Éléments et molécules

Les propriétés des éléments chimiques, de molécules peuvent être dressées, listées,... par un programme si on dispose des données. Christoph Gohlke (University of California, Irvine), a écrit deux librairies, elements.py et molmass.py, pour respectivement accéder aux propriétés des éléments, et calculer les masses moléculaires, compositions élémentaires, spectres de distribution des masses de molécules,... Gohlke fournit également un interface utilisateur graphique sous forme d'un tableau périodique, et un interface web pour afficher les données sur les masses moléculaires. Tous ces programmes sont mis à disposition aux conditions de la licence BSD (licence libre très permissive). Les 4 programmes, dans leur version de mars 2013 sont regroupés dans cette archive.

Voici deux exemples simples de programmes utilisant ces librairies :

<sxh python; title : molmass-elements-01.py> #!/usr/bin/env python # -*- coding: utf-8 -*- # utilisations de elements.py & molmass.py # source : http://www.lfd.uci.edu/~gohlke/ from elements import ELEMENTS

len(ELEMENTS) str(ELEMENTS[109]) ele = ELEMENTS['C'] print ele.number, ele.symbol, ele.name, ele.eleconfig print ele.eleconfig_dict print sum(ele.mass for ele in ELEMENTS) for ele in ELEMENTS:

```
  ele.validate()
  ele = repr(ele)
  print ele, type(ele)
  raw_input("next ?")
```

</sxh>

<sxh python; title : molmass-elements-02.py> #!/usr/bin/env python # -*- coding: utf-8 -*- # utilisations de elements.py & molmass.py # source : http://www.lfd.uci.edu/~gohlke/ from molmass import Formula

f = Formula(“D2O”) #f = Formula(“H2SO4”)

print f.formula

print f.empirical

print f.mass # average mass print f.isotope.massnumber # nominal mass print f.isotope.mass # monoisotopic mass print f.atoms print f.composition() print f.spectrum() </sxh>

From:
https://dvillers.umons.ac.be/wiki/ - **Didier Villers, UMONS - wiki**

Permanent link:
https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:elements_molecules?rev=1392081666

Last update: **2014/02/11 02:21**