

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 bibliothèques, [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 bibliothèques :

```
<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>
```

Un autre programme, testant plus de possibilités :

```
<sxh python; title : molmass-elements-03.py>
#!/usr/bin/env python # -*- coding: utf-8 -*- # utilisations de elements.py & molmass.py # source :
http://www.lfd.uci.edu/~gohlke/ # test des routines sur les formules chimiques from molmass import *
```

```
def info(object, spacing=10, collapse=1):
```

```
    """Print methods and doc strings.
    Takes module, class, list, dictionary, or string."""
    methodList = [method for method in dir(object) if callable(getattr(object,
method))]
```

```
processFunc = collapse and (lambda s: " ".join(s.split())) or (lambda s:
s)
print "\n".join(["%s %s" %
                 (method.ljust(spacing),
                  processFunc(str(getattr(object, method).__doc__)))
                 for method in methodList])
```

f = Formula('CHCl3') #f = Formula('C2H2Cl6') line=""

```
print line print dir(f) print line print info(f) print line print f.composition() print line print f.isotope print
line print f.isotope.mass print line print f.isotope.massnumber print line print f.mass print line print
f.formula, f.gcd, f.empirical print line print f.spectrum() print line print f.atoms print line print analyze
('CHCl3') print line print f, type(f) print line </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=1392084627

Last update: **2014/02/11 03:10**

