

## **Proyecto de Estancia de Verano 2025 (Grupo de la Dra. Patrizia Calaminici)**

### **Título del proyecto: Búsqueda de estados de transición no intuitivos en mecanismos de reacciones complejas**

La ubicación de los estados de transición es crucial para el estudio de las reacciones químicas. Si bien en reacciones simples las estructuras iniciales intuitivas para la optimización de los estados de transición pueden ser muy eficaces, este enfoque no es efectivo en reacciones más complejas, propias de la catálisis homogénea y heterogénea. En esta estancia de verano los candidatos interesados se enfocarán al estudio teórico de varios mecanismos de reacción complejos para los cuales los estados de transición no son intuitivos. Las reacciones de interés serán seleccionadas considerando distintos parámetros. El estudio se llevará a cabo usando nuevos algoritmos que hemos desarrollado e implementado recientemente en el código deMon2k (para más información dirigirse a la siguiente liga: [http://www.demon-software.com/public\\_html/index.html](http://www.demon-software.com/public_html/index.html)).