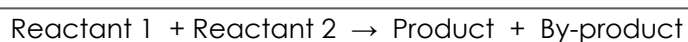


STAR permite encontrar las reacciones químicas en fase gas, que pueden dar origen a la formación de una molécula específica en el medio interestelar.

Para cada especie molecular que puede participar en las reacciones químicas, se lleva a cabo previamente un estudio teórico a nivel CBS-QB3, con el cual se obtuvieron los valores de Energía electrónica (Ee), Energía de punto cero E(ZPE), Entalpía (H) y Energía libre (G) y mediante los cuales se calcula la información termoquímica ΔG_R y ΔH_R de cada reacción.

Procedimiento de STAR para encontrar reacciones

Las reacciones químicas que encuentra STAR se forman mediante la combinación de especies moleculares presentes en el medio interestelar y que se están registradas en la base de datos de STAR, según la siguiente reacción:



Reactant 1: Primera molécula que participa en la reacción

Reactant 2: Segunda molécula que participa en la reacción

Product: Molécula para la cuál se desea conocer las reacciones que le pueden dar origen

By-product: Molécula compuesta por los átomos remanentes de la combinación de Reactant 1 y Reactant 2

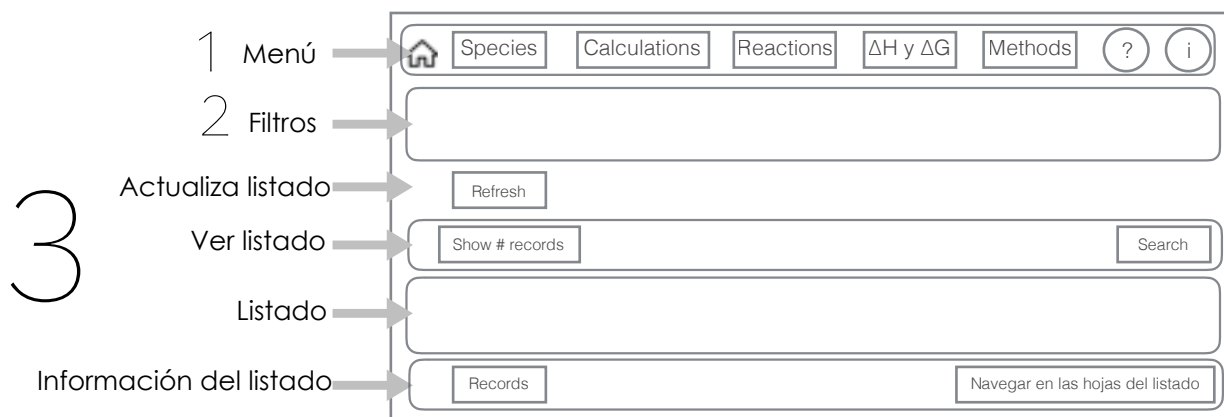
Notas

- En las reacciones químicas que encuentra STAR, puede o no existir la especie By-product (subproducto de reacción). El que exista o no By-product, puede ser por lo siguiente:
 1. Reactant 1 y Reactant 2 tiene el tipo y número de átomos exactos que completan la especie Product. En tal caso se muestra la abreviatura S/S en By-product, o
 2. Los átomos remanentes de la combinación de Reactant 1 y Reactant 2 no corresponde con ninguna de las especies químicas registradas en STAR. En tal caso By-product se muestra vacío.
- En las reacciones químicas que encuentra STAR, se puede excluir la participación de una especie registrada en la base de datos. En el caso en que se registren especies intermediarias de moléculas específicas y que no se desee que dicho intermediario participe al encontrar alguna especie para la que no es intermediario. La propiedad de que una especie sea intermediario, se asigna al [agregar una nueva molécula a la base de datos](#).














Descripción de las secciones de STAR

La vista de STAR esta formada por tres secciones principales:

1. Menú
2. Área de filtros
3. Área de listado

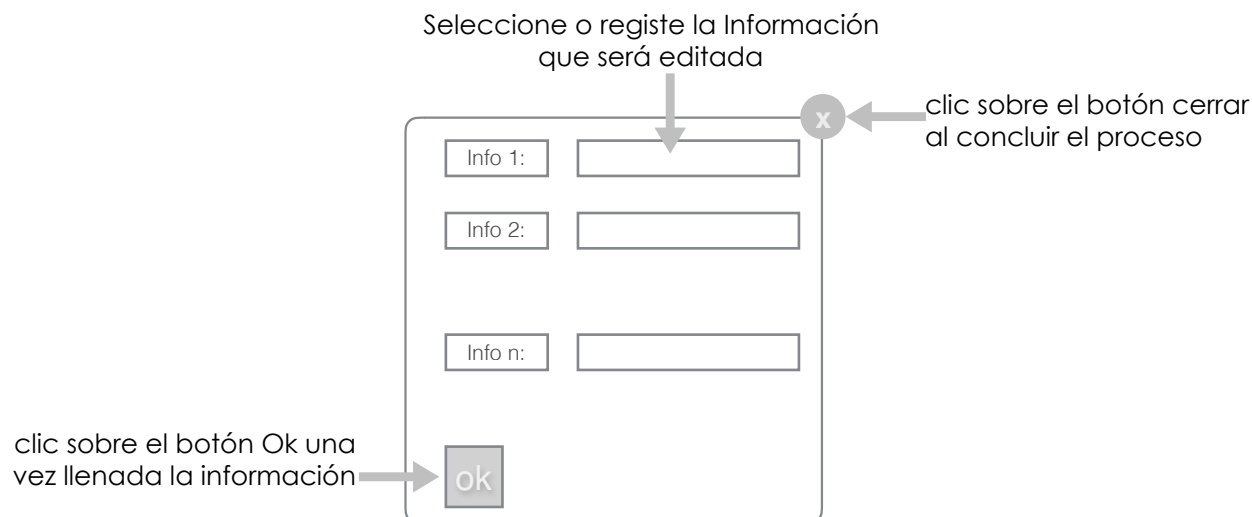


Descripción de los iconos

	Home. Muestra la pagina de inicio de STAR		Agrega un ítem del listado
	Muestra la interfaz de las moléculas registradas en la Base de datos		Elimina un ítem del listado
	Muestra la interfaz de los cálculos teóricos de las moléculas registrados en la base de datos		Modifica o edita un ítem del listado
	Muestra la interfaz de las reacciones que dan origen a una molécula registrada en la base de datos		 Actualiza los registros del listado
	Muestra la interfaz de los valores de ΔG_R y ΔH_R de las reacciones registrados en la base de datos		Realiza una búsqueda de texto en los registros del listado
	Muestra la interfaz de métodos de calculo teórico registrados en la base de datos.		Ayuda/Información acerca de STAR

Ventana de procesos

La ventana de procesos es la interfaz para llevar a cabo un procedimiento como agregar o editar ítems en la base de datos, las ventanas tienen la siguiente forma:






Ordenar la información en el área de listado

En cada interfaz de STAR, en la sección del área de listado, existe la utilidad de ordenar la información del listado en función del tipo de campo.

- Si el campo es alfabético, se podrá ordenar alfabéticamente dando clic sobre el encabezado de la columna en la lista.
- Si el campo es numérico, se podrá ordenar numéricamente en forma ascendente o descendente dando clic sobre el encabezado de la columna en la lista.

Obtener las reacciones que dan origen una molécula


Para obtener las reacciones químicas que dan origen a una molécula, siga los siguientes pasos:

1. Haga clic en el icono  del menú
2. Haga clic en icono  para actualizar el área de listado.
3. Haga clic en icono  para agregar el producto del cual desea obtener las reacciones.
4. En la [ventana de proceso](#) seleccione el producto del cual desea obtener las reacciones.
5. De clic sobre el botón OK para generar las reacciones
6. Cuando haya finalizado se muestra la leyenda "Reactions created successfully" (reacciones creadas con éxito). Entonces de clic en botón cerrar.

Se muestran en el área de listado las posibles reacciones que pueden dar origen al producto que se busca, (resultado de las combinaciones de Reactant 1 y Reactant 2)

Para ver las reacciones que encontró STAR y que pueden dar origen a una molécula, realice lo siguiente :

1. En el área de filtros, en Product seleccione la molécula para la cual desea conocer las reacciones que pueden dar origen (ésta será el Producto). El listado se actualiza automáticamente después de haber generado las reacciones.

En la interfaz  tiene posibilidad de limitar los criterios de búsqueda de reacciones utilizando los filtros:

By-product : si desea ver las reacciones con un subproducto específico

Reactant 1: si desea ver reacciones especificando el primer reactivo

Reactant 2: si desea ver reacciones especificando el segundo reactivo



#Atoms Reactant 1: si desea ver reacciones con un numero especifico de átomos en el primer reactivo


#Atoms Reactant 2: si desea ver reacciones con un numero especifico de átomos en el segundo reactivo

Si desea ver todas las posibles reacciones que dan origen al producto, en todos los filtro anteriores requiere estar seleccionado All (todos).

Información de los valores ΔG y ΔH de las reacciones que dan origen una molécula.




Para obtener las información de los valores ΔG y ΔH de las reacciones químicas, siga los siguientes pasos:

1. Haga clic en el icono  del menú.
2. En área de filtros seleccione la opción que corresponda en cada uno, según prefiera delimitar el criterio para visualizar las reacciones en el área de listado y los valores de ΔG y ΔH que les corresponden.
3. De clic sobre el ícono  para actualizar el listado según los criterios seleccionados en los filtros.

En la interfaz  se tiene posibilidad de limitar los criterios de búsqueda de reacciones utilizando los filtros:


Product: molécula de la cual se desea conocer las reacciones que le dan origen
By-product: si desea ver las reacciones con un subproducto específico
Reactant 1: si desea ver reacciones especificando el primer reactivo
Reactant 2: si desea ver reacciones especificando el segundo reactivo
#Atoms Reactant 1: si desea ver reacciones con un numero específico de átomos en el primer reactivo
#Atoms Reactant 2: si desea ver reacciones con un numero específico de átomos en el segundo reactivo
Intermediary reactant 1: En el caso en que participen intermediarios en las reacciones, éste cambien se podrá filtrar en la vista de las reacciones
Intermediary reactant 2:
Pressure: si desea ver reacciones que correspondan a una presión específica
Temperature: si desea ver reacciones que correspondan a una temperatura específica
Unit: seleccione la unidad en que desea ver los valores de ΔG y ΔH , puede ser kcal/mol o kJ/mol
Method: seleccione en método de calculo teórico en que corresponda a las moléculas en la reacción.

Agregar una nueva molécula a la base de datos (para que participe en las reacciones)




1. Haga clic en el icono  del menú
2. Haga clic en icono  para actualizar el área de listado.
3. Haga clic en icono  para agregar una nueva molécula que puede participar en las reacciones (la molécula podrá participar como Reactant 1, Reactant 2, Product o By-product)
4. En la [ventana de proceso](#) registre la nueva especie y la información asociada en cada campo de la ventana (# de átomos, carga y multiplicidad, si puede ser reactivo y si es intermediario).
5. De clic sobre el botón OK para guardar la información.
6. Cuando haya finalizado se muestra la leyenda **NULL** (). Entonces de clic en botón cerrar.

Vea la nueva molécula en la base de datos, utilizando los filtros:

#Atoms: si desea ver especies con un numero específico de átomos
Reactant: si desea ver especies que pueden participar en las reacciones como reactivos
Intermediary: si desea ver especies que participan en las reacciones pero tiene la particularidad de ser intermediarios
Charge: si desea ver especies con una determinada carga
Multiplicity: si desea ver especies con una determinada multiplicidad

7. De clic sobre el ícono  para actualizar el listado según los criterios seleccionados en los filtros.

Agregar la información del cálculo teórico de una molécula a la Base de datos

1. Haga clic en el icono  del menú
2. Haga clic en icono  para actualizar el área de listado.
3. Haga clic en icono  para agregar la información del cálculo teórico de una molécula
4. En la [ventana de proceso](#) registre la información del cálculo teórico en cada campo de la ventana (**carga, multiplicidad, esta info decreta de traerla de especies**, temperatura [K], presión [atm], método de cálculo,....)

5. De clic sobre el botón OK para guardar la información.
6. Cuando haya finalizado se muestra la leyenda **NULL** (). Entonces de clic en botón cerrar.

Vea la información del cálculo teórico en la base de datos, utilizando los filtros:

Specie: si desea ver la información teórica de una molécula específica.


Charge: si desea ver la información teórica de una especie con una determinada carga

Multiplicity: si desea ver la información teórica de una especie con una determinada multiplicidad

Pressure: si desea ver la información teórica que correspondan a una presión específica

Temperature: si desea ver la información teórica que correspondan a una temperatura específica

Method: seleccione en método de calculo teórico en que corresponda a las moléculas en la reacción.

7. De clic sobre el ícono  para actualizar el listado según los criterios seleccionados en los filtros.