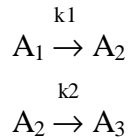


Exercicis proposats per fer amb el KINTECUS

- 1.- Considera el següent exemple de reaccions consecutives: (0.1 punts)

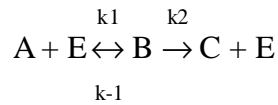


Analitza els casos següents agafant com interval de temps 10 s:

- a) $k_1=1$ i $k_2=0.001$, $[A_1]_0=1$ M
b) $k_1=3$ i $k_2=1$, $[A_1]_0=1$ M
c) $k_1=1$ i $k_2=1000$, $[A_1]_0=1$ M

Dibuixa les gràfiques de la variació de la concentració de les tres espècies en funció del temps i comenta els resultats.

- 2.- Considera el següent exemple de reaccions (J.M Goodman *J. Chem. Educ.* **1999**, 76, 275): (0.2 punts)



Analitza els casos següents:

- a) $k_1=0.01$ i $k_2=0.01$, $[A_1]_0=1$ M amb uns intervals de temps de 10s i 300 s
b) $k_1=10$ i $k_2=10$, $[A_1]_0=1$ M amb un interval de temps de 1 s
c) $k_1=10$ i $k_2=0.01$, $[A_1]_0=1$ M amb un interval de temps de 1s

Dibuixa les gràfiques de la variació de la concentració de les tres espècies en funció del temps i comenta els resultats. Entre altres aspectes discuteix el temps que tarda la reacció en arribar a l'equilibri. Per què creus que el programa es veu obligat a calcular més punts en l'apartat c que no pas en l'apartat b per aconseguir un mateix grau de precisió en la determinació de les concentracions?

- 3.- Considera ara el problema 9 de l'apartat de reaccions complexes de la col·lecció de problemes. Aquest problema és de difícil solució analítica i es tracta de resoldre'l numèricament fent servir el programa KINTECUS. (0.2 punts)

- a) Per resoldre l'apartat a del problema considera els valors següents: $k_1=1$, $k_2=10$, $k_3=100$, $[A]_0=[Z]_0=100$ M i $[X]_0=[Y]_0=1$ M
c) Per resoldre l'apartat c considera $k_1=k_2=k_3=1$ i $k_{-1}=k_{-2}=k_{-3}=2$, i $[A]_0=[Z]_0=[X]_0=[Y]_0=1$ M

Comenta els resultats obtinguts i la seva significació des d'un punt de vista biològic.