

KINTECUS**Nom.txt:**

Fitxer a on es troba la reacció, les constants de velocitat així com el títol de la reacció.

Aquest fitxer l'editarem utilitzant una fulla de càlcul, Excel, i el guardarem com a un fitxer de text per DOS.

#	
# Títol	
#	
K1	Reacció1
K2	Reacció2
#	
END	

Les reaccions les escriurem utilitzant els símbol ==>:

ex: $A1 ==> A2$

Si es tracta d'una reacció reversible, escriurem les dues reaccions per separat.

ex: $A1 ==> A2$
 $A2 ==> A1$

addspec.txt

Aquest fitxer conté les concentracions inicials, així com altre informació.

Per editar-lo utilitzarem la fulla de càlcul per obrir el fitxer. Les columnes que contenen números caldrà que el programa les llegeixi com a 'texte'.

Entrarem les concentracions inicial i a l'opció de '*Display Output*' canviarem el No per Yes. A l'hora de sortir tornarem a guardar-lo com un fitxer de text.

parm.dat

Fitxer a on es descriuen els diferents paràmetres externs, com ara temperatura, pressió, interval de temps, etc ... Tan sols l'editarem en el cas que ens interressi tenir un interval diferent de temps.

concnom.txt

Fitxer de resultats. Hi trobarem a diferents temps quina és la concentració de cada una de les espècies. Aquest fitxer és el que utilitzarem per a representar cada una de les variacions de concentració mitjançant un programa de gràfics com pot ser la fulla d'Excel ja utilitzada abans.

Si s'utilitza el programa Excel, s'ha de començar reemplaçant tots els '.' per ','. (Edición, Reemplazar, ..,).

A continuació representem les diferents concentracions respecte el temps en una sola gràfica.

- *Seleccionem les columnes que volem representar.*
- *Insertar, gràfic*
- *Dispersió X-Y*
- *Següent*
- *Acabar*

Execució del programa Kintecus

Per tal de fer correr el programa s'han de seguir les següents pautes:

- Crear fitxer *nom.txt*
- Executar desde DOS el programa '*kint1.bat nom*'
- Desde Excel editar *addspec.txt* i "*parm.dat*" per canviar les dades necessàries
- Tornar a DOS i executar '*kint2.bat nom*'
- Editar i representar les concentracions finals a partir del fitxer *connom.txt* desde Excel.