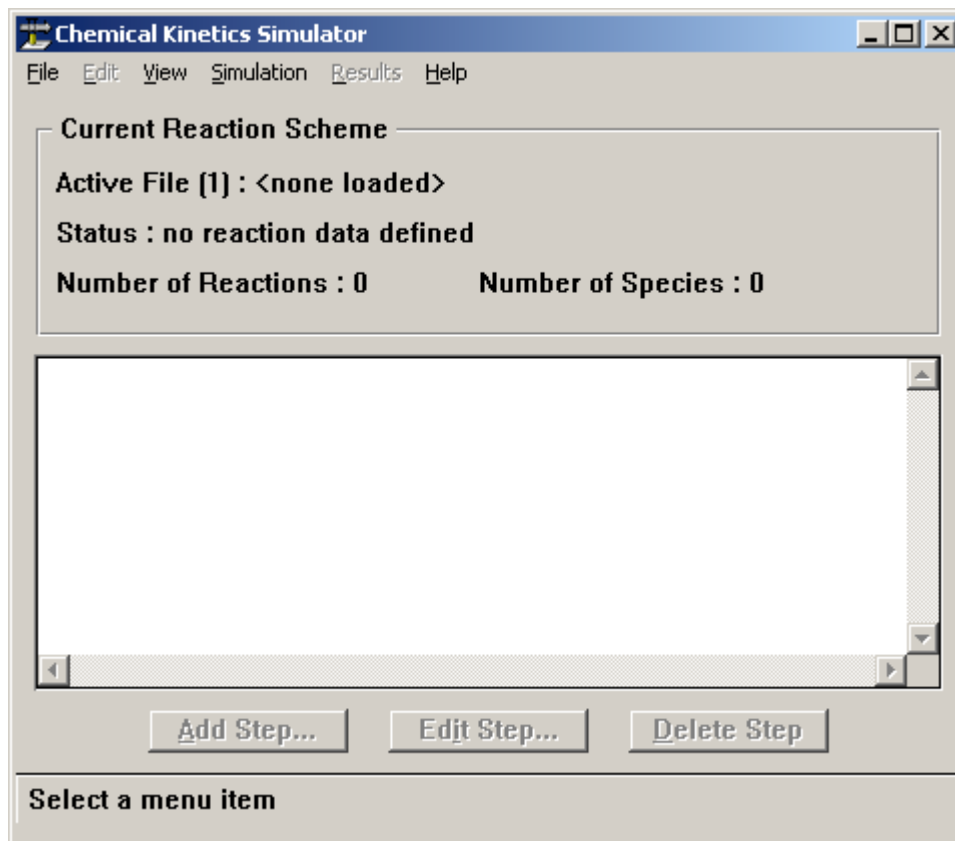


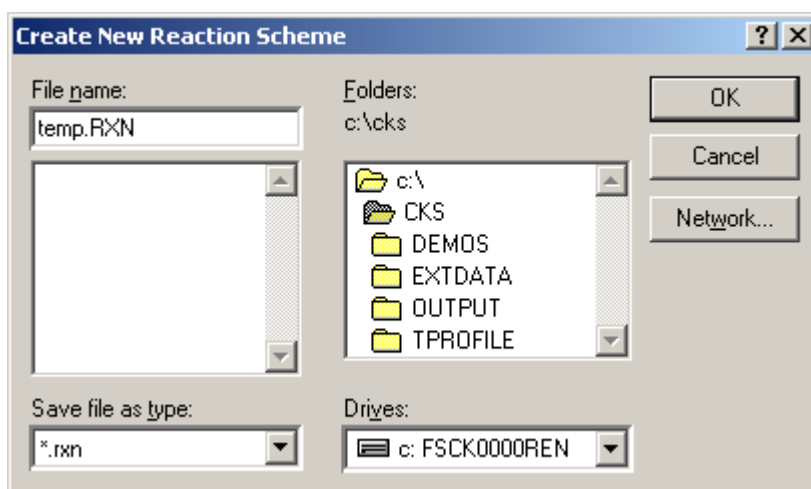
Todas las imágenes y resultados se han creado con la aplicación CKS®

CKS

CKS es el programa que utilizamos para simular reacciones. Se encuentra en la carpeta 7.51 del escritorio de todos los Macs y PCs. Al ejecutar el simulador, aparecerá la siguiente pantalla (mostramos la de IBM, la de Mac es similar):



1. Crear una nueva simulación, seleccionando **Create** (crear) en el menú **File** (archivo). Elegir un nombre para la reacción y escribirlo en el apartado **File name** de la ventana que se muestra a continuación (nosotros le hemos puesto “temp”):



Pulsar OK. Volverá a aparecer la ventana principal.

2. Pulsar el botón **Add Step** (añadir proceso). Se abrirá la siguiente ventana:

Reaction Data Entry: temp.rxn

Reaction Step 1 of 1

A => B

Form of rate constant

Temperature dependent

Temperature independent

Form of rate law

Derived from stoichiometry

Use special rate law

Set rate law...

Values of rate constants

| | Forward | Reverse | |
|---------------|---------|---------|--------------------|
| Rate Constant | 25 | | (l/mole-sec) units |

OK Add Another Delete This Undo Help

Introducir la ecuación química que se quiere simular. **Obsérvese que es necesario introducir un espacio entre las especies y las flechas; y que => se utiliza para representar una reacción unidireccional, mientras que <=> representa una bidireccional.**

Introducir también una constante de velocidad para la reacción. Pulsar OK para cerrar la ventana. Si se trata de una reacción con más de una etapa, pulsar **Add Another** (añadir otra) e introducir la siguiente ecuación.

Al pulsar OK, el programa volverá a la ventana principal.

3. Seleccionar la opción **Simulation Settings** (opciones de simulación) del menú **Simulation** (simulación). Se abrirá la siguiente ventana:

Todas las imágenes y resultados se han creado con la aplicación CKS®

Set Simulation Options: temp.rxn

General Settings

Total number of molecules: 10000

Record state at intervals of: 75 events

Random number seed: 12947

Limits

Stop when total number of events exceeds: 4000000000

Stop when time in simulation exceeds: 0.0 sec

Equilibrium Detect

Enabled Equil. test cycle length: 100 events

Disabled Selection frequency: 90.0 percent

OK Defaults Undo Help

Introducir el número de moléculas que se quieren simular y los parámetros que se deseen modificar. Pulsar OK y el programa volverá a la ventana principal.

4. Seleccionar la opción **Reaction conditions** (condiciones de la reacción) del menú **Edit** (editar).

Reaction Conditions: temp.rxn

Initial concentrations

Species names: A, B

Initial concentration of species A is 5 mole/l

Temperature

Constant at T = 298.15 deg K

Variable starting from init. T = 298.15 deg K

Follow linear program $T(t) = 298.15 + 1.00 t$ (sec)

Follow external profile in file: <none selected>

Change Settings...

Volume

Constant

Variable

Not tracked

Pressure

Constant

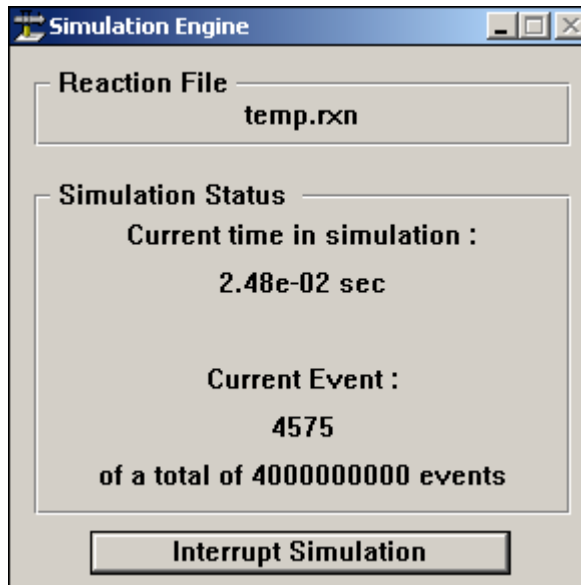
Variable

OK Defaults Undo all Help

Todas las imágenes y resultados se han creado con la aplicación CKS®

Introducir las concentraciones de todas las especies, seleccionando primero la especie en la lista mostrada y escribiendo, a continuación, la concentración en M dentro del cuadro **Initial concentration** (concentración inicial).

5. Seleccionar **Start** (empezar) en el menú **Simulation**. Se abrirá una ventana en la que se puede ver el progreso:



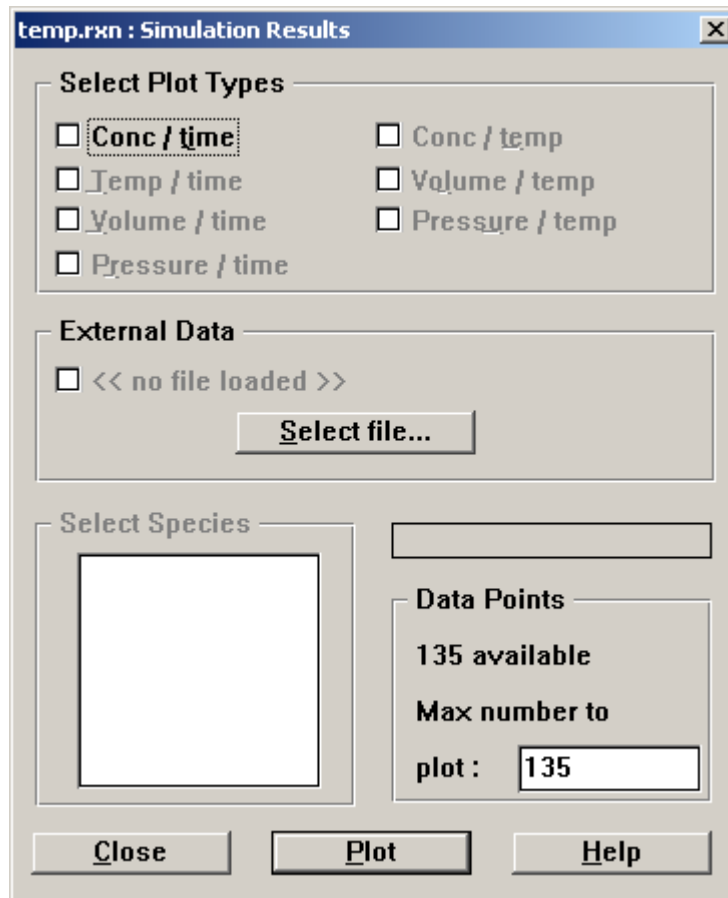
En caso de no querer continuar, pulsar el botón **Interrupt Simulation** (interrumpir la simulación). De lo contrario, esperar a que termine y aparezca la siguiente ventana:



Pulsar OK para volver a la ventana principal.

Todas las imágenes y resultados se han creado con la aplicación CKS®

6. Representar gráficamente los resultados, seleccionando la opción **Plot Results** del menú **Results** (resultados). Aparecerá la siguiente ventana:



Marcar la opción **Conc/time**, seleccionar las especies en el cuadro **Select Species** y pulsar el botón **Plot**. Se representarán los datos en forma de gráfica del siguiente modo:

Todas las imágenes y resultados se han creado con la aplicación CKS®

