

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
وزارة التربية الوطنية

المفتشية العامة للبيداغوجيا

يوم تكوين لفائدة

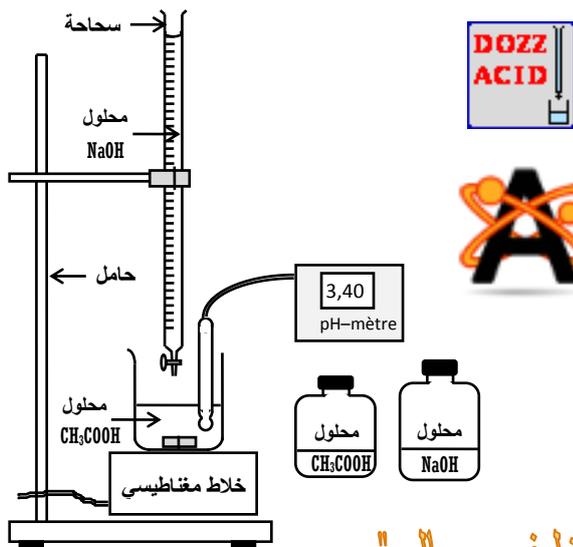
أساتذة العلوم الفيزيائية في التعليم الثانوي

المقاطعة 3 - سطيف -

يوم: 14 مارس 2012

بتانوية: سـراي الضـحوي - قـلال

# الورشة الخاصة بالبرمجيات



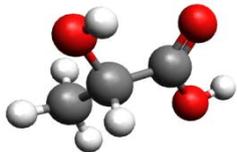
– البرمجية: DOZZACID.

– البرمجية: AVOGADRO.

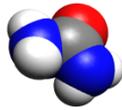
– متفرقات.

من إعداد و إشراف: مفتش التربية الوطنية

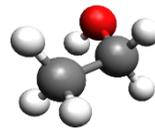
لمادة العلوم الفيزيائية "خليفي صالح"



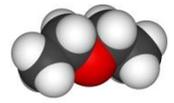
م.ت.و: خليفي صالح



سطيف - المقاطعة 3



المفتشية العامة للبيداغوجيا - العلوم الفيزيائية



# (I) البرمجية DOZZACID :

بعد تثبيت البرمجية على جهاز الكمبيوتر، انقر على رمز الاختصار  الموجود على سطح المكتب. تفتح أول نافذة للبرنامج كالتالي:  
(يستحسن ضبط أبعاد شاشة العرض على القيمة:  $1024 \times 768 \text{ pixels}$ )

## DOZZACID

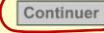
**DOZZACID** est une application développée sous *FLASH 8*, optimisée pour une résolution d'écran  $1024 \times 768 \text{ pixels}$  dont l'interface se pilote entièrement à l'aide de la souris.

**DOZZACID** est un logiciel de simulation qui permet de suivre l'évolution de la composition ( en quantité de matière ou en concentration ) d'un mélange acido-basique lorsqu'on lui ajoute une solution aqueuse d'acide fort ou de base forte.

- ✓ Le mélange initial peut contenir une ou plusieurs espèces chimiques appartenant :
  - ✦ au couple d'un monoacide
  - ✦ aux couples d'un diacide
  - ✦ aux couples d'un triacide
  - ✦ à deux couples acide / base différents

( les couples peuvent être définis à partir de leur  $pK_a$  ou bien choisis dans une base de données )

- ✓ L'évolution du mélange peut faire l'objet simultanément :
  - ✦ d'un suivi pH-métrique ( possibilité de suivre l'évolution de la dérivée du pH )
  - ✦ d'un suivi colorimétrique ( choix entre 6 indicateurs colorés )
  - ✦ d'un suivi conductimétrique ( si les conductivités molaires ioniques sont connues )

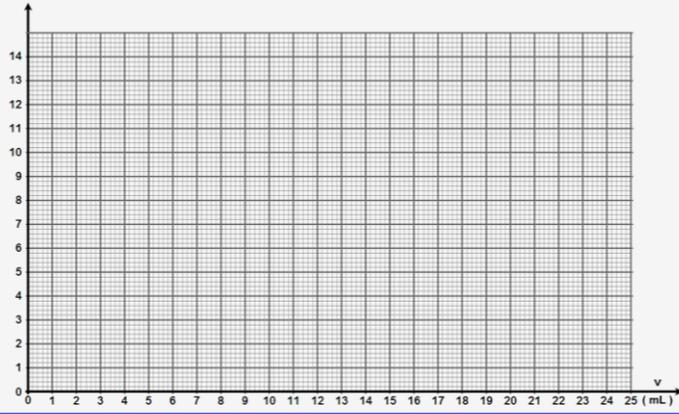
نضغط على 

DOZZACID : version 1.0 ( octobre 2008 )  
Auteur : Jean-Marc CHAPAUX  
Lycée Julien Wittmer  
71120 - CHAROLLES

*Une erreur à me signaler, une modification à me proposer, une question à me poser ou simplement un message d'encouragement à me faire parvenir.  
Envoyer vos mails à : chapaux@ac-dijon.fr*

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





**Contrôle de la burette graduée**

نضغط على 

**Suivre le contenu du bēcher :**

en quantité de matière ( mol )

en concentration molaire ( mol.L<sup>-1</sup> )

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

✓ بدلالة: كميات المادة ( $mol$ ).

أو:

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

فتظهر النافذة التالية:

Capacité et contenu de la burette graduée :  25 mL  50 mL

solution d'acide fort  solution de base forte / de concentration molaire  $C = 0,00$

Volume  $v_0$  de la prise d'essai dans le bécher :  5 mL  10 mL  20 mL  50 mL

Ajust d'eau distillée :  $v_1 = 0,0$  mL

La solution du bécher contient une ou plusieurs espèces :

- appartenant au couple d'un monoacide HA
- appartenant aux couples d'un diacide  $H_2A$
- appartenant aux couples d'un triacide  $H_3A$
- appartenant à deux couples acide-base différents

Couple acide / base	$pK_a$	notation
choisir un couple acide / base dans la liste déroulante ou définir le $pK_a$ du couple	?	HA / A <sup>-</sup>

Couple HA / A<sup>-</sup> < [HA] = 0,00 > < [A<sup>-</sup>] = 0,00 > >  $pK_a (HA / A^-) = 7,00$

Contrôle de la burette graduée

Le suivi du mélange acido-basique contenu dans le bécher peut se faire :

- en ajoutant un indicateur coloré au mélange (utiliser le bouton INDICATEUR COLORE).
- par pH-métrie (cocher la case  pH sous le graphe).
- par conductimétrie si les conductivités molaires ioniques de toutes espèces chimiques des couples acide / base sont connues (cocher alors la case   $\sigma$ ). Dans ce cas :
  - les ions spectateurs mis en jeu sont Na<sup>+</sup> pour un anion et Cl<sup>-</sup> pour un cation.
  - la solution contenue dans la burette est soit une solution d'acide chlorhydrique ( $H_3O^+ + Cl^-$ ), soit une solution d'hydroxyde de sodium ( $Na^+ + HO^-$ ).

Produit ionique de l'eau :  $K_e = [H_3O^+] \times [HO^-] = 1,00 \times 10^{-14} mol^2.L^{-2}$  (à 25 °C)

Suivre le contenu du bécher :

- en quantité de matière ( $mol$ )
- en concentration molaire ( $mol.L^{-1}$ )

في هذه النافذة يتم إتباع الخطوات التالية:

1- سعة و محتوى السحاحة المدرجة (المحلول المعايير):

نختار إما:

✓ محلول حمض قوي و تركيزه المولي:  $C = 0,00 \times 10^{-0,0} mol.L^{-1}$

(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).

ملاحظة: الرمز:  لتغيير قيمة التركيز  $C = 0,00$  بالزيادة  أو بالنقصان .

الرمز:  لتغيير قيمة الأس السالب للعدد  $10^{-0,0}$  بالزيادة  أو بالنقصان .

الرمز:    للعودة إلى القيمة 0,00 للتركيز C.

2- الحجم ( $V_0$ ) المأخوذ في كأس البيشر من المحلول المعايير:✓ نختار قيمة لـ  $V_0$  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 المحلولالمعايير في هذه الحالة:  $V_{titre} = V_0 + V_1$  (مع الأخذ في الحسبان قيمة حجم المزيجالنهائي  $V_{totale} = V_0 + V_1 + V_{ajouté}$  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 المحلولالمراد معايرته و ذلك بالنقر على الزر  أمام رمز الثنائية  $HA/A^-$  (لأعلى ▲أو لأسفل ▼) فتظهر قيم مختلفة للثابت  $pK_a$  مرفقة ألياً 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 <sup>-</sup>  

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

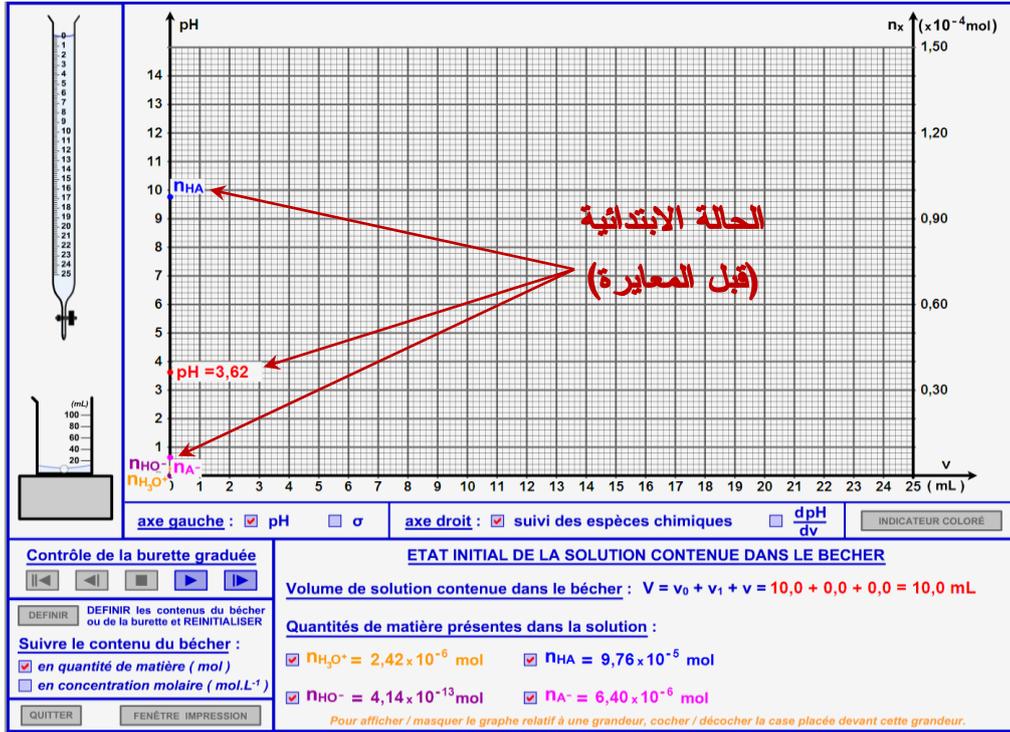
$$[HA] = 0.00 \times 10^{-0.0} \text{ mol.L}^{-1} \quad \begin{matrix} \uparrow \\ \downarrow \end{matrix} \begin{matrix} \uparrow \\ \downarrow \end{matrix} \begin{matrix} \text{NUL} \\ \text{P} \\ \text{L} \end{matrix}$$

$$[A^-] = 0.00 \times 10^{-0.0} \text{ mol.L}^{-1} \quad \begin{matrix} \uparrow \\ \downarrow \end{matrix} \begin{matrix} \uparrow \\ \downarrow \end{matrix} \begin{matrix} \text{NUL} \\ \text{P} \\ \text{L} \end{matrix}$$

Couple HA / A<sup>-</sup> <  $[HA] = 0,00$     >  $pK_a (HA / A^-) = 7,00$

<  $[A^-] = 0,00$     >





نباشر عملية المتابعة بالنقر على أحد الأزرار:



العودة إلى بداية المتابعة

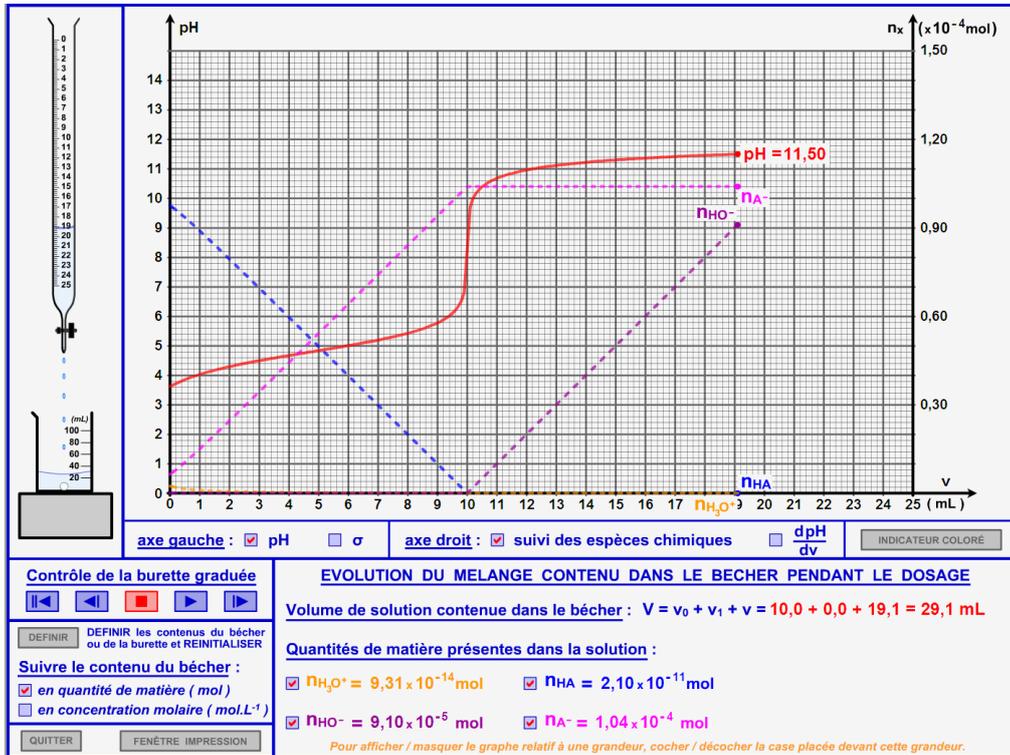
العودة إلى الخلف خطوة خطوة

إيقاف المتابعة

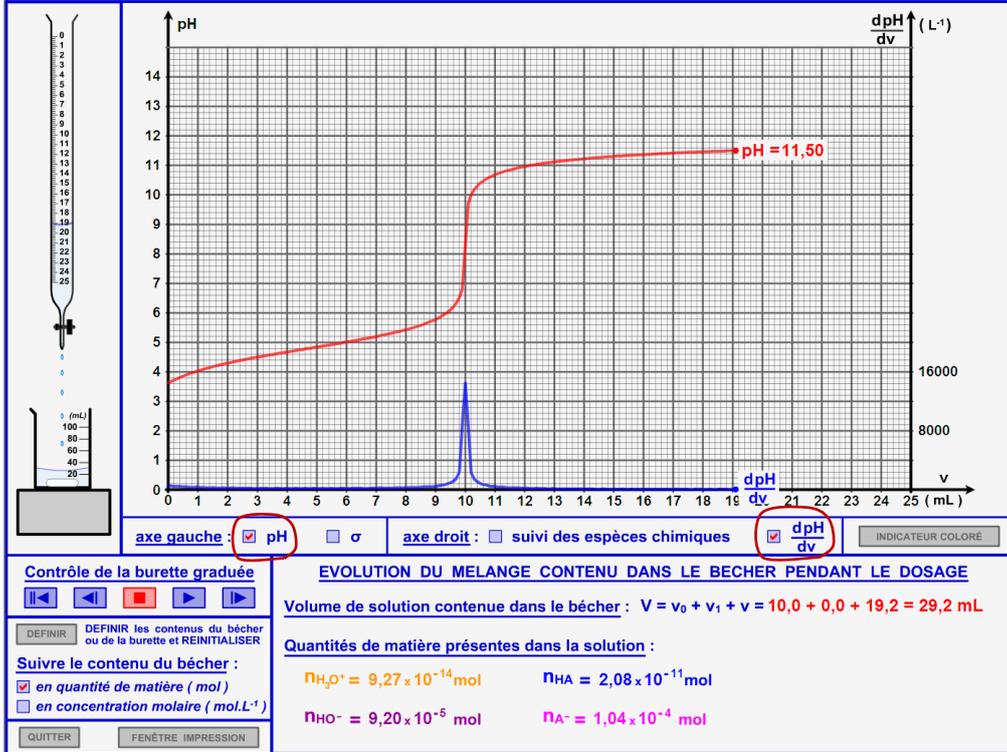
المتابعة المستمرة

المتابعة خطوة خطوة

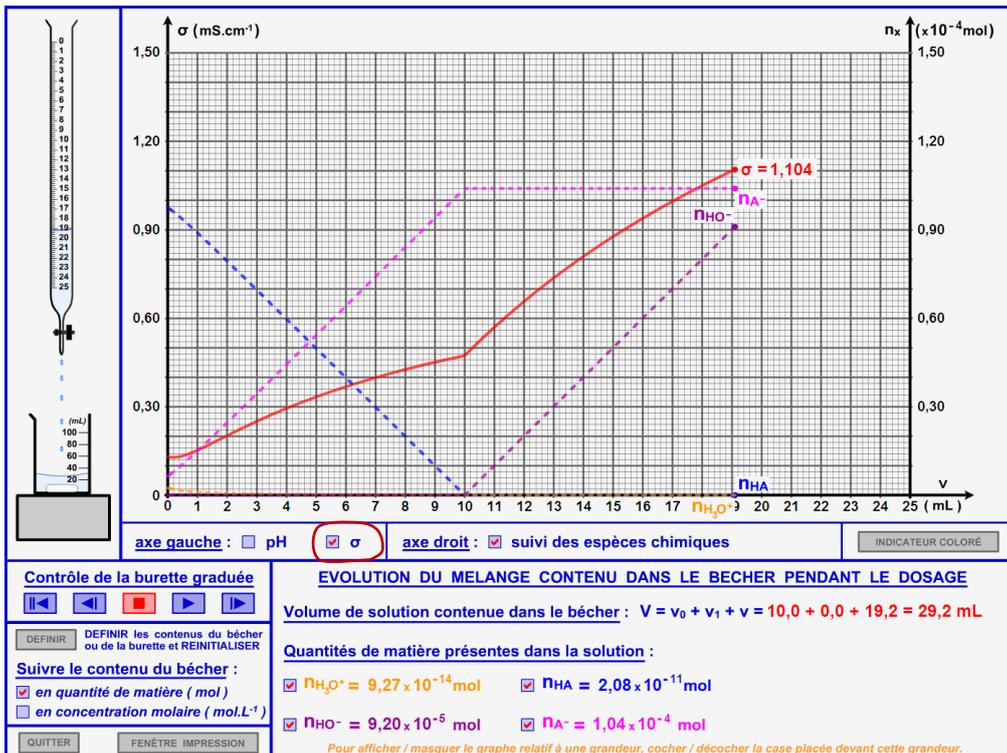
مثلا عند المتابعة المستمرة بالنقر على الزر نحصل على البيان:



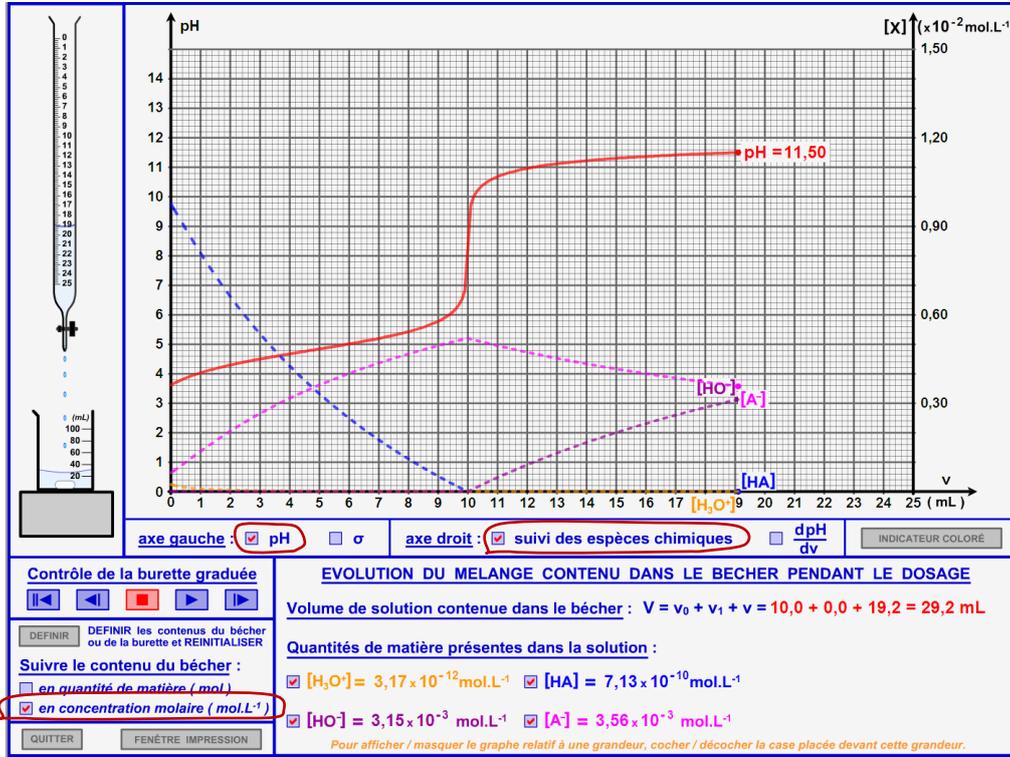
يمكن تحديد نقطة التكافؤ برسم البيان  $\frac{dpH}{dV}$  ، كالتالي:



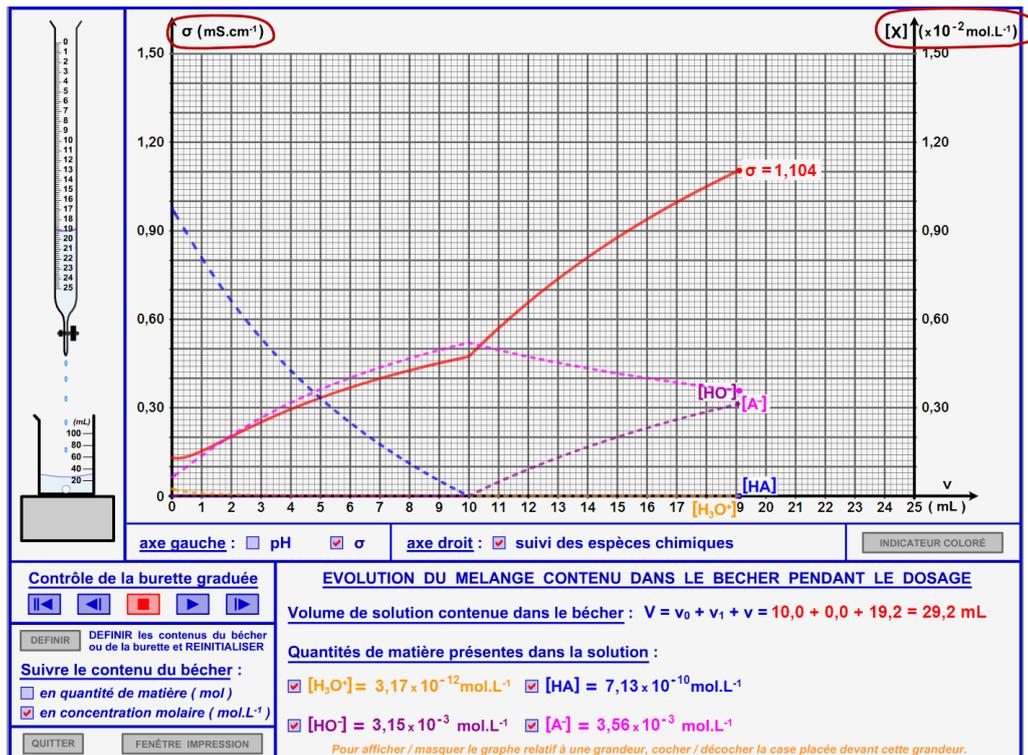
عند المتابعة بقياس الناقلية يظهر لنا البيان التالي:



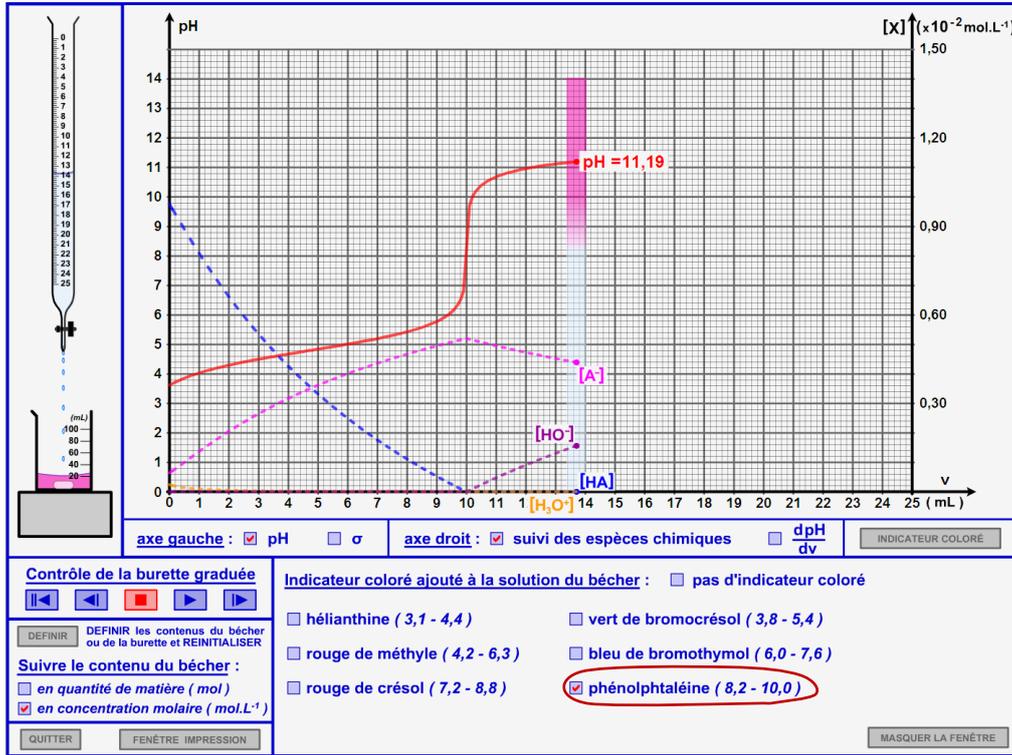
من أجل متابعة تغيرات التراكيز المولية  $[X]$  للأفراد الكيميائية الحاضرة في المزيج تماشياً مع تطور pH المزيج، نحصل على:



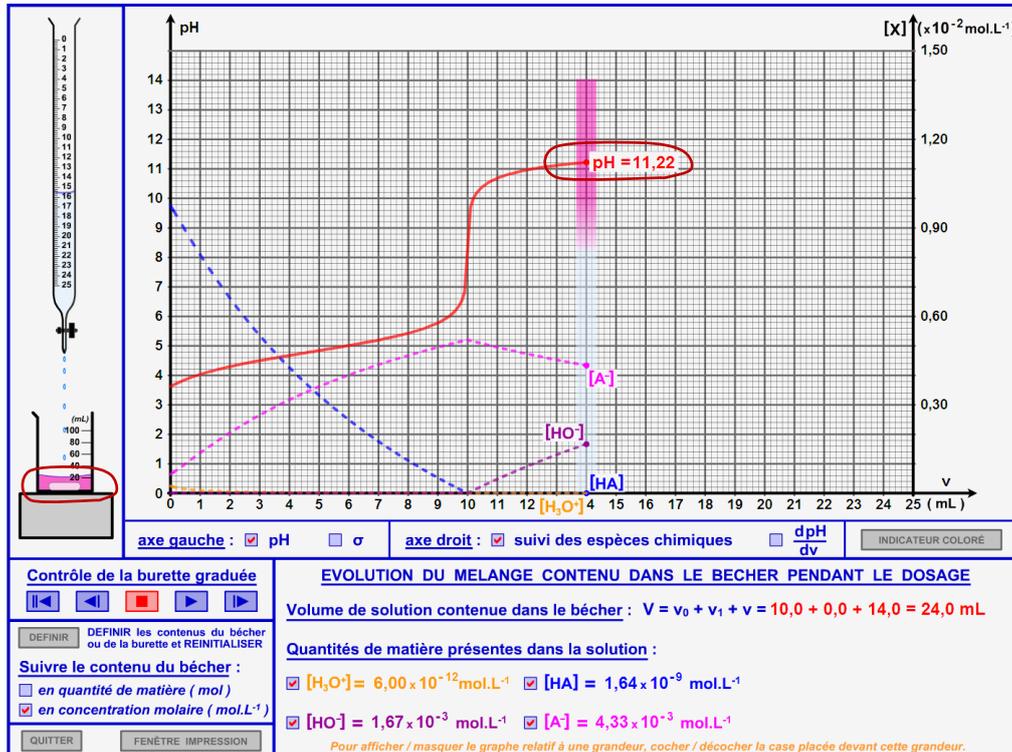
منحني تطور كل من  $\sigma$  و  $[X]$  بدلالة الحجم المضاف  $V$  من المحلول المعايير:



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:

Capacité et contenu de la burette graduée :  25 mL  50 mL

solution d'acide fort  solution de base forte / de concentration molaire  $C = 1,00 \times 10^{-2} \text{ mol.L}^{-1}$

Volumétrie de la prise d'essai dans le bécher :  5 mL  10 mL  20 mL  50 mL

Ajustement d'eau distillée :  $v_1 = 0,0 \text{ mL}$

La solution du bécher contient une ou plusieurs espèces :

- appartenant au couple d'un monoacide HA
- appartenant aux couples d'un diacide  $H_2A$
- appartenant aux couples d'un triacide  $H_3A$
- appartenant à deux couples acide-base différents

Couple acide / base		pKa	notation
ion ammonium	<b><math>NH_4^+ / NH_3</math></b>	9,25	$BH^+ / B$

Couple  $BH^+ / B$   $\left\langle \begin{array}{l} [BH^+] = 3,98 \times 10^{-4} \text{ mol.L}^{-1} \\ [B] = 9,60 \times 10^{-3} \text{ mol.L}^{-1} \end{array} \right. pK_a (BH^+ / B) = 9,20$

Contrôle de la burette graduée

DEFINIR les contenus du bécher ou de la burette et REINITIALISER

Suivre le contenu du bécher :

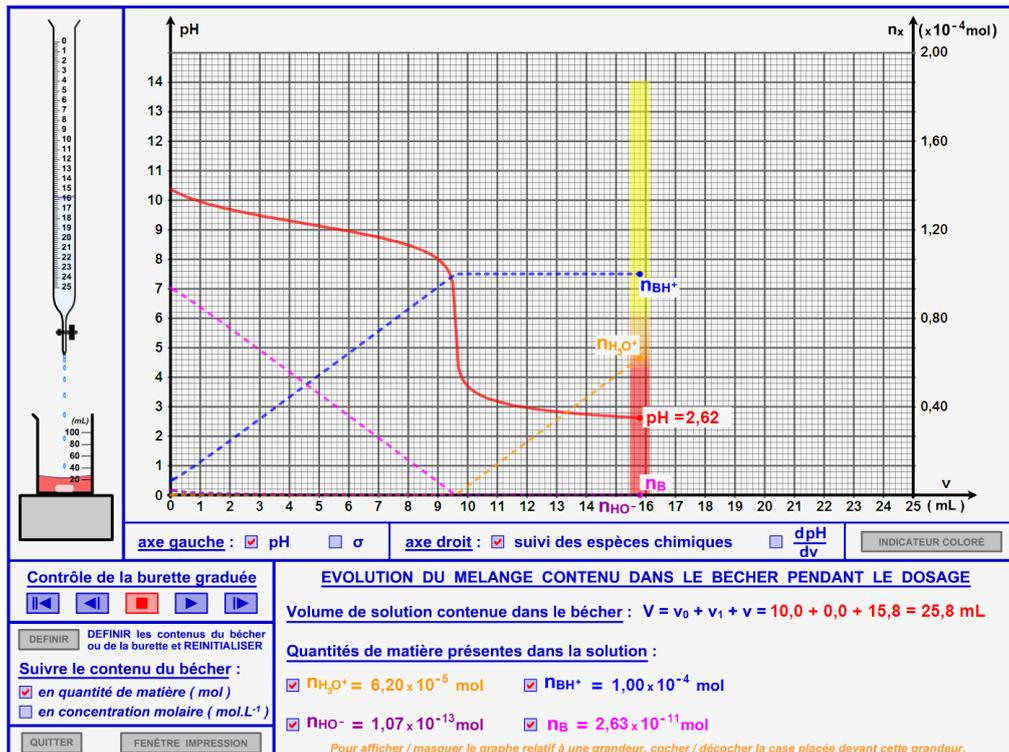
- en quantité de matière (mol)
- en concentration molaire ( $\text{mol.L}^{-1}$ )

Le suivi du mélange acido-basique contenu dans le bécher peut se faire :

- ✓ en ajoutant un indicateur coloré au mélange (utiliser le bouton INDICATEUR COLORE).
- ✓ par pH-métrie (cocher la case  pH sous le graphe).
- ✓ par conductimétrie si les conductivités molaires ioniques de toutes espèces chimiques des couples acide / base sont connues (cocher alors la case   $\sigma$ ). Dans ce cas :
  - les ions spectateurs mis en jeu sont  $Na^+$  pour un anion et  $Cl^-$  pour un cation.
  - la solution contenue dans la burette est soit une solution d'acide chlorhydrique ( $H_3O^+ + Cl^-$ ), soit une solution d'hydroxyde de sodium ( $Na^+ + HO^-$ ).

Produit ionique de l'eau :  $K_e = [H_3O^+] \times [HO^-] = 1,00 \times 10^{-14} \text{ mol}^2.L^{-2}$  (à 25 °C)

### (2) التصديق:



## مثال ③ : معايرة حمض قوي بأساس قوي

### (1) التحديد:

Capacité et contenu de la burette graduée :  25 mL  50 mL

solution d'acide fort  solution de base forte / de concentration molaire  $C = 1,00 \times 10^{-2} \text{ mol.L}^{-1}$

Volume  $v_0$  de la prise d'essai dans le bécher :  5 mL  10 mL  20 mL  50 mL

Ajust d'eau distillée :  $v_1 = 0,0 \text{ mL}$

La solution du bécher contient une ou plusieurs espèces :

- appartenant au couple d'un monoacide HA
- appartenant aux couples d'un diacide  $H_2A$
- appartenant aux couples d'un triacide  $H_3A$
- appartenant à deux couples acide-base différents

Couple acide / base		$pK_a$	notation
acide chlorhydrique	<b>HCl / Cl<sup>-</sup></b>	-6,30	HA / A <sup>-</sup>

Couple HA / A<sup>-</sup>  $\left\langle \begin{array}{l} [HA] = 1,00 \times 10^{-2} \text{ mol.L}^{-1} \\ [A^-] = 1,00 \times 10^{-2} \text{ mol.L}^{-1} \end{array} \right. pK_a (HA / A^-) = -6,30$

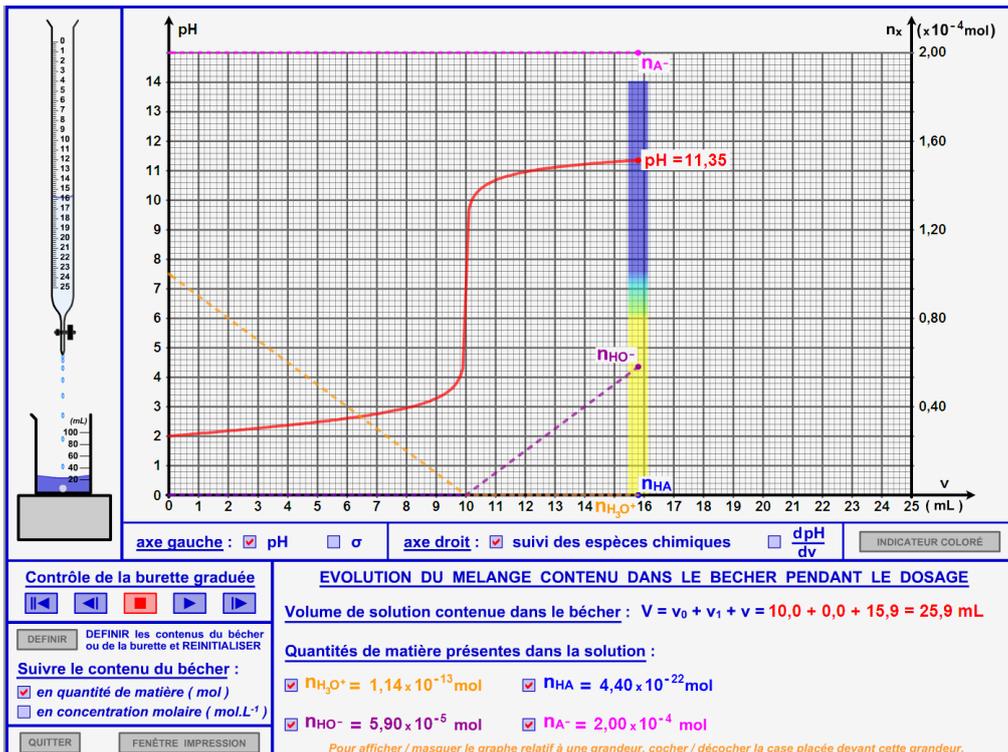
Contrôle de la burette graduée

Le suivi du mélange acido-basique contenu dans le bécher peut se faire :

- ✓ en ajoutant un **indicateur coloré** au mélange (utiliser le bouton **INDICATEUR COLORÉ**).
- ✓ par **pH-métrie** (cocher la case  pH sous le graphe).
- ✓ par **conductimétrie** si les conductivités molaires ioniques de toutes espèces chimiques des couples acide / base sont connues (cocher alors la case   $\sigma$ ). Dans ce cas :
  - les ions spectateurs mis en jeu sont  $Na^+$  pour un anion et  $Cl^-$  pour un cation.
  - la solution contenue dans la burette est soit une solution d'acide chlorhydrique ( $H_3O^+ + Cl^-$ ), soit une solution d'hydroxyde de sodium ( $Na^+ + HO^-$ ).

Produit ionique de l'eau :  $K_e = [H_3O^+] \times [HO^-] = 1,00 \times 10^{-14} \text{ mol}^2.L^{-2}$  (à 25 °C)

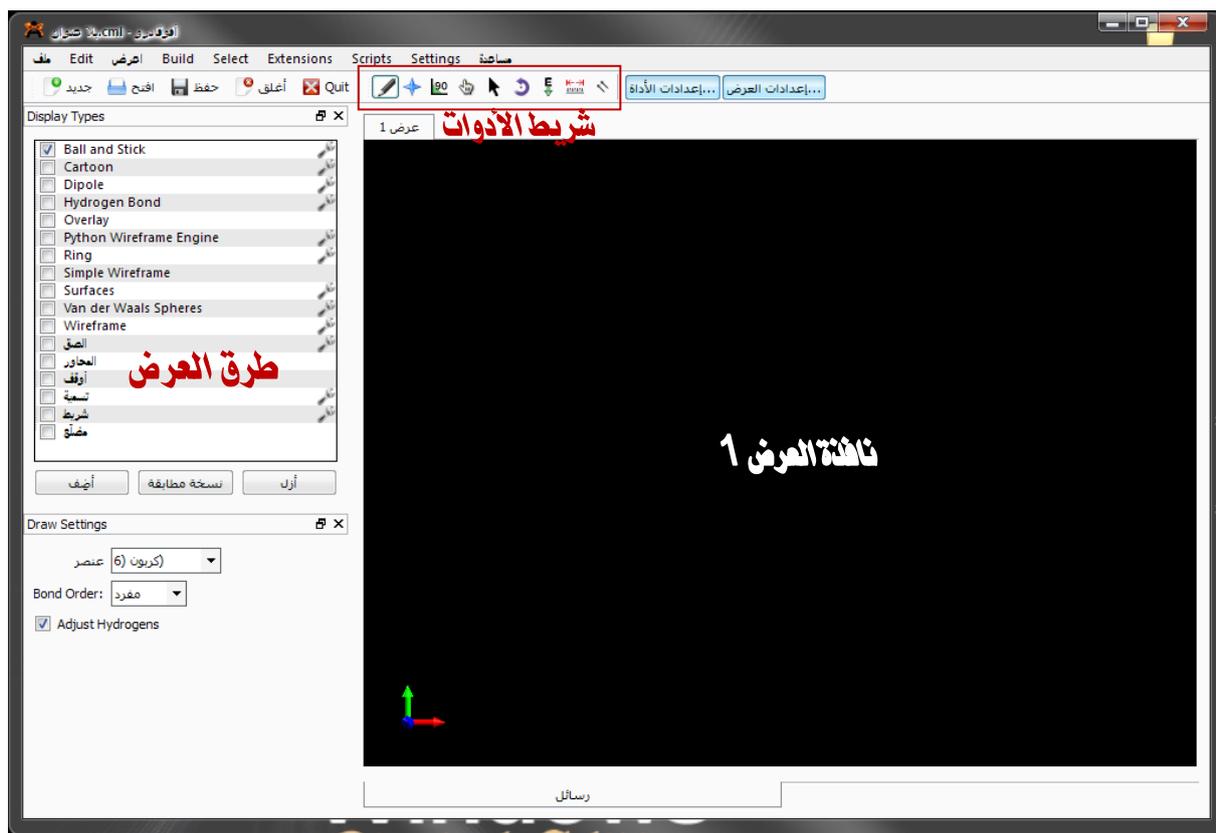
### (2) التصديق:



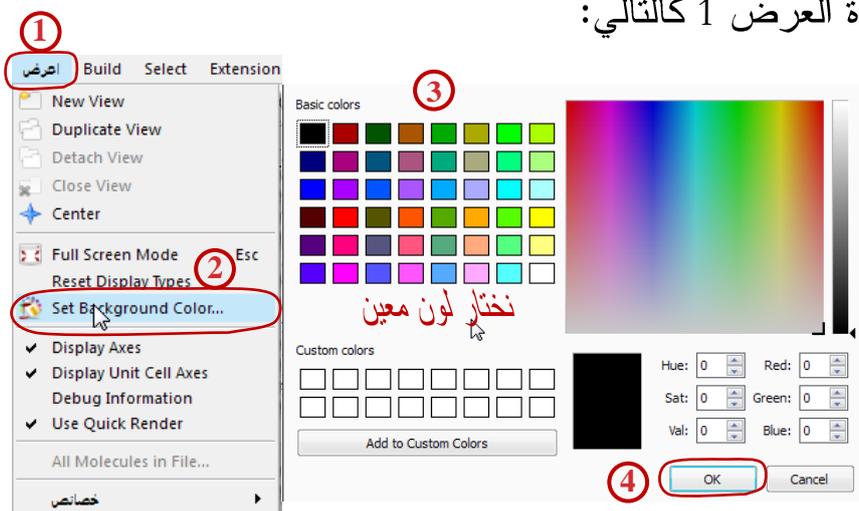
## (II) البرمجية AVOGADRO

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

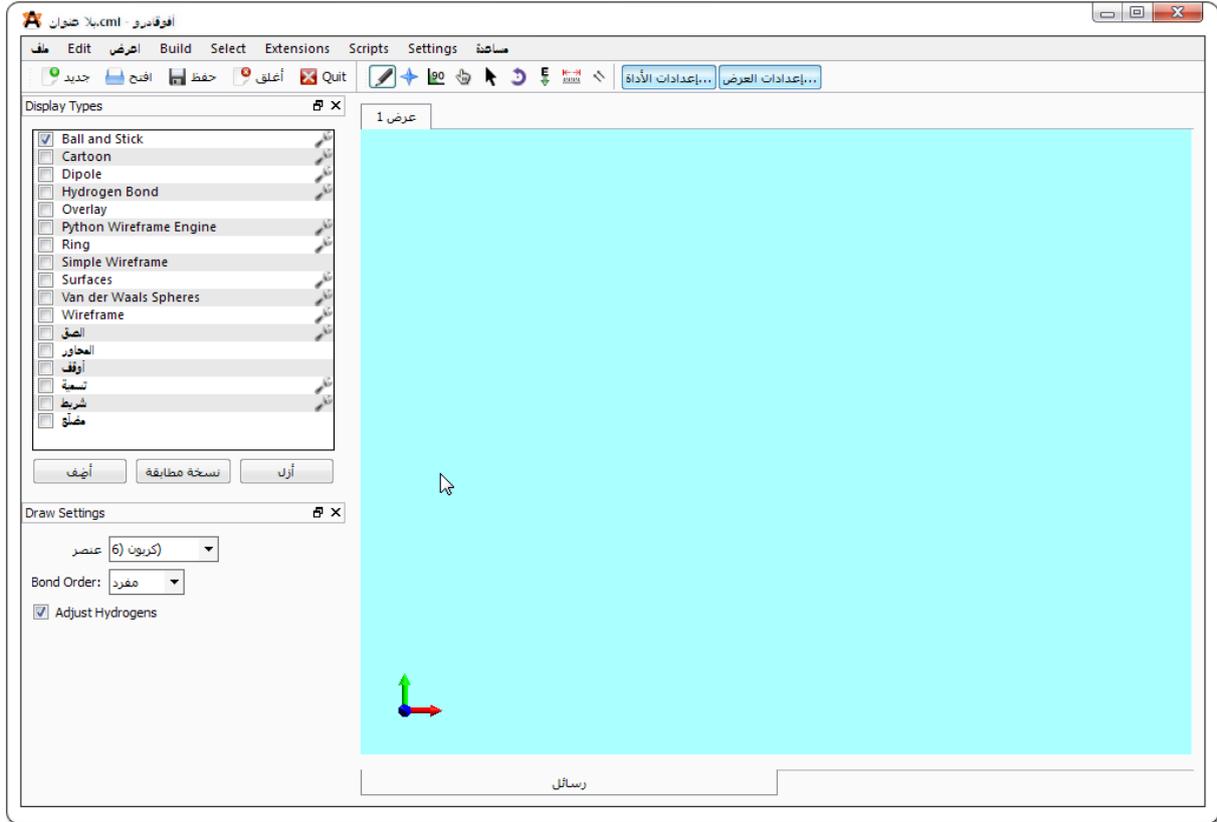
ملاحظة: عند تثبيت البرمجية تظهر لغة واجهة البرنامج حسب اللغة الافتراضية لنظام التشغيل (Windows) المثبت على جهاز الكمبيوتر (الانجليزية-الفرنسية-العربية...)



يمكن تغيير لون الخلفية لنافذة العرض 1 كالتالي:

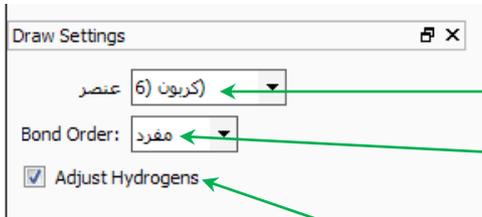


بعد تغيير لون الخلفية، نتحصل مثلا على:



لرسم نموذج جزيء ما انقر على أداة الرسم  في شريط الأدوات حيث افترضيا، 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.

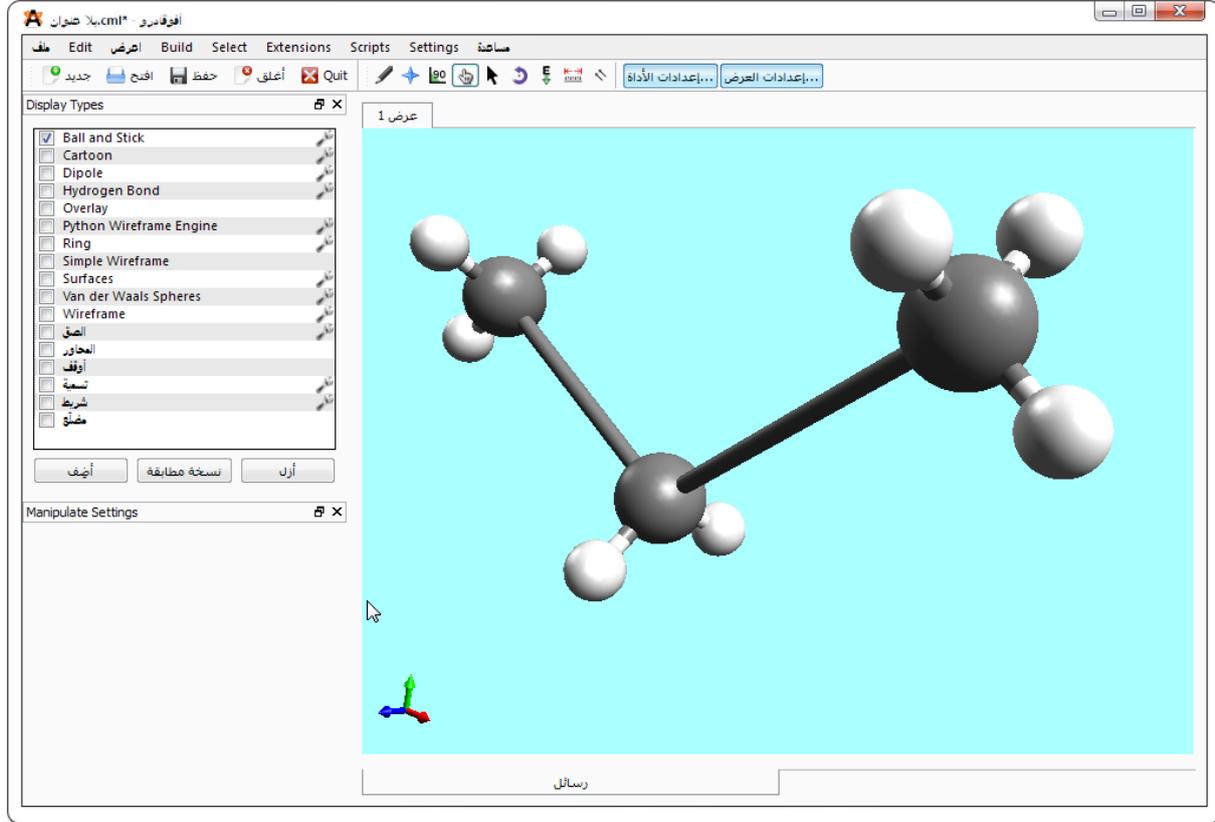
✓ النقر بالزر الأيمن (على ذرة الكربون): للمحو.

انقر في أي مكان من نافذة العرض 1 بالزر الأيسر للفأرة (مرة واحدة) لتشكيل جزيء

$CH_4$ ؛ مرتان: لتشكيل جزيئين؛ هكذا... لاحظ الصورة أدناه



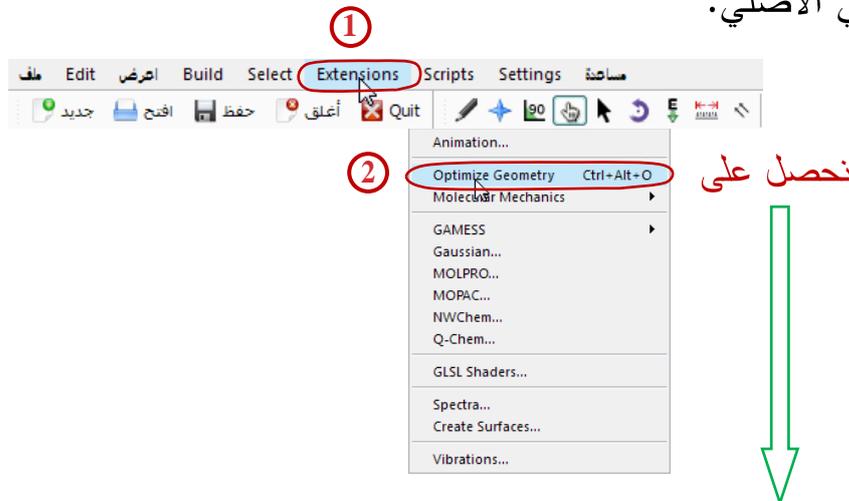
ملاحظة: بعد تشكيل جزيء ما بطريقة السحب كما في السابق، يمكن إعطاء هذا الجزيء أبعاده الحقيقية (التمثيل الهندسي الفراغي الواقعي: احترام الأبعاد النسبية للروابط و كذا قياس الزوايا التكافؤية بين الروابط، ...) كالتالي:

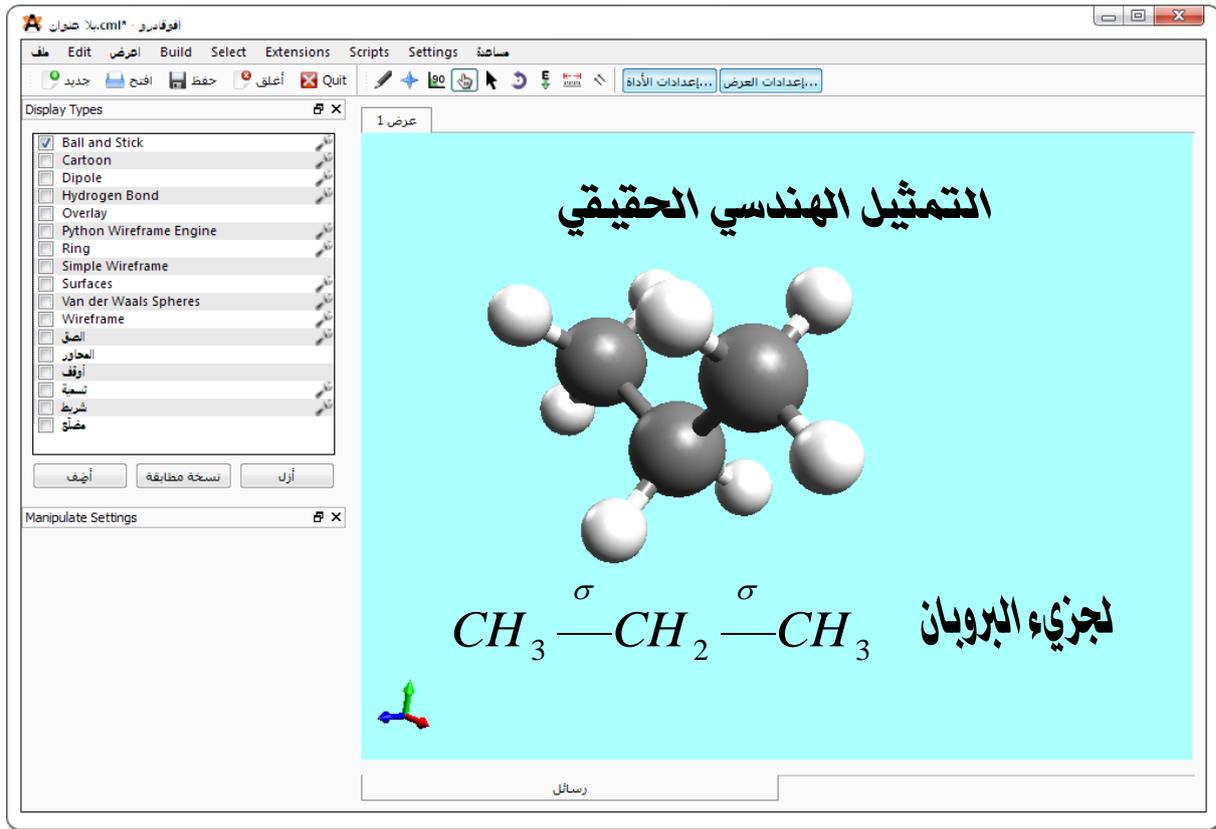


✓ ننقر في شريط القوائم على: Extensions

✓ ثم نختار Optimize Geometry

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





ملاحظة: خيارات البرنامج الافتراضية تمكن من رسم الروابط (كربون-كربون) البسيطة "الأحادية" من النوع  $\sigma$  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، أزوت، ...) نحدد طبيعة الرابطة من خيارات التشكيل Draw Settings كالتالي:

Draw Settings

عنصر (كربون 6)

Bond Order: ثلاثي

تشكيل الروابط الثلاثية

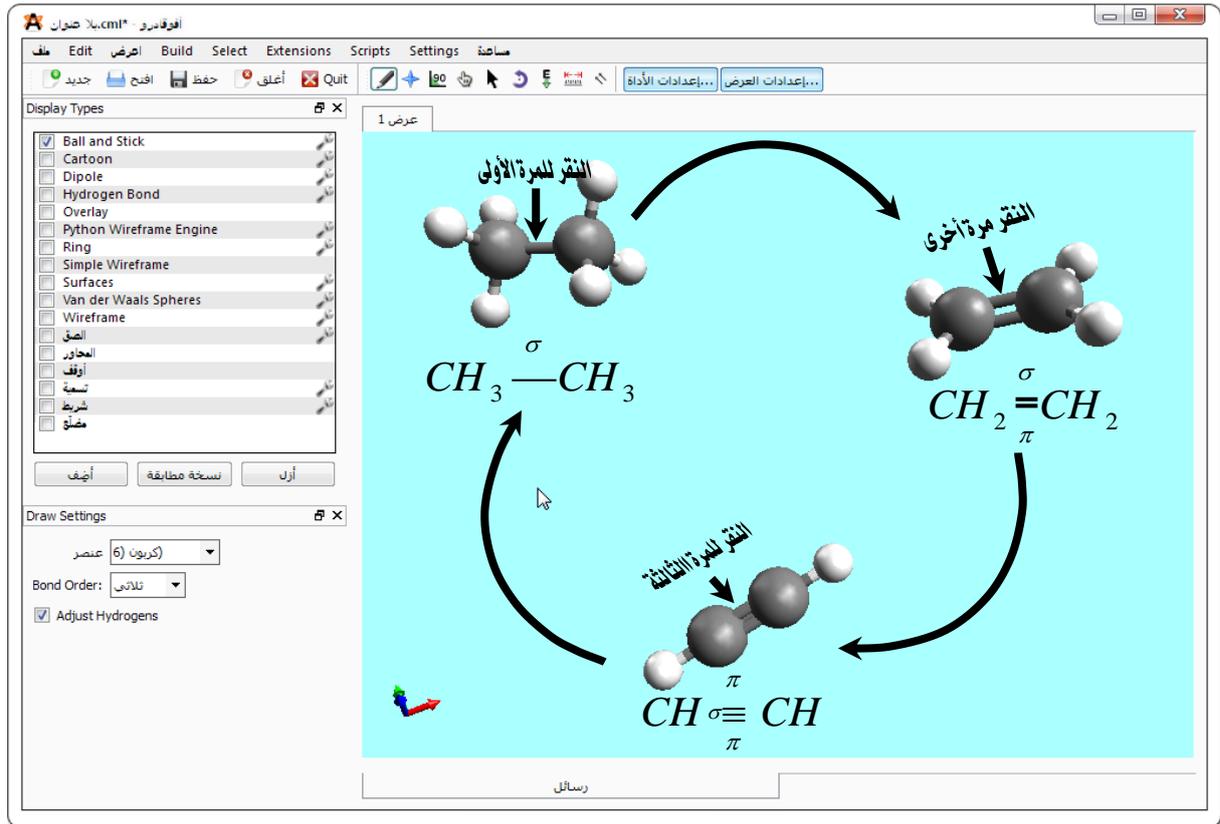
Draw Settings

عنصر (كربون 6)

Bond Order: مضاعف

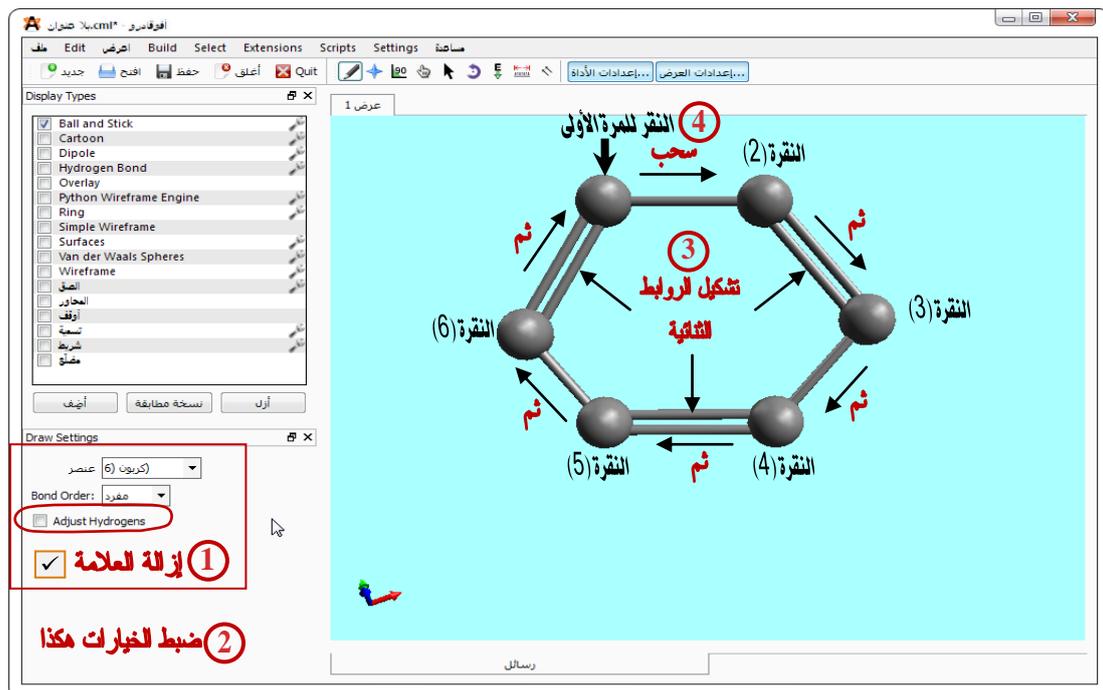
تشكيل الروابط الثنائية

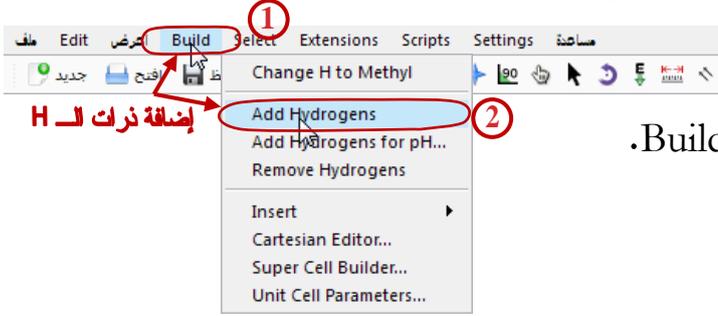
يمكن كذلك مضاعفة الرابطة الأحادية المشكلة في البداية بالنقر عليها للمرة الأولى (تصبح ثنائية) ثم النقر عليها مرة أخرى (تصبح ثلاثية) و عند النقر للمرة الثالثة على الرابطة الثلاثية تصبح أحادية من جديد.



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).

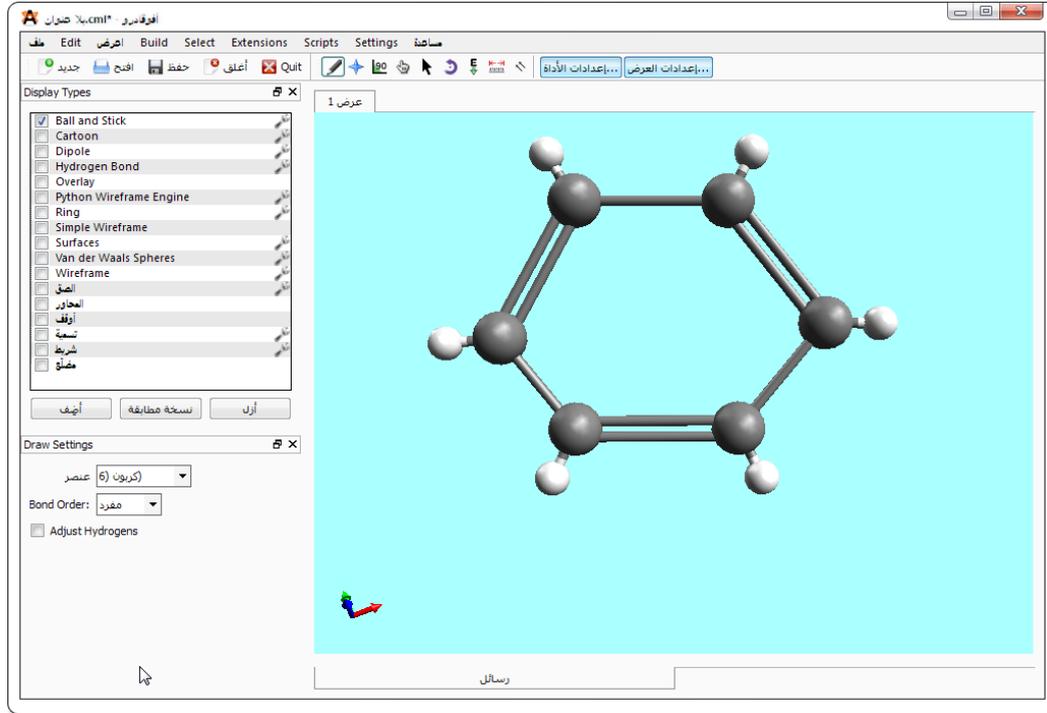




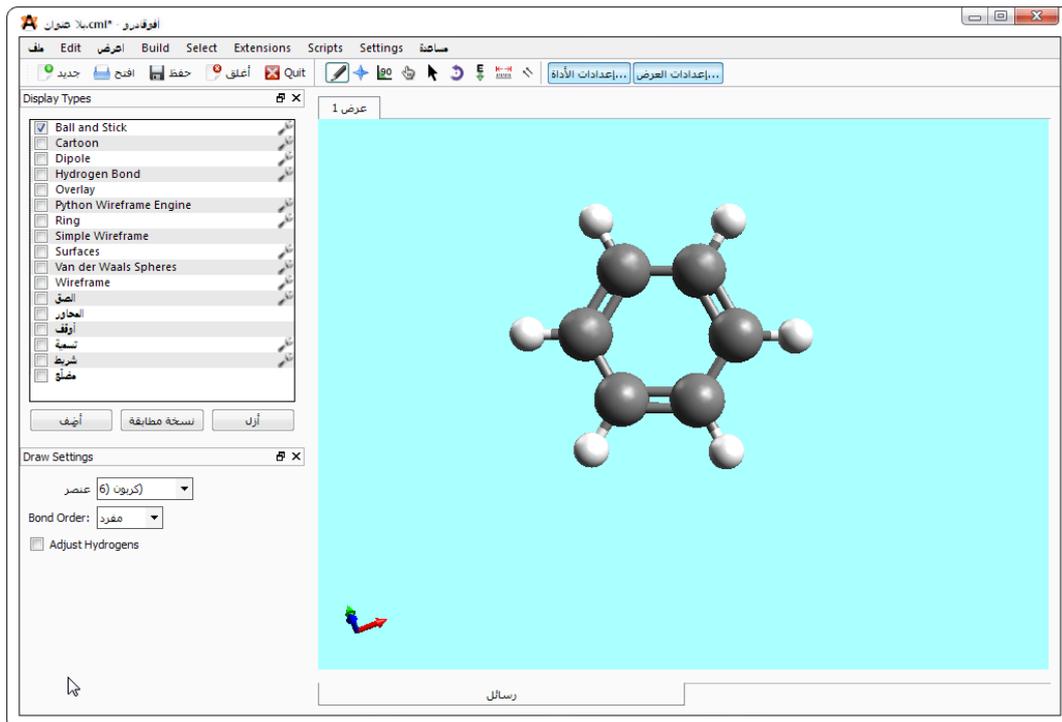
✓ انقر في شريط القوائم على القائمة Build.

✓ 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:

1) انقر على إطار: عنصر

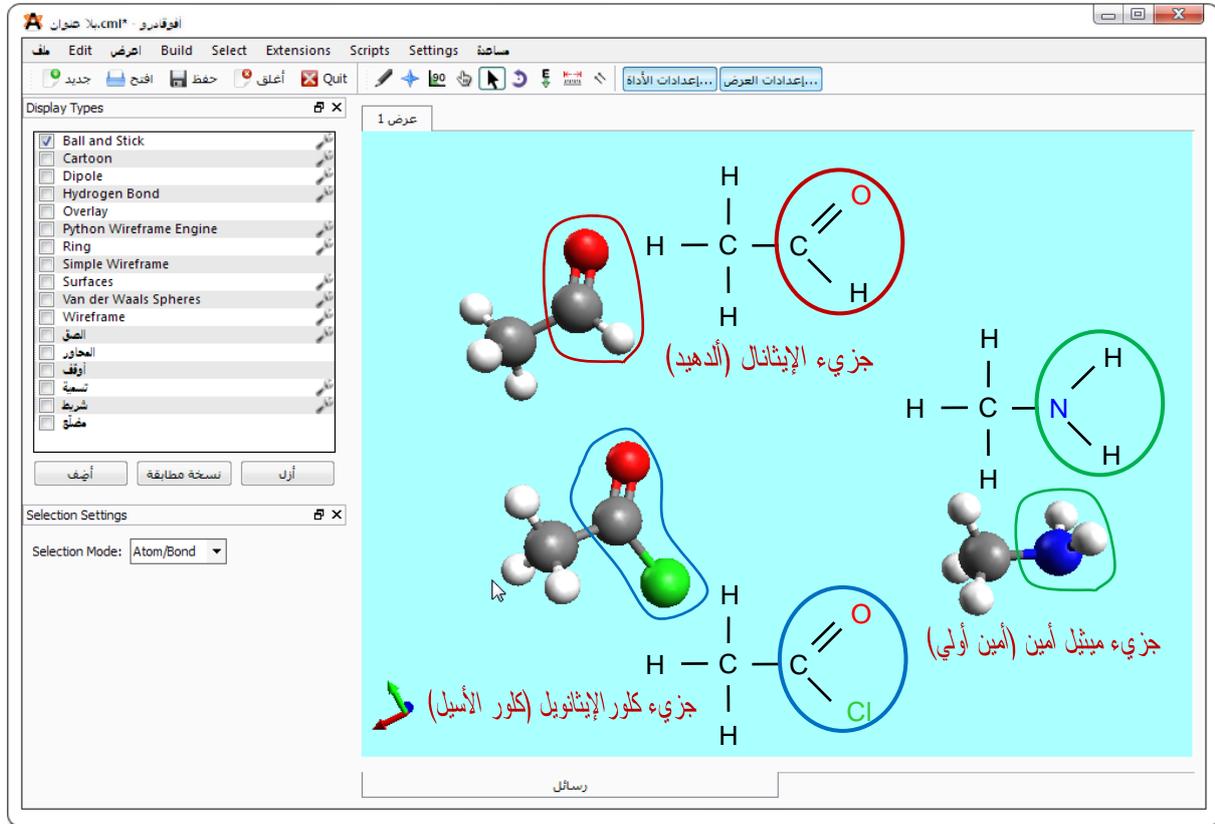
2) عنصر الأكسجين

3) عنصر الأزوت

4) عنصر الكلور

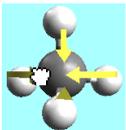
ثم اختار بدل الكربون عنصر آخر

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



بقية الأدوات:

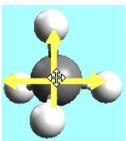
أداة الإبحار: \*

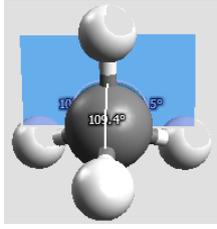


✓ النقر بزر الفأرة الأيسر على مشهد الجزيء: للتدوير في كل الاتجاهات.

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

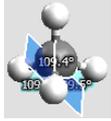
✓ النقر بزر الفأرة الأيمن: لنقل و تحريك الجزيء في كل الاتجاهات.



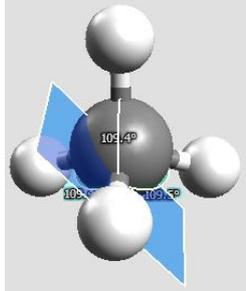


أداة قياس الزوايا التكافؤية بين الروابط و مستوياتها  $90^\circ$  :

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

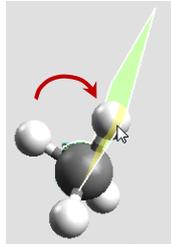


للإمام: تكبير

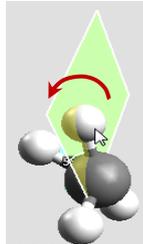


✓ النقر بزر الفأرة الأوسط (العجلة):  
للتكبير أو التصغير.

للخلف: تصغير



باتجاه عقارب الساعة



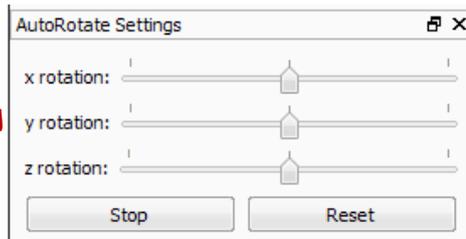
عكس عقارب الساعة

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

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:

للفص السرعة  $\longleftrightarrow$  زيادة السرعة  
(بالاتجاه المعاكس)



زيادة السرعة  $\longleftrightarrow$  للفص السرعة  
(بالاتجاه)

✓ 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 قياس طول الرابطة بين الذرتين 1 - 2 و قياس طول الرابطة بين الذرتين 2 - 3.

✓ النقر بزر الفأرة الأيمن: للعودة إلى الصفر.

ملاحظة: يعطى طول الرابطة بوحدة الأنغستروم:  $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$