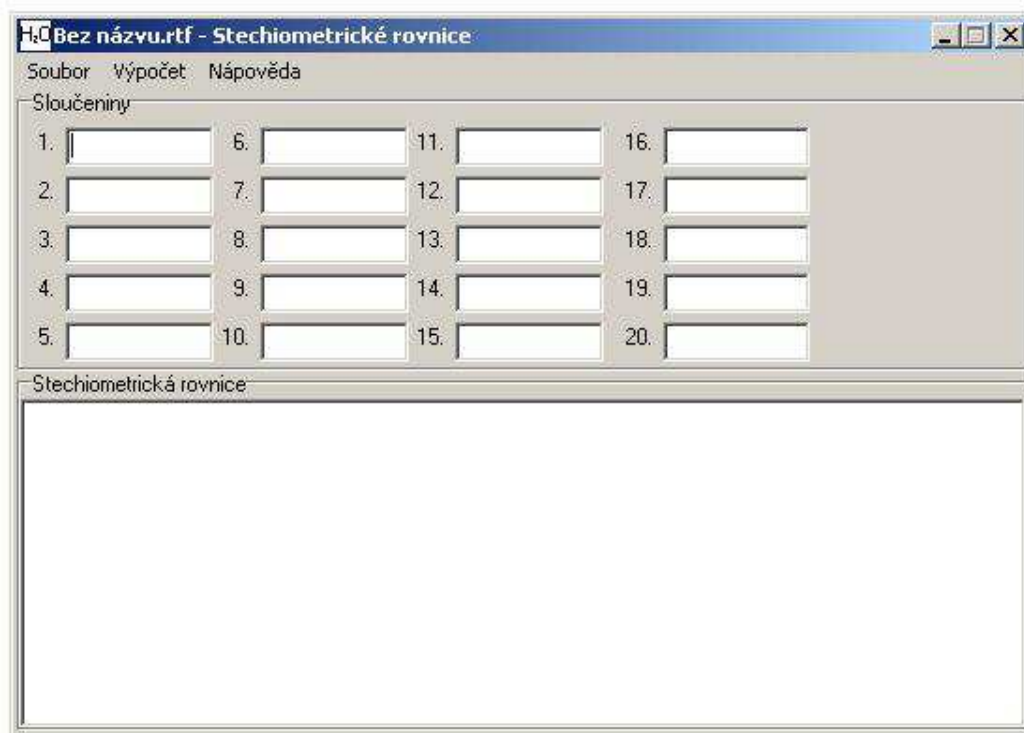


RATKIN – rational package for the design of reaction rate equations

Just run the “Stechio.exe” file.

The **initial panel** should look as follows:



Stechiometrické rovnice...Stoichiometric equations

Soubor...File

Výpočet...Calculation

Nápověda...Help

Sloučeniny...Compounds

Stechiometrická rovnice...Stoichiometric equation (mistake – should be: rate equation)

Boxes 1. to 20. serve to input summary formulas of reacting compounds (atoms), e.g. CaO2H2 for Ca(OH)₂, C2H6O for CH₃CH₂OH.

Menu Soubor:

Nové vzorce...New formulas (erases current formulas)

Načíst vzorce...Read formulas (from text file)

Uložit vzorce...Save formulas (into text file)

Uložit rovnici...Save equation (into RTF file)

Uložit rovnici jako...Save equation as (new file name)

Uložit mezivýsledky...Save intermediate results (into text file)

Uložit mezivýsledky jako...Save intermediate results as (new file name)

Konec...End (of that excellent program)

Menu Výpočet:

Kontrola dat...Data check (formulas are checked)

Sloučeniny jsou v pořádku...Compounds are OK

Provést výpočet...Run calculations (*see below*)

Nastavení ...Setting (of the polynomial degree)

Stupeň polynomu stechiometrické rovnice...Polynomial degree

Změnit...Change

Zobrazit rovnici...Show equation (in the bottom window)

Zobrazit mezivýsledky...Show intermediate results (in the bottom window)

Some messages:

Výstupní rovnice bude změněna, chcete ji uložit?...Final equation will be changed, save?

Vyberte prosím vektor, který bude vyloučen z matice VT...Please, select the vector which will not be retained in the matrix VT (*try different vectors to see differences in final equations*)

Something more:

Example of a reacting mixture containing hydrogen, oxygen, and water:

Bez názvu.rtf - Stechiometrické rovnice

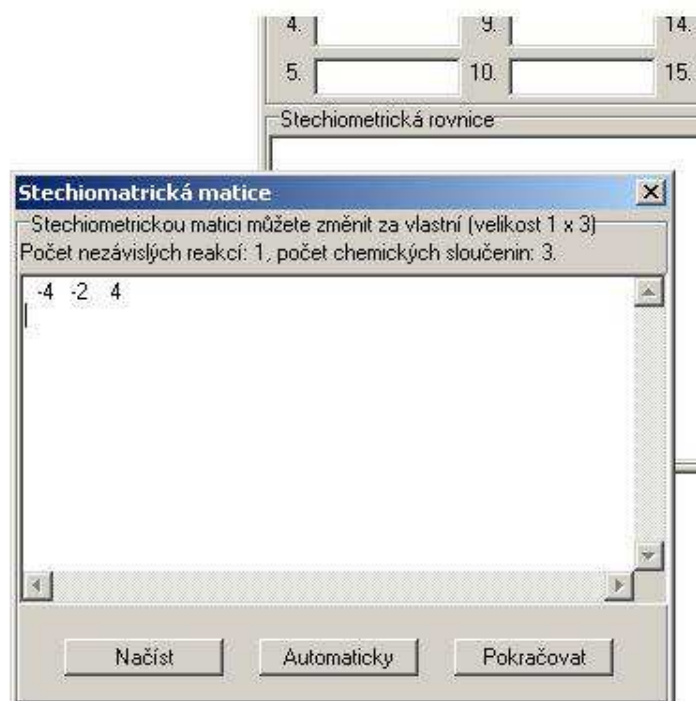
Soubor Výpočet Nápověda

Sloučeniny

1.	H2	6.		11.		16.	
2.	O2	7.		12.		17.	
3.	H2O	8.		13.		18.	
4.		9.		14.		19.	
5.		10.		15.		20.	

Stechiometrická rovnice

RAKTIN suggests a stoichiometric matrix – you can change it:



Stechiometrickou matici můžete změnit za vlastní (velikost 1x3)...Stoichiometric matrix can be changed (dimension 1x3)

Počet nezávislých reakcí...Number of independent reactions

počet chemických sloučenin...number of chemical compounds

Načíst...Read

Pokračovat...Continue

Example of final rate equation:

Bez názvu.rtf - Stechiometrické rovnice

Soubor Výpočet Nápověda

Sloučeniny

1. H2	6.	11.	16.
2. O2	7.	12.	17.
3. H2O	8.	13.	18.
4.	9.	14.	19.
5.	10.	15.	20.

Stechiometrická rovnice

$$J = k_{210}(a_1^2 a_2 - L_1^2 a_3^2)$$
$$L_1 = K_1^{-0.25}$$

a_i stands for concentrations (activities, generally), K_i is the equilibrium constant of independent reaction. Reaction scheme (mechanism, network) can be easily deduced from the rate equation.