

Représentation de pH d'acides et de bases

Pour les acides :

```
<sxh python; title : representation_pH_acide.py> #!/usr/bin/env python # -*- coding: utf-8 -*- #
travail de QD et TB, ba2 chimie 2012-2013
```

```
import Tkinter as tk from numpy import * import matplotlib.pyplot as plt
```

```
def get_acide(event):
```

```
    """
    fonction pour lire la sélection dans la listbox
    et afficher le pKa correspondant
    """
    indexacide=listbox1.curselection()[0]
    seltextacide=listbox1.get(indexacide)
    listeacide= ['HClO4', 'HCl', 'HI', 'HN03', 'H30+', 'HF', 'HS04-', 'HBr',
    'HClO2', 'HN02']
    listepka=[-8.6,-6,-10,-1.3,-1.74,3.2,1.9,-9,1.93,3.29]
    acideselect=listeacide.index(seltextacide)
    pkaselect=listepka[acideselect]
    label['text']=pkaselect
```

```
def graphe_acide () :
```

```
    """
    fonction pour tracer le graphe
    du pH de l'acide sélectionné en
    fonction de sa concentration
    """
    indexacide=listbox1.curselection()[0]
    seltextacide=listbox1.get(indexacide)
    listeacide= ['HClO4', 'HCl', 'HI', 'HN03', 'H30+', 'HF', 'HS04-', 'HBr',
    'HClO2', 'HN02']
    listepka=[-8.6,-6,-10,-1.3,-1.74,3.2,1.9,-9,1.93,3.29]
    acideselect=listeacide.index(seltextacide)
    pkaselect=listepka[acideselect]
```

```
    if pkaselect < 0:
        x=[0.0001,0.001,0.01,0.1,1]
        y=-log10(x)
        l1=plt.semilogx(x,y,color='m',linewidth=2)
        lx=plt.xlabel("Concentration")
        ly=plt.ylabel("pH")
        t1=plt.title("pH d'un acide fort en fonction de la concentration")
        plt.show()
```

```
    elif pkaselect > 0:
```

```
x=[0.0001,0.001,0.01,0.1,1]
y=0.5*(pkaselect)-0.5*log10(x)
l1=plt.semilogx(x,y,color='#DAB30A',linewidth=2)
lx=plt.xlabel("Concentration")
ly=plt.ylabel("pH")
t1=plt.title("pH d'un acide faible en fonction de la concentration")
plt.show()
```

#on crée un sample de données pour la listbox str1= """HClO4 HCl HI HNO3 H3O+ HF HSO4- HBr HClO2 HNO2"""

#va écrire un fichier .txt dans lequel on met le sample #fout -> file output et fin -> file input sont des #fonctions d'édition de fichiers. Ici, le w veut dire 'writing' #et le r veut dire 'reading' #si on mettait a, cela voudrait dire 'Appending' fin = open("chem_data_acide.txt", "w") fin.write(str1) fin.close()

#va lire le fichier .txt fout = open("chem_data_acide.txt", "r") chem_list = fout.readlines() fout.close()

#rstrip pour recopier les éléments de chem_list c2=[chem for chem in chem_list] chem_list = [chem.rstrip() for chem in chem_list] print chem_list print c2 #crée la fenêtre Tk root = tk.Tk()
root.title("Graphique Acide")

#crée la listbox listbox1 = tk.Listbox(root, width=35, height=6) listbox1.grid(row=0, column=1)

#crée la scrollbar yscroll = tk.Scrollbar(command=listbox1.yview, orient=tk.VERTICAL)
yscroll.grid(row=0, column=0, sticky=tk.N+tk.S) listbox1.configure(yscrollcommand=yscroll.set)

#insère les éléments de chem_list dans la listbox for item in chem_list:

```
listbox1.insert(tk.END, item)
```

pka_corresp=tk.Label(root, text='pKa correspondant:') pka_corresp.grid(row=1,column=1) #affiche le pKa correspondant, à chaque cliq listbox1.bind('<ButtonRelease-1>', get_acide) label=tk.Label(root)
label.grid(row=2,column=1)

boutongraphe = tk.Button(root, text="Tracer le graphe!", command=graphe_acide)
boutongraphe.grid(row=3, column=1)

root.mainloop() </sxh>

Pour les bases :

<sxh python; title : representation_pH_base.py> #!/usr/bin/env python # -*- coding: utf-8 -*- # travail de QD et TB, ba2 chimie 2012-2013

import Tkinter as tk from numpy import * import matplotlib.pyplot as plt

def get_base(event):

```
    ...
```

```

fonction pour lire la sélection dans la listbox
et afficher le pKa correspondant
"""

indexbase=listbox1.curselection()[0]
seltextbase=listbox1.get(indexbase)
listebase= ['NH3', 'Aniline (C6H5NH2)', 'Benzylamine (C6H5CH2NH2)', 'n-
Butylamine (CH3CH2CH2CH2NH2)', 'Diethylamine (CH3CH2NHCH2CH3)', 'Pyridine
(C5H5N)', 'CH3-', 'NH2-', 'OH-']
listepka=[9.2, 4.62, 9.33, 10.59, 11.68, 5.21, 48, 23, 24]
baseselect=listebase.index(seltextbase)
pkaselect=listepka[baseselect]
label['text']=pkaselect

```

```
def graphe_base () :
```

```

""" fonction qui va tracer le graphe
du pH de l'acide sélectionné en
fonction de sa concentration
"""

indexbase=listbox1.curselection()[0]
seltextbase=listbox1.get(indexbase)
listebase= ['NH3', 'Aniline (C6H5NH2)', 'Benzylamine (C6H5CH2NH2)', 'n-
Butylamine (CH3CH2CH2CH2NH2)', 'Diethylamine (CH3CH2NHCH2CH3)', 'Pyridine
(C5H5N)', 'CH3-', 'NH2-', 'OH-']
listepka=[9.2, 4.62, 9.33, 10.59, 11.68, 5.21, 48, 23, 24]
baseselect=listebase.index(seltextbase)
pkaselect=listepka[baseselect]

```

```

if pkaselect < 14:
    x=[0.0001,0.001,0.01,0.1,1]
    y=7+0.5*log10(x)+0.5*pkaselect
    l1=plt.semilogx(x,y,color='m',linewidth=2)
    lx=plt.xlabel("Concentration")
    ly=plt.ylabel("pH")
    t1=plt.title("pH d'une base faible en fonction de la concentration")
    plt.show()

```

```

elif pkaselect > 14:
    x=[0.0001,0.001,0.01,0.1,1]
    y=14+log10(x)
    l1=plt.semilogx(x,y,color='m',linewidth=2)
    lx=plt.xlabel("Concentration")
    ly=plt.ylabel("pH")
    t1=plt.title("pH d'une base forte en fonction de la concentration")
    plt.show()

```

```
#on crée un sample de données pour la listbox str1= """NH3 Aniline (C6H5NH2) Benzylamine
(C6H5CH2NH2) n-Butylamine (CH3CH2CH2CH2NH2) Diethylamine (CH3CH2NHCH2CH3) Pyridine
(C5H5N) CH3- NH2- OH-"""

```

```
#va écrire un fichier .txt dans lequel on met le sample #fout ->file output et fin -> file input sont des
```

Last update:

2013/11/29 teaching:progappchim:ph_acides_bases_2013 https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:ph_acides_bases_2013
11:16

```
#fonctions d'édition de fichiers. Ici, le w veut dire 'writing' #et le r veut dire 'reading' fout =  
open("chem_data_base.txt", "w") fout.write(str1) fout.close()  
  
#va lire le fichier .txt fin = open("chem_data_base.txt", "r") chem_list = fin.readlines() fin.close()  
  
#rstrip pour recopier ce qu'il y a chem_list = [chem.rstrip() for chem in chem_list]  
  
#crée la fenêtre Tk root = tk.Tk() root.title("Graphique Base")  
  
#crée la listbox listbox1 = tk.Listbox(root, width=35, height=6) listbox1.grid(row=0, column=0)  
  
#crée la scrollbar yscroll = tk.Scrollbar(command=listbox1.yview, orient=tk.VERTICAL)  
yscroll.grid(row=0, column=1, sticky=tk.N+tk.S) listbox1.configure(yscrollcommand=yscroll.set)  
  
#insère les éléments de chem_list dans la listbox for item in chem_list:  
    listbox1.insert(tk.END, item)
```

```
pka_corresp=tk.Label(root, text='pKa correspondant:') pka_corresp.grid(row=1,column=0) #affiche le  
pKa correspondant, à chaque cliq listbox1.bind('<ButtonRelease-1>', get_base) label=tk.Label(root)  
label.grid(row=2,column=0)
```

```
boutongraphe = tk.Button(root, text="Tracer le graphe!", command=graphe_base)  
boutongraphe.grid(row=3, column=0)
```

```
root.mainloop()
```

```
</sxh>
```

From:

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



Permanent link:

https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:ph_acides_bases_2013

Last update: **2013/11/29 11:16**