحديد هذا الكاشف(بالنقر على الزر INDICATEUR COLORÉ
- ✓ أو بالمعايرة الـــpH – مترية (بتعيين الخانة pH ☑ أسفل البيان).
- ✓ أو بالمتابعة عن طريق قياس الناقلية (بتعيين الخانة σ ☑ أسفل البيان).



كمثال عن الاختيارات السابقة: **معايرة حمض ضعيف بأساس قوي**



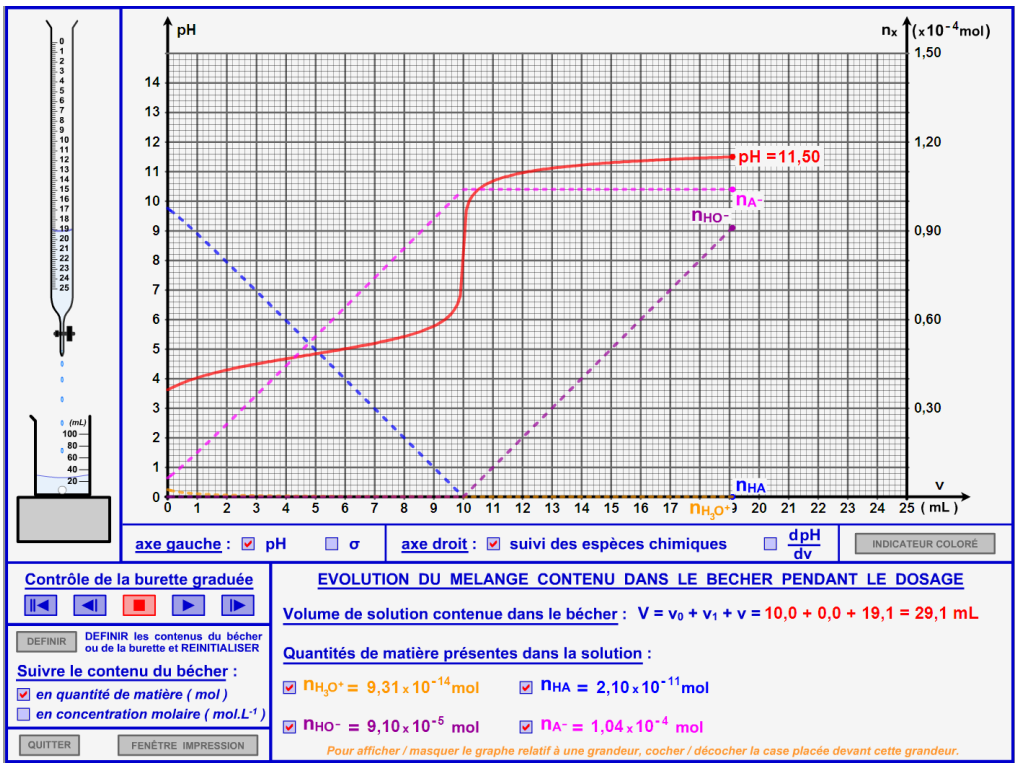
بعدها انقر على زر المصادقة VALIDER فتظهر مثلا النافذة التالية:



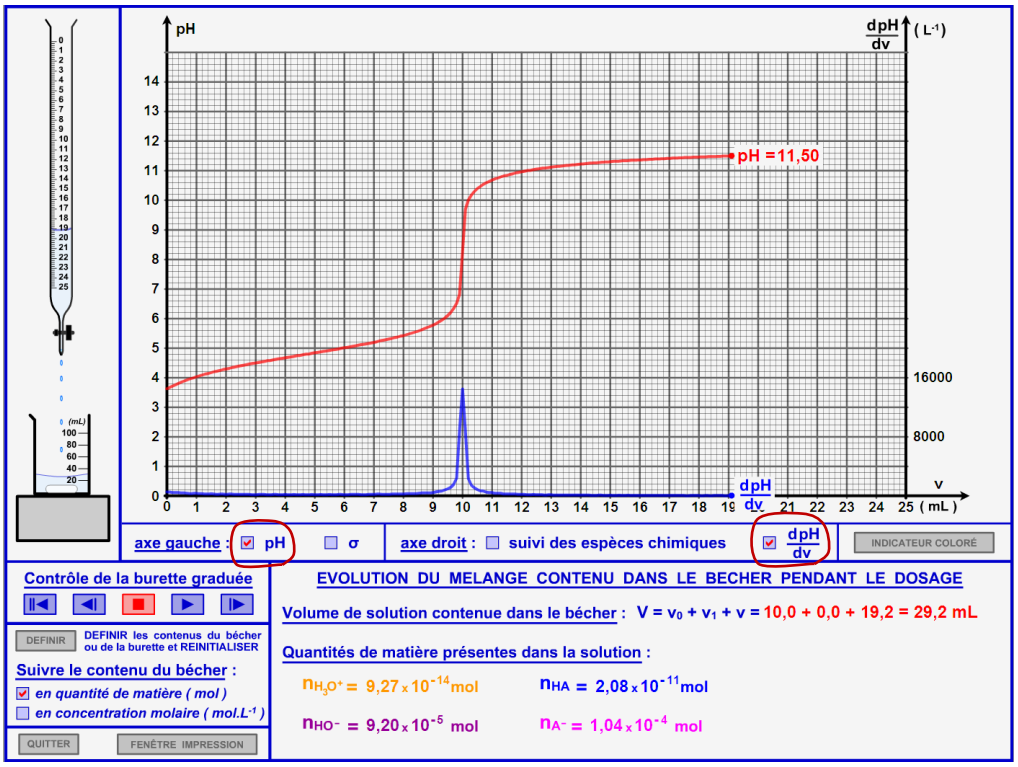
نباشر عملية المتابعة بالنقر على أحد الأزرار:

للعودة إلى بداية المتابعة | للعودة إلى الخلف خطوة خطوة | إيقاف المتابعة | للمتابعة المستمرة | للمتابعة خطوة خطوة

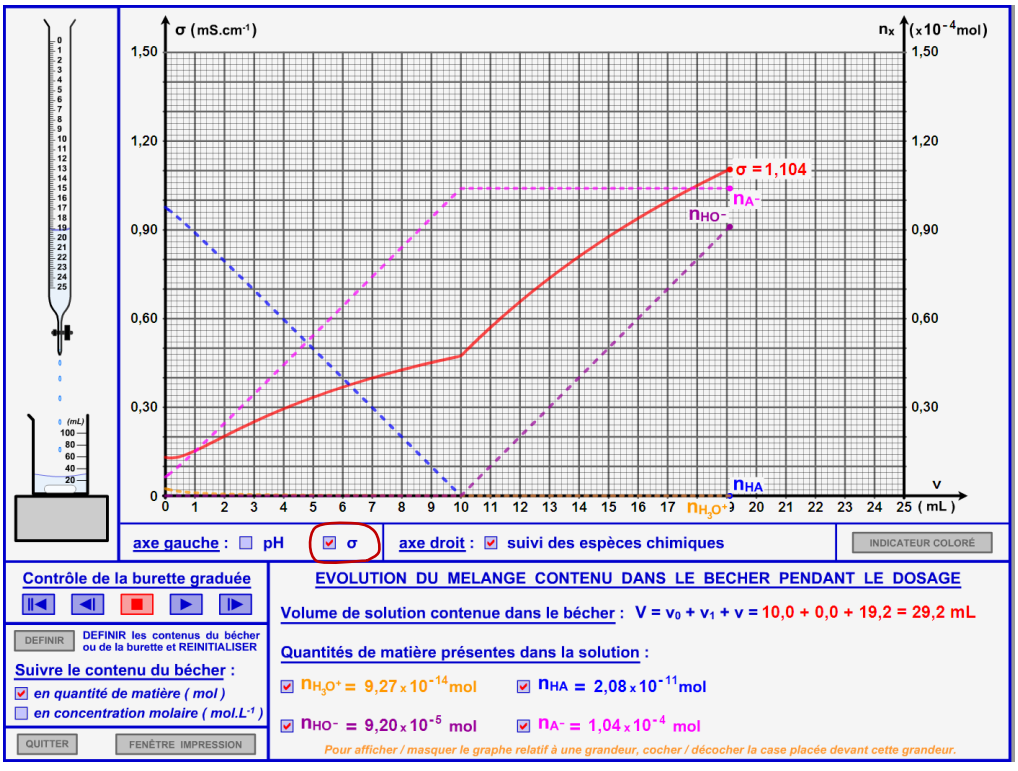
مثلا عند المتابعة المستمرة بالنقر على الزر ▶ نحصل على البيان:



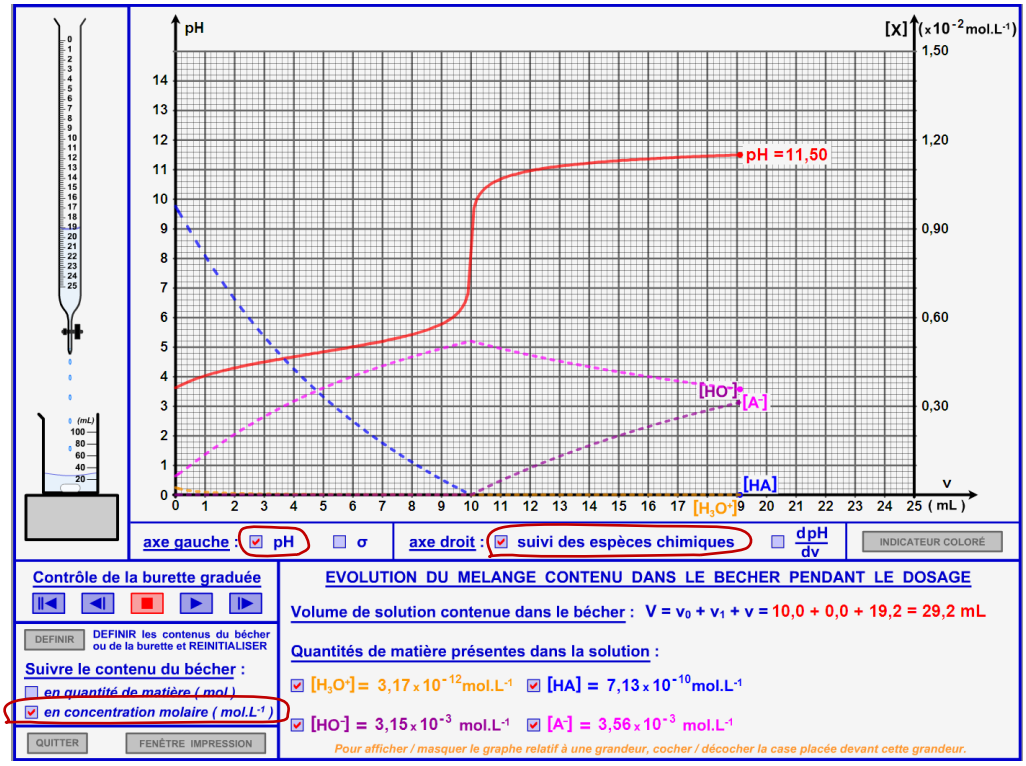
يمكن تحديد نقطة التكافؤ برسم البيان $\frac{dpH}{dV}$، كالتالي:



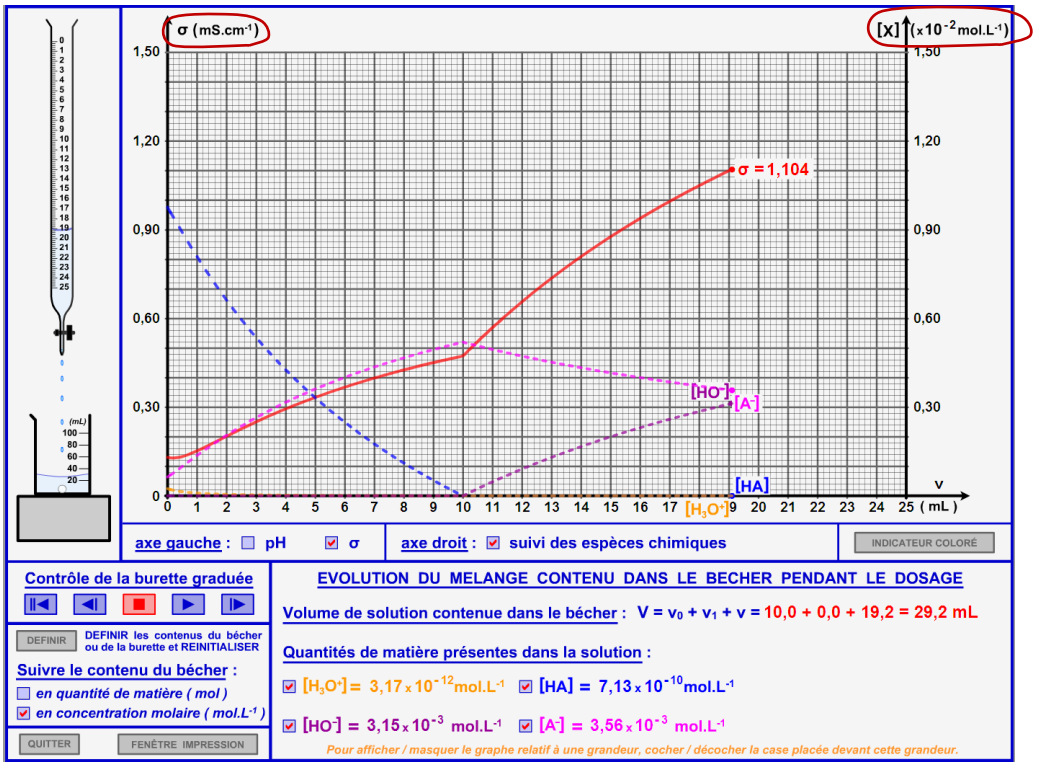
عند المتابعة بقياس الناقلية يظهر لنا البيان التالي:



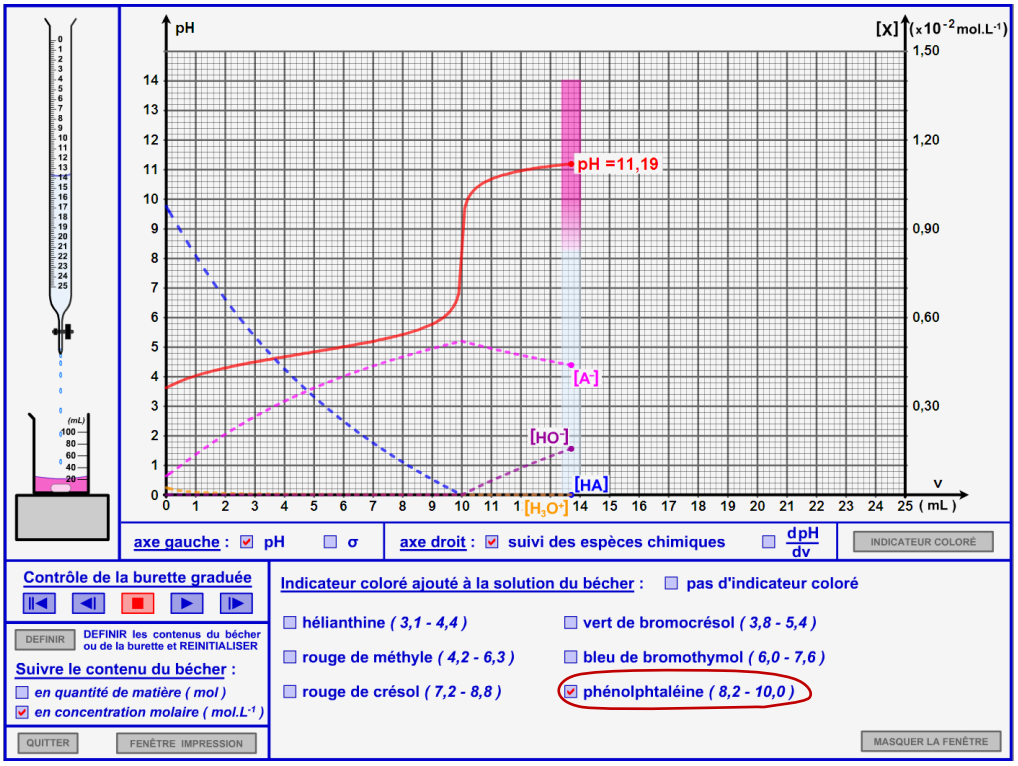
من أجل متابعة تغيرات التراكيز المولية [X] للأفراد الكيميائية الحاضرة في المزيج تماشيا مع تطور pH المزيج، نحصل على:



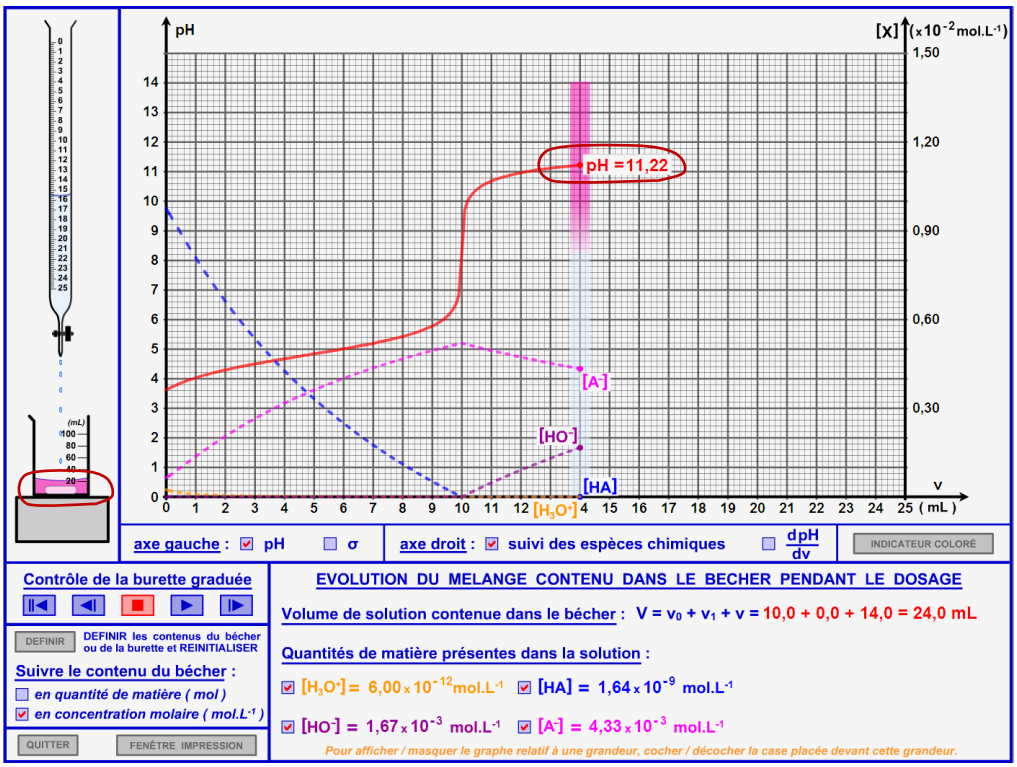
منحني تطور كل من σ و [X] بدلالة الحجم المضاف V من المحلول المعايِّر:



المتابعة باستخدام كاشف ملون مختار بشكل مناسب:

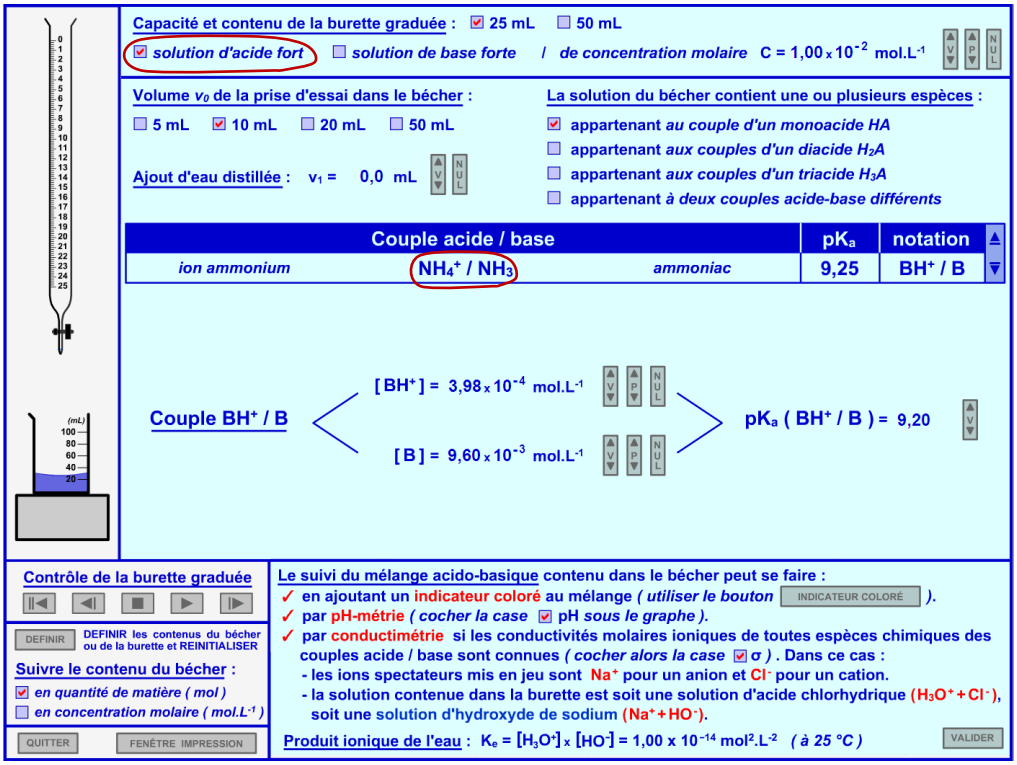


متابعة تغير اللون الذي يأخذه الكاشف على البيان بالتزامن مع اللون الظاهر في كأس البيشر:

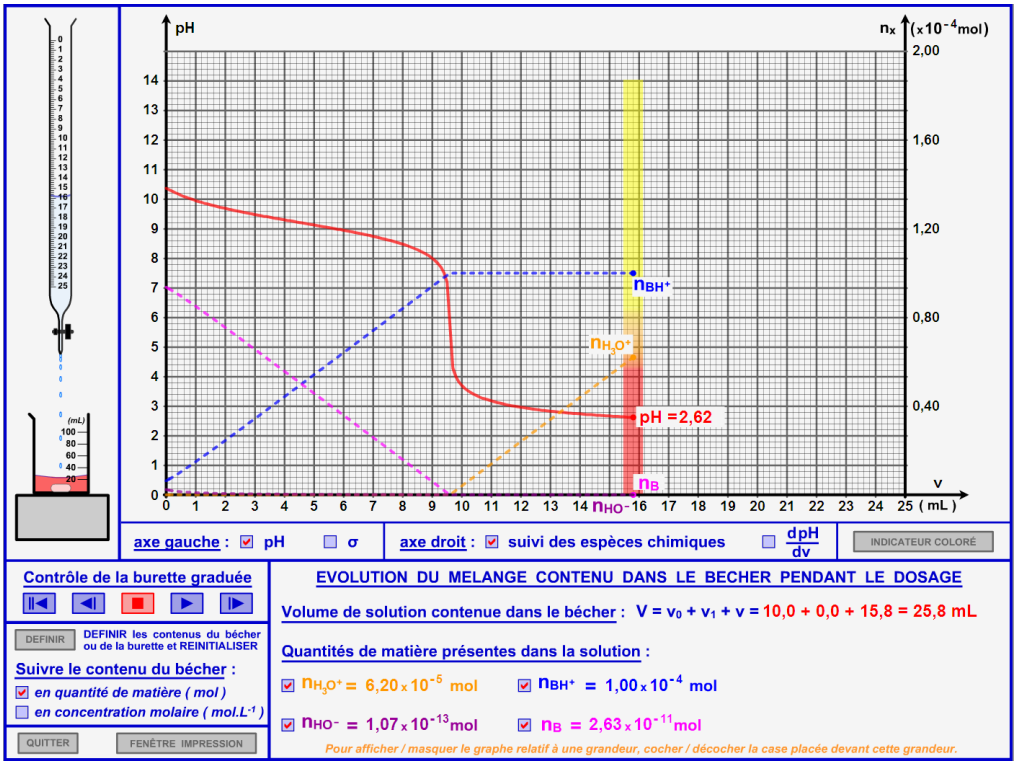


مثال (2) : معايرة أساس ضعيف بحمض قوي

1) التحديد:

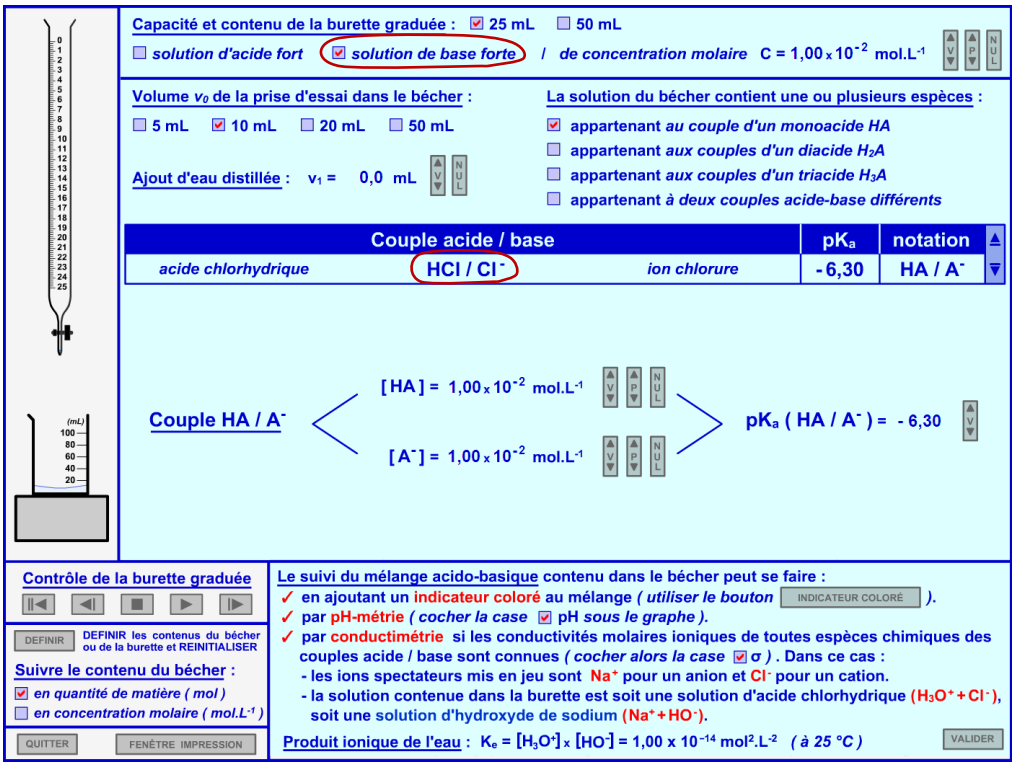


2) التصديق:

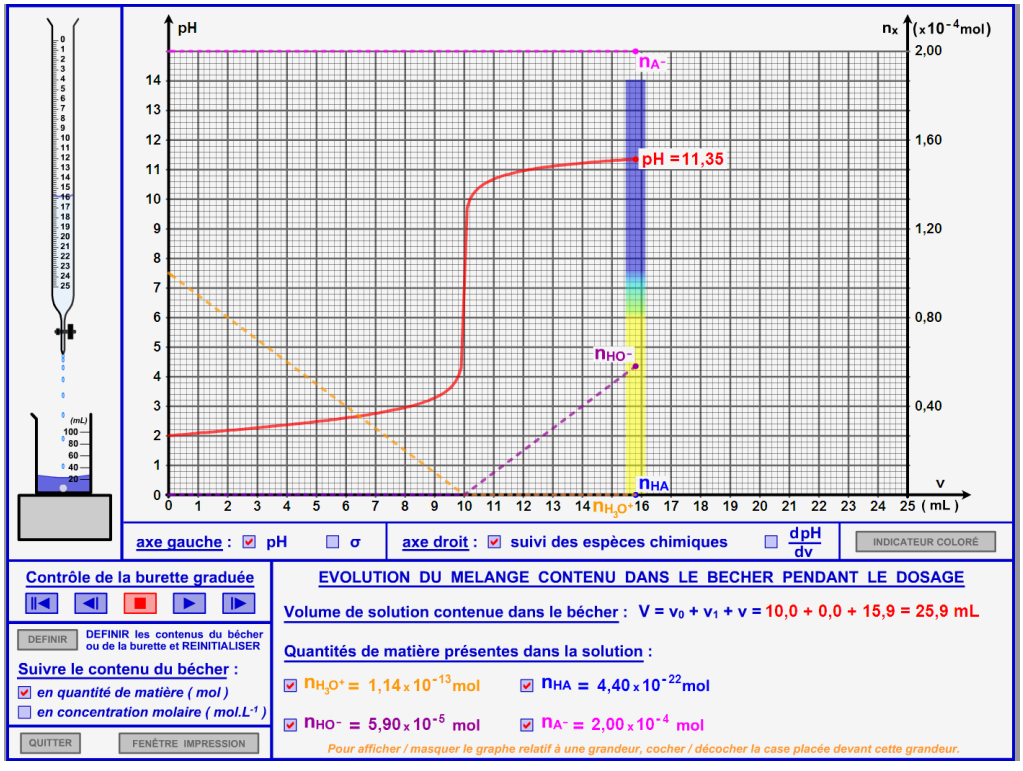


مثال (3) : معايرة حمض قوي بأساس قوي

1) التحديد:



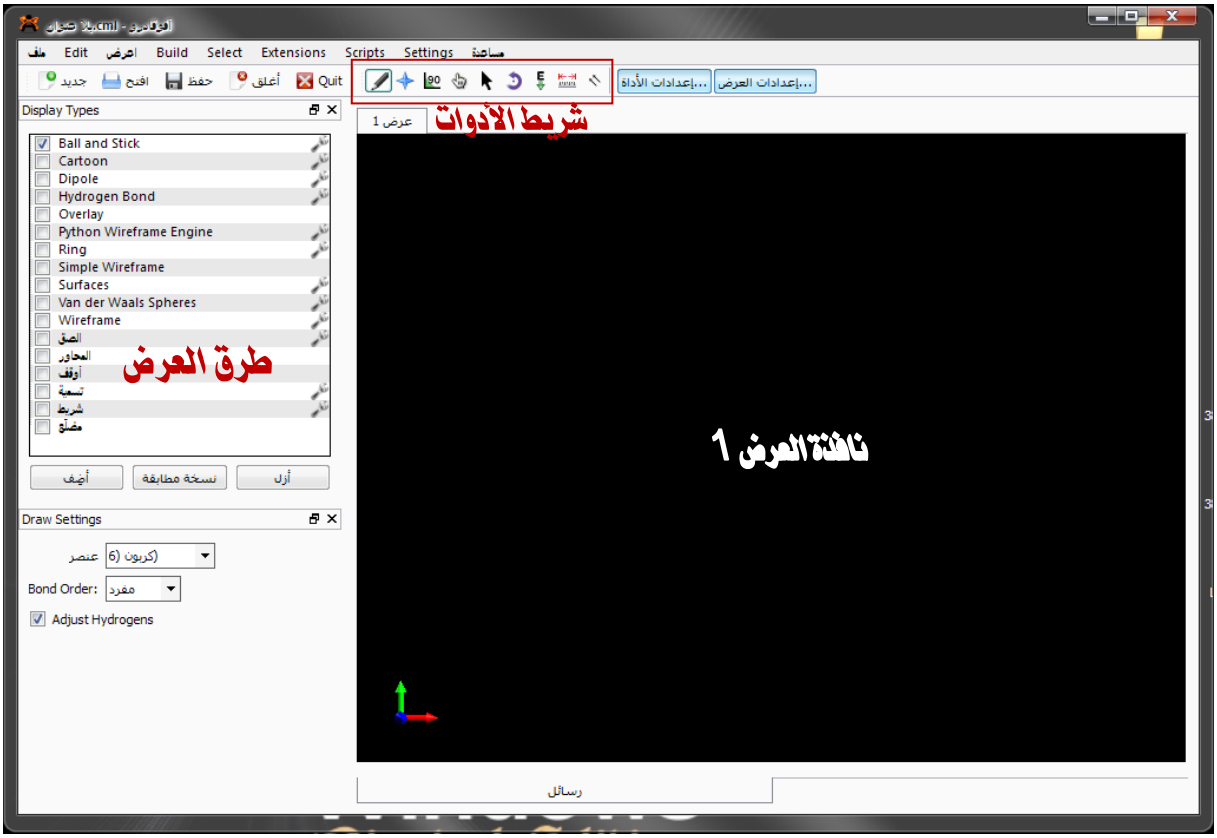
2) التصديق:



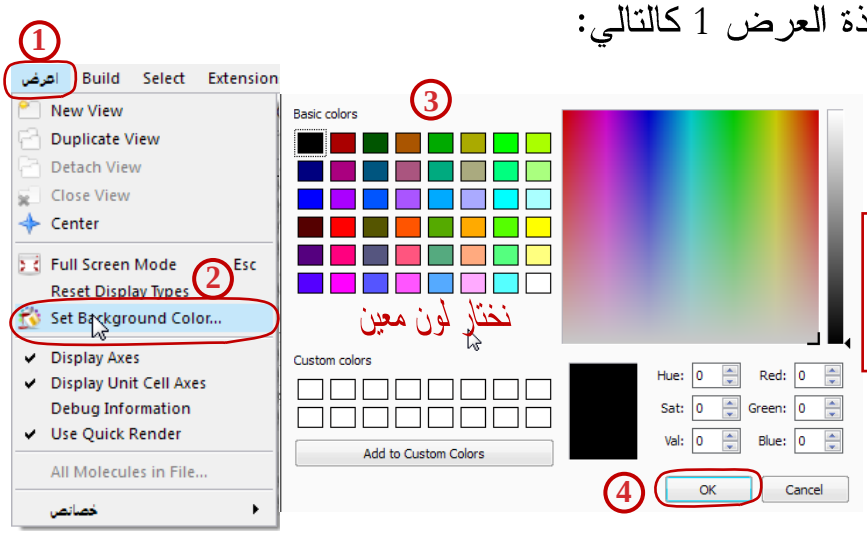
II) البرمجية AVOGADRO:

بعد تثبيت البرمجية على جهاز الكمبيوتر، انقر على رمز الاختصار الموجود على سطح المكتب. تنفتح أول نافذة للبرنامج كالتالي:

ملاحظة: عند تثبيت البرمجية تظهر **لغة واجهة البرنامج** حسب اللغة الافتراضية لنظام التشغيل (Windows) المثبت على جهاز الكمبيوتر (الانجليزية–الفرنسية–العربية ...)

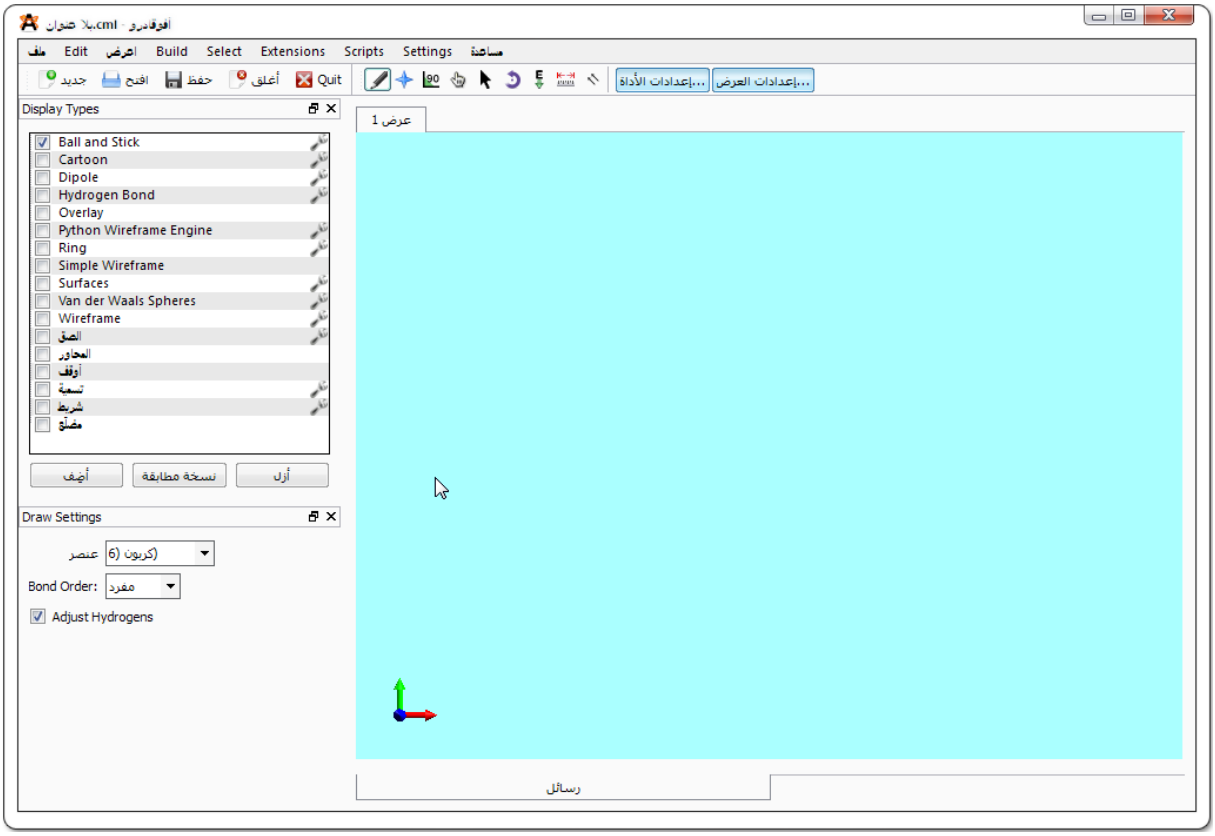


يمكن تغيير لون الخلفية لنافذة العرض 1 كالتالي:

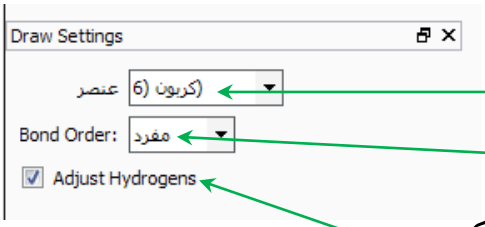


1- انقر على أعرض في شريط القوائم.
2- اختر Set Background color.
3- حدد اللون المرغوب فيه من نافذة الألوان.
4- انقر على OK.

بعد تغيير لون الخلفية، نتحصل مثلا على:



لرسم نموذج جزيء ما انقر على أداة الرسم في شريط الأدوات حيث افتراضيا، تم ضبط خيارات الرسم كما هو موضح أعلاه، على:

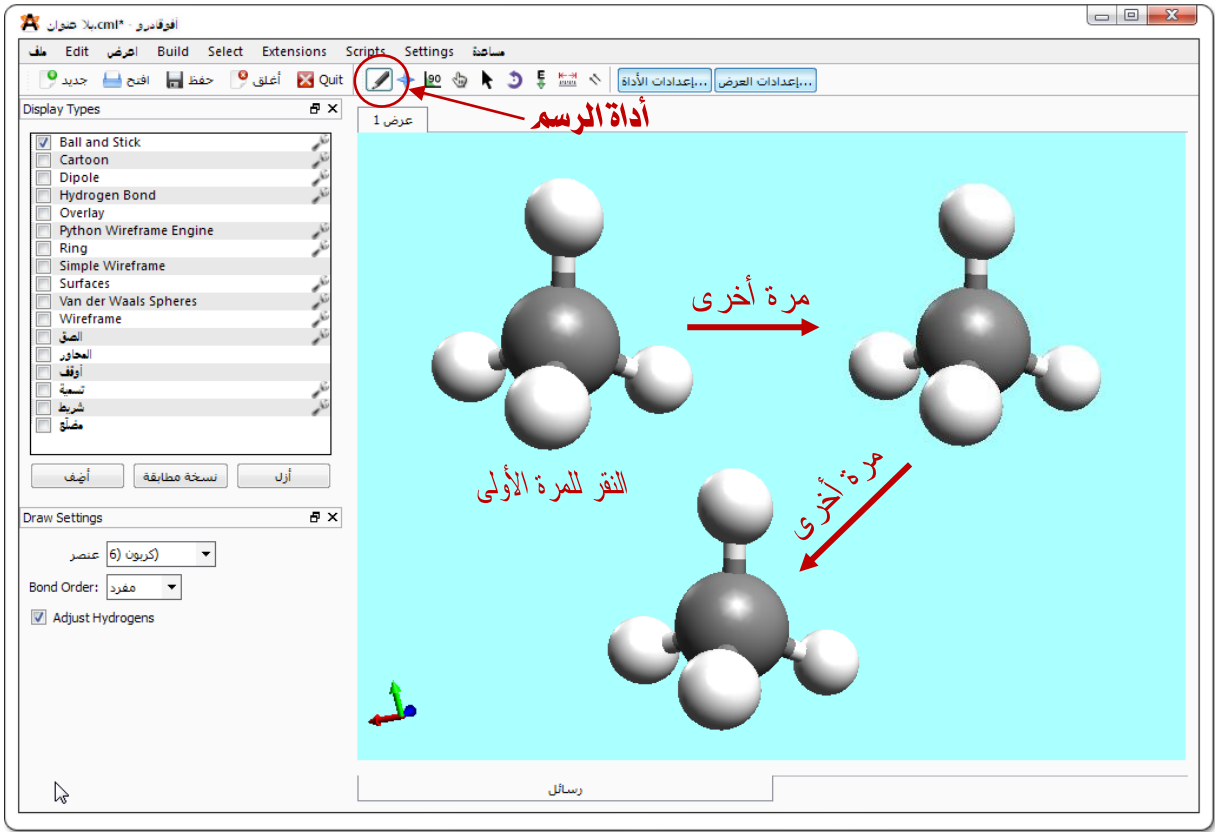


- ✓ عنصر الكربون.
- ✓ الرابطة التكافؤية الأحادية.
- ✓ ضبط تلقائي لذرات الهيدروجين المرتبطة بذرات الكربون.

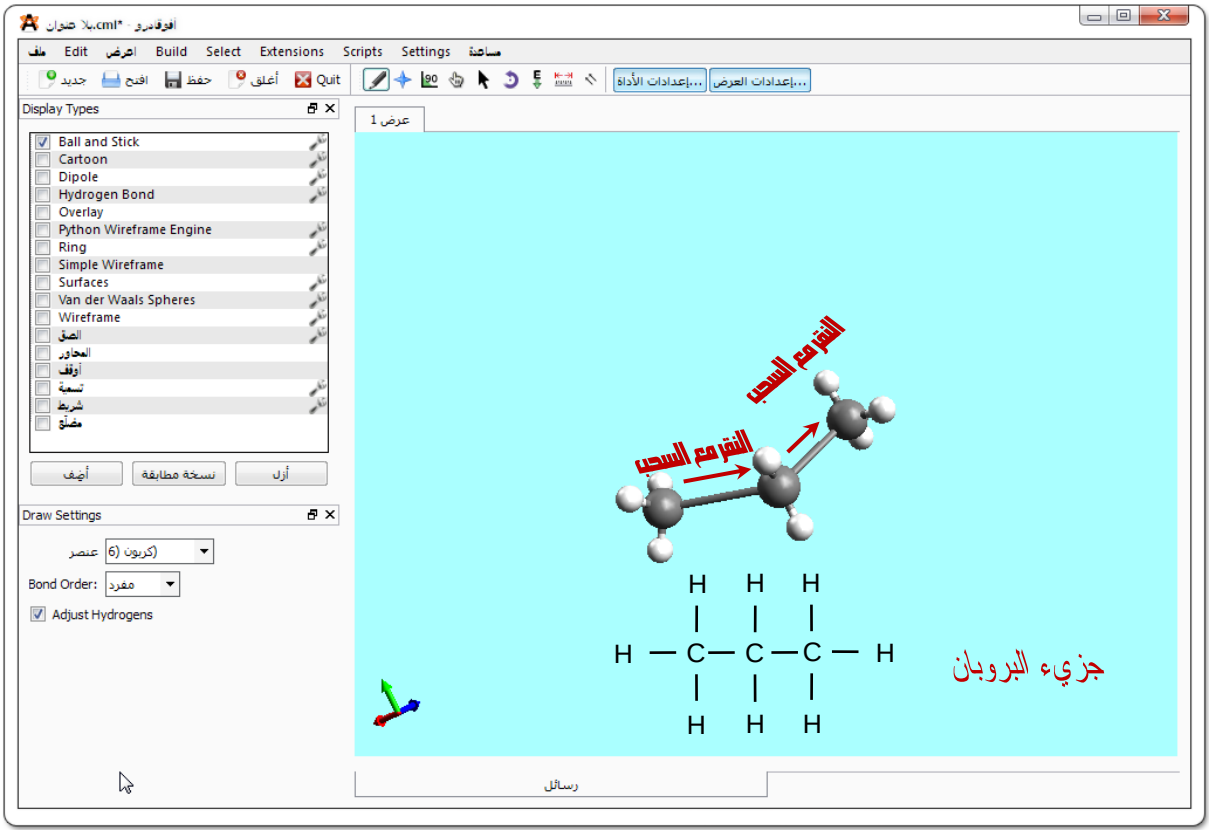
ملاحظة: عند اختيار أداة الرسم (القلم:) يمكن استعمال أزرار الفأرة لعمل ما يلي:

- ✓ **النقر (مرة واحدة) بالزر الأيسر:** لتشكيل جزيء الميثان CH_4 في كل مرة.
- ✓ **النقر بالزر الأوسط (العجلة: للأمام أو الخلف):** لتكبير أو تصغير حجم الجزيء.
- ✓ **النقر بالزر الأيمن (على ذرة الكربون):** للمحو.

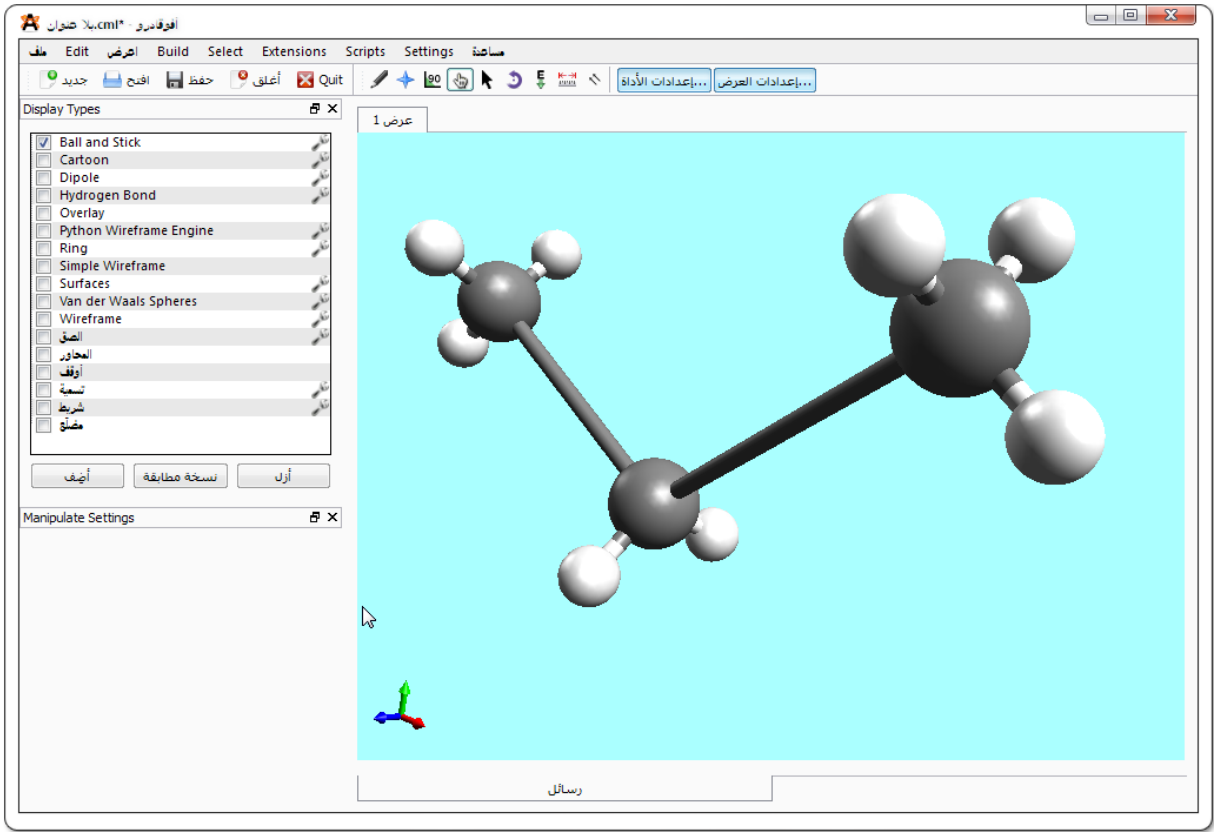
انقر في أي مكان من نافذة العرض 1 بالزر الأيسر للفأرة (مرة واحدة: لتشكيل جزيء CH_4؛ مرتان: لتشكيل جزيئين؛ هكذا...) لاحظ الصورة أدناه



عند النقر بالزر الأيسر للمرة الأولى و نعاود النقر على ذرة الكربون مع السحب كل مرة نزيد من عدد ذرات الكربون في الجزيء بحسب عدد مرات تكرار العملية



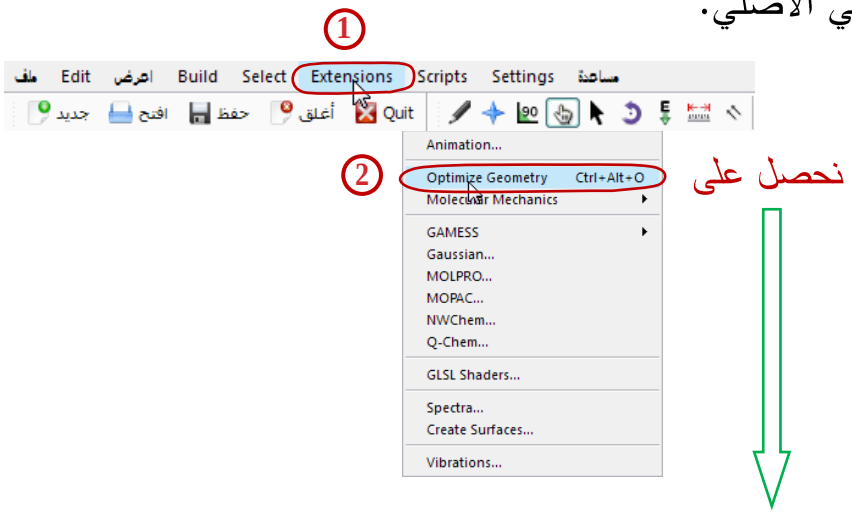
ملاحظة: بعد تشكيل جزيء ما بطريقة السحب كما في السابق، يمكن إعطاء هذا الجزيء أبعاده الحقيقية (التمثيل الهندسي الفراغي الواقعي: احترام الأبعاد النسبية للروابط و كذا قيس الزوايا التكافؤية بين الروابط، ...) كالتالي:

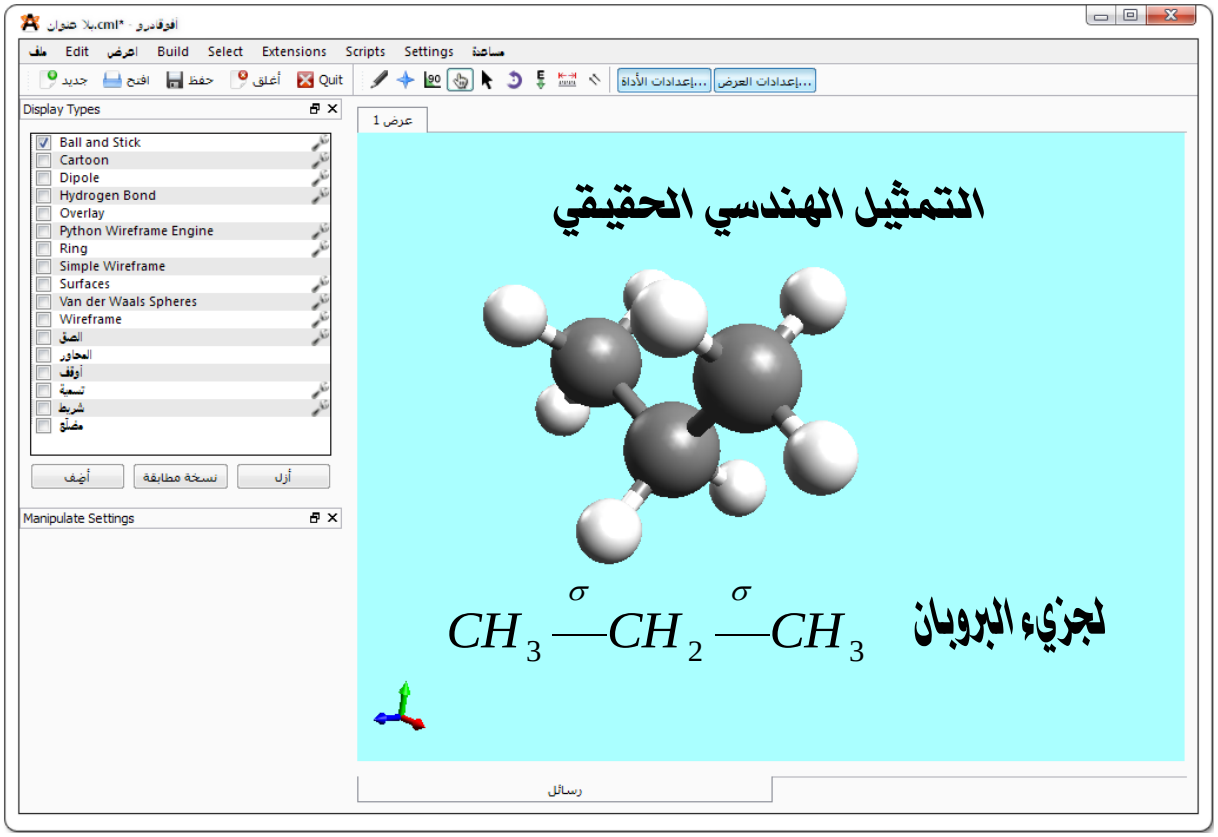


✓ ننقر في شريط القوائم على: Extensions

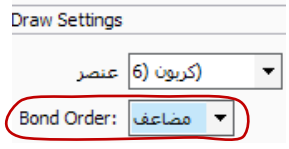
✓ ثم نختار Optimize Geometry

بعد عملية حسابية لمدة قصيرة من الزمن يعيد البرنامج تشكيل ذاتي للجزيء المشّكل وفقا لتمثيله الهندسي الفراغي الأصلي.

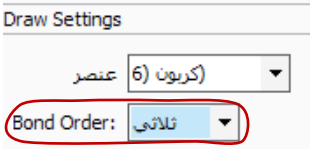




ملاحظة: خيارات البرنامج الافتراضية تمكن من رسم الروابط (كربون– كربون) البسيطة "الأحادية" من النوع σ و لتشكيل رابطة مضاعفة ثنائية (في جزيء ألكن) أو رابطة مضاعفة ثلاثية (في جزيء ألكين) أو روابط مضاعفة بين ذرة كربون و ذرات عناصر أخرى (أكسجين، آزوت، ...) نحدد طبيعة الرابطة من خيارات التشكيل Draw Settings كالتالي:

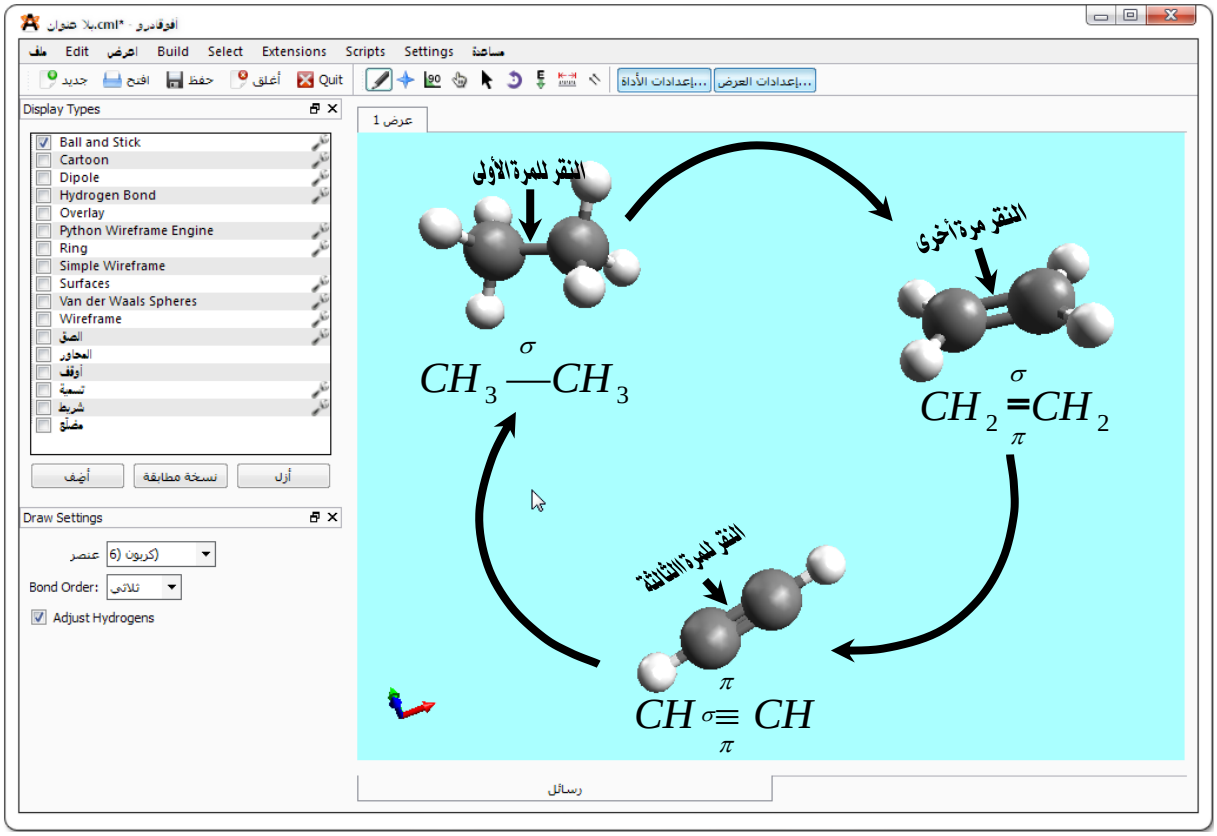


لتشكيل الروابط الثنائية



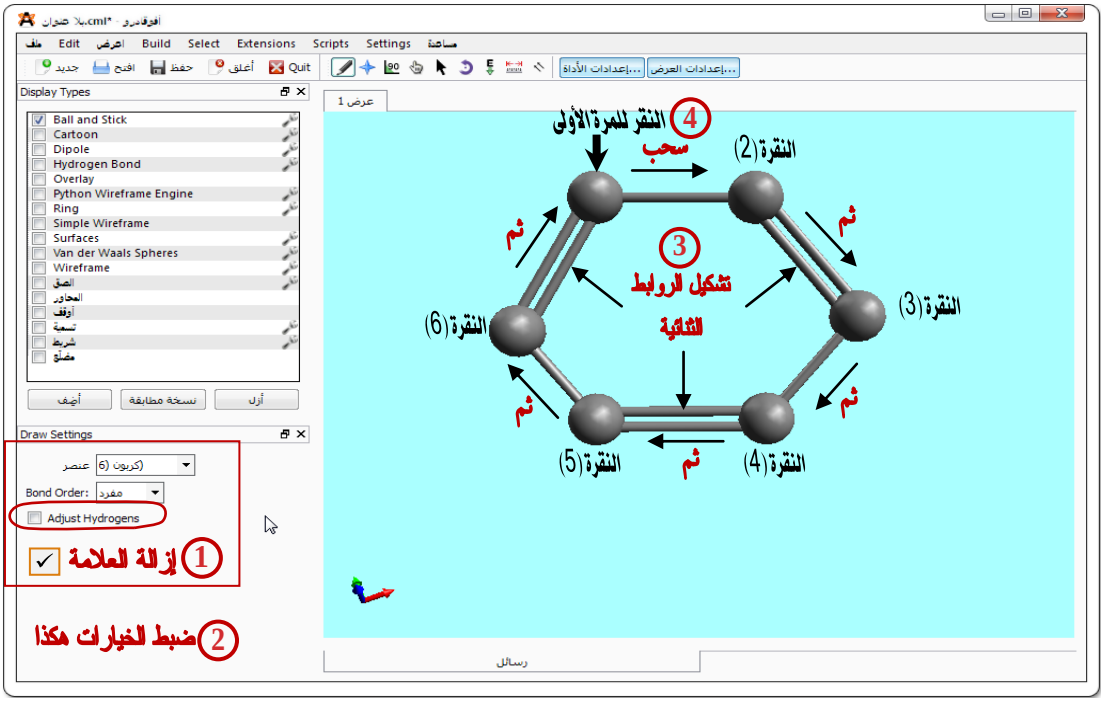
لتشكيل الروابط الثلاثية

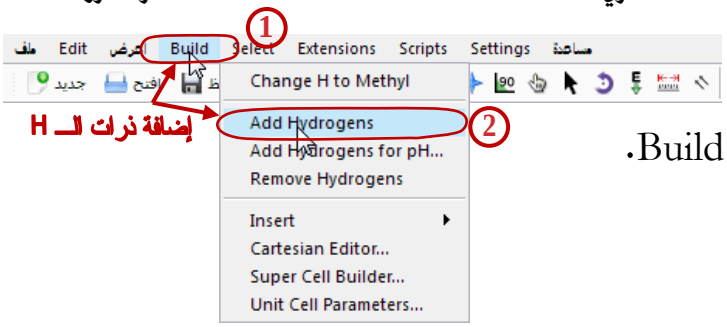
يمكن كذلك مضاعفة الرابطة الأحادية المشكلة في البداية بالنقر عليها للمرة الأولى (تصبح ثنائية) ثم النقر عليها مرة أخرى (تصير ثلاثية) و عند النقر للمرة الثالثة على الرابطة الثلاثية تصبح أحادية من جديد.



لتشكيل جزيء حلقي نتبع الخطوات التالية:

- ✓ قم بإزالة علامة الضبط التلقائي لذرات الهيدروجين.
- ✓ باستعمال أداة الرسم ✎ اضبط خيارات التشكيل كما في الشكل أدناه.
- ✓ انقر ثم اسحب لتحديد عدد ذرات الكربون في حلقة الجزيء بحيث تنطبق آخر ذرة في الحلقة على أول ذرة منها (تشكيل حلقة بنزين + ثلاثة روابط ثنائية بالتناوب).

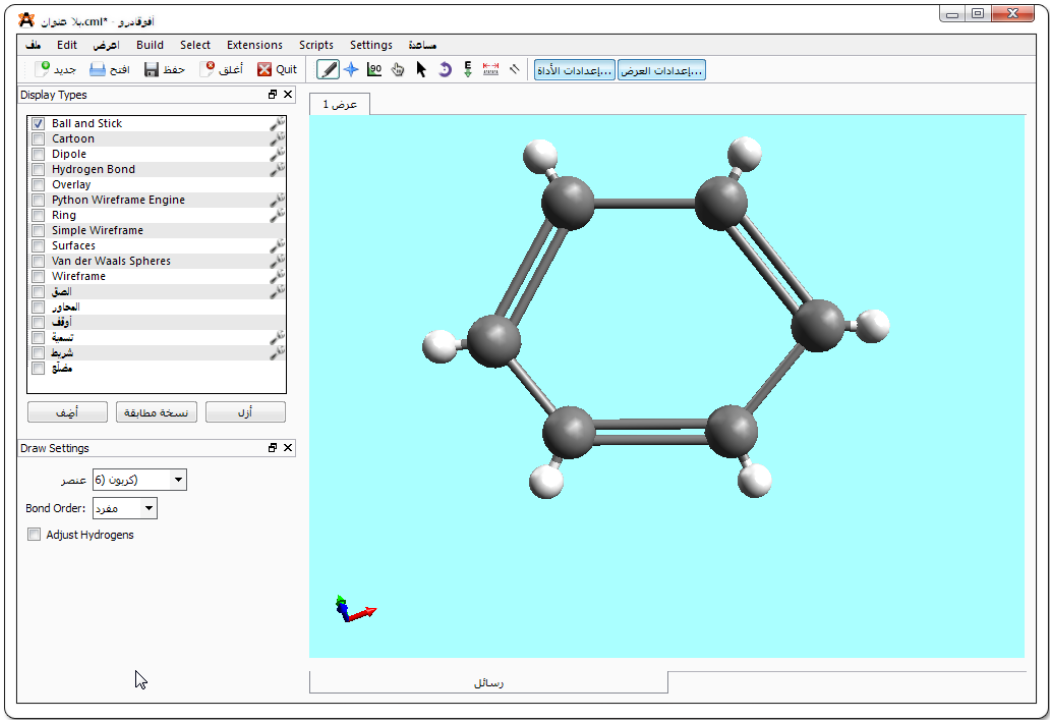




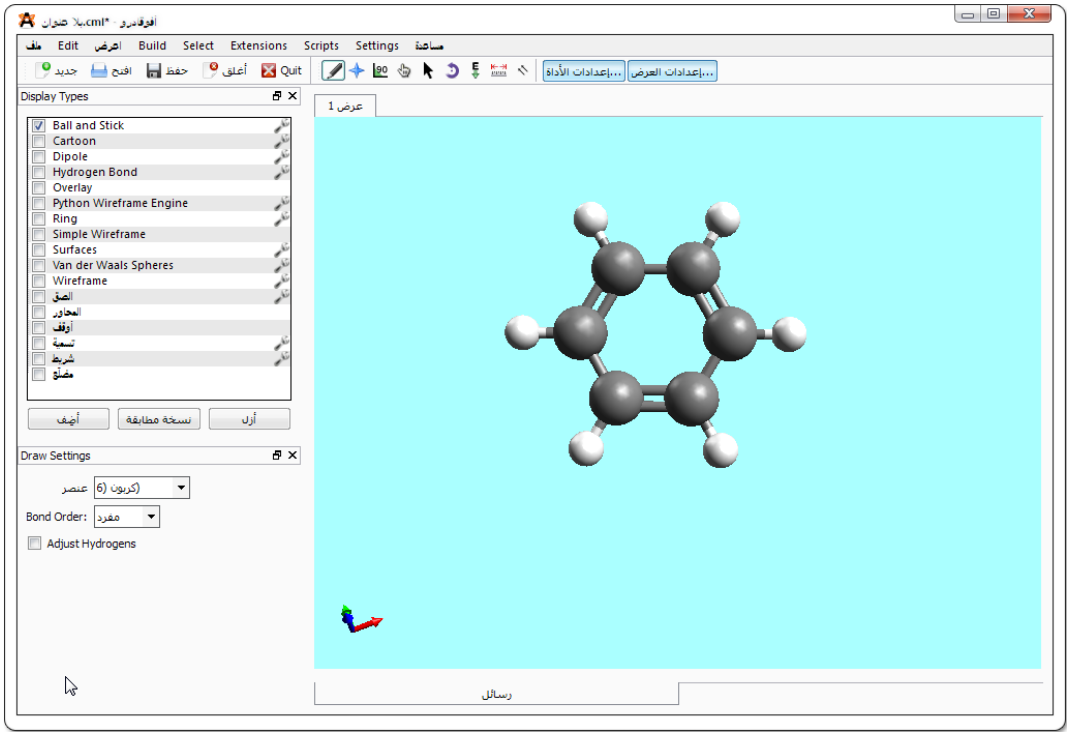
✓ انقر في شريط القوائم على القائمة Build.

✓ اختر الأمر Add Hydrogens.

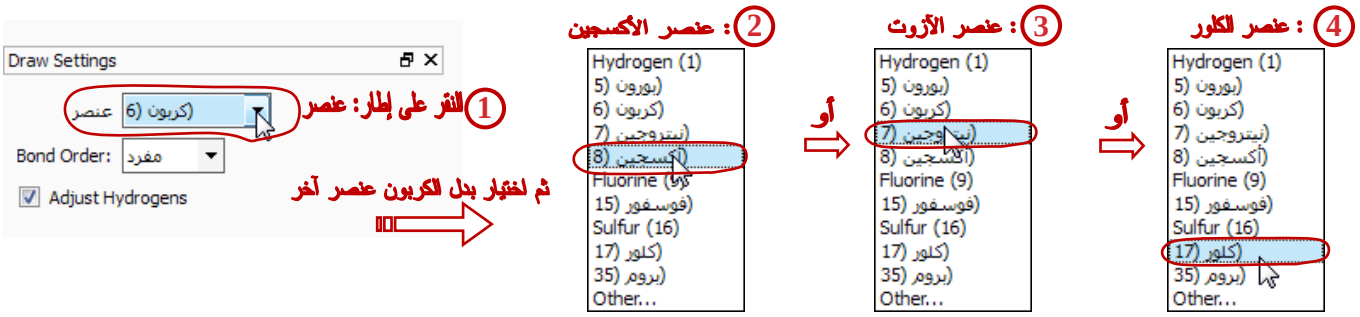
نحصل على:



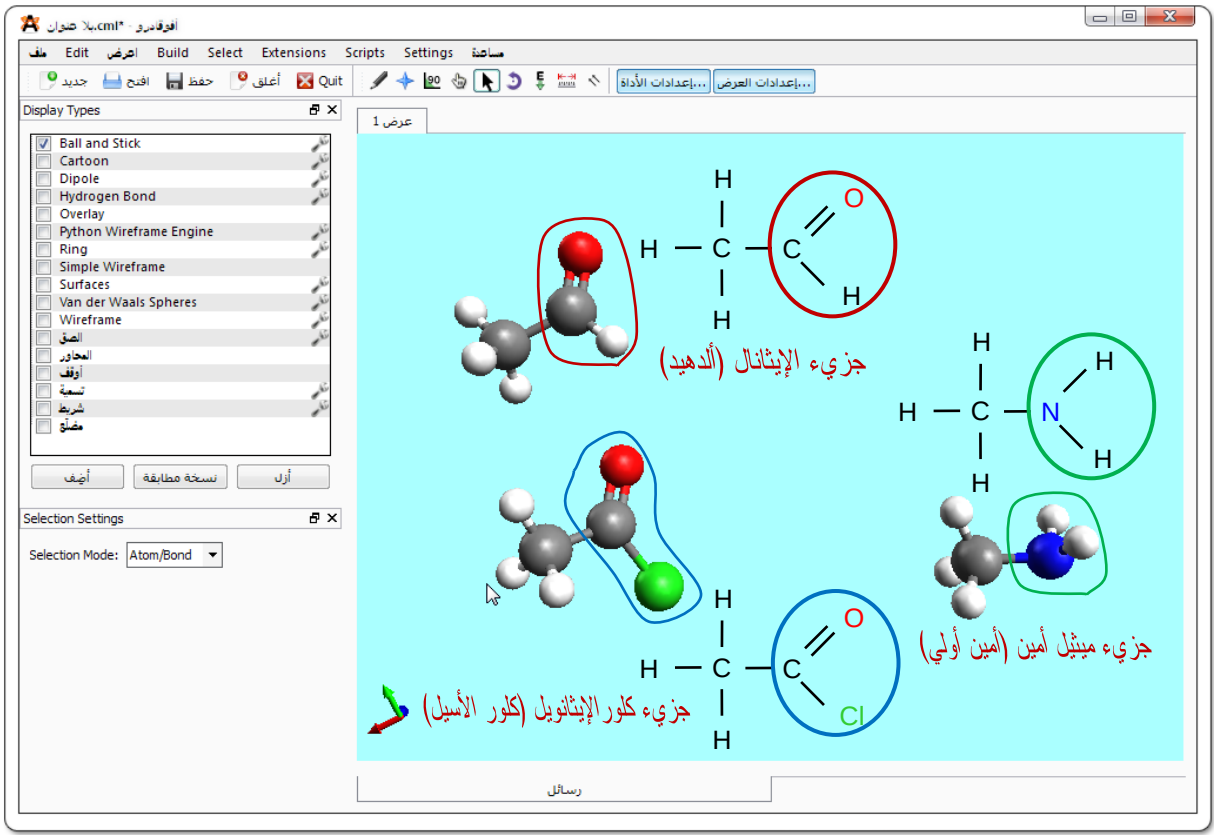
✓ نقوم الآن **بالضبط التلقائي لهندسة الجزيء**، نحصل على:



يمكن إدراج عنصر آخر (لزمرة وظيفية: أكسجين، آزوت، كلور، ... إلخ) كالتالي:

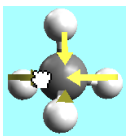


أمثلة: تشكيل جزيئات: الإيثانال CH_3-CHO؛ كلور الإيثانويل CH_3-COCl؛ ميثيل أمين CH_3-NH_2.

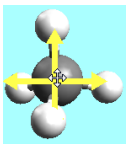


بقية الأدوات:

أداة الإبحار :



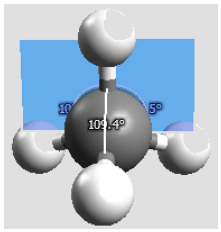
✓ النقر بزر الفأرة الأيسر على مشهد الجزيء: للتدوير في كل الاتجاهات.



✓ النقر بزر الفأرة الأوسط (العجلة): للتكبير أو التصغير.

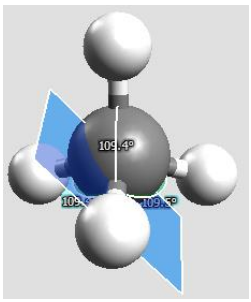
✓ النقر بزر الفأرة الأيمن: لنقل و تحريك الجزيء في كل الاتجاهات.

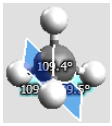
أداة قياس الزوايا التكافؤية بين الروابط و مستوياتها :



✓ النقر بزر الفأرة الأيسر على الرابطة: لتحديد قيس الزاوية بين مستوى الرابطة و مستويات بقية الروابط الأخرى.

✓ النقر بزر الفأرة الأوسط (العجلة): للتكبير أو التصغير.

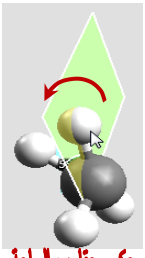




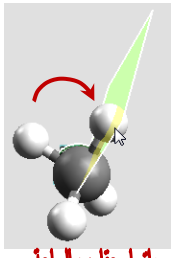
للأمام: تكبير

للخلف: تصغير

✓ النقر بزر الفأرة الأيمن: لتحريك مستوى الرابطة باتجاه معين.



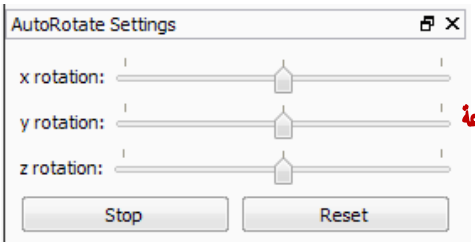
عكس عقارب الساعة



باتجاه عقارب الساعة

أداة التدوير الديناميكي :

✓ النقر بزر الفأرة الأيسر على مشهد الجزيء: للتدوير في كل الاتجاهات آليا حول المحاور في الأبعاد الثلاثة (x , y , z) و بسرعات مختلفة من خلال أزرار التحكم:



✓ النقر بزر الفأرة الأوسط (العجلة): للتكبير أو التصغير.

✓ النقر بزر الفأرة الأيمن: لنقل و تحريك الجزيء في كل الاتجاهات.

أداة قياس الروابط التكافؤية :

✓ النقر بزر الفأرة الأيسر على ثلاث ذرات مختلفة من الجزيء: يعطي قيس طول الرابطة بين الذرتين 1 – 2 و قيس طول الرابطة بين الذرتين 2 – 3.

✓ النقر بزر الفأرة الأيمن: للعودة إلى الصفر.

ملاحظة: يعطى طول الرابطة بوحدة **الأنغستروم**: $1A° = 10^{-10}\ m$