

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', 'HNO3', 'H3O+', 'HF', 'HSO4-', 'HBr',  
'HClO2', 'HNO2']  
    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', 'HNO3', 'H3O+', 'HF', 'HSO4-', 'HBr',  
'HClO2', 'HNO2']  
    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
#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**

