El proyecto GCYDEX se centra en el estudio teórico y computacional de las **superficies de energía potencial** en sistemas moleculares poliatómicos. Estas superficies describen cómo varía la energía del sistema en función de las posiciones relativas de los átomos, siendo fundamentales para entender la estructura, reactividad y dinámica molecular.

A través de métodos avanzados de simulación y análisis, se investigan los **procesos cinéticos** y **dinámicos** que ocurren en estos sistemas, tales como reacciones químicas, transiciones de fase y movimientos moleculares complejos, para predecir su comportamiento y propiedades.

Objetivos principales:

- 1. Construir y analizar superficies de energía potencial precisas para sistemas con múltiples átomos.
- 2. Estudiar la cinética molecular y los mecanismos dinámicos que regulan las transformaciones y reacciones.
- 3. Desarrollar modelos teóricos y simulaciones para comprender el comportamiento molecular a nivel atómico.
- 4. Aplicar estos estudios para mejorar la interpretación de fenómenos físicos y químicos en sistemas poliatómicos.