

Comparativa [Gaussian 03](#) / [Gamess versión Sep. 7 2006 R4](#) / [NWChem 5.0](#) :
Métodos y modelos implementados

- [Algoritmos fundamentales](#)
- [Energías](#)
- [Gradientes y optimizaciones de geometría](#)
- [Frecuencias y segundas derivadas](#)
- [Propiedades Moleculares](#)
- [Modelos de Solvatación](#)

Algoritmos fundamentales	Gaussian 03	<ul style="list-style-type: none"> • Cálculo de integrales mono- y bi-electrónicas sobre funciones gaussianas generales contraídas. El coste computacional puede linealizarse para ciertas clases de cálculos mediante el método FMM (fast multipole method) y técnicas de matrices "Sparse". • Algoritmos para el cálculo de las integrales moleculares a partir de las atómicas "in-core" (almacenamiento de las integrales atómicas en memoria), "directo" (las integrales se recalculan según se necesitan), "semi-directo" (se almacenan parte de las integrales en disco) y "convencional" (todas las integrales atómicas se almacenan en disco). • Uso de ajustes en la densidad para acelerar la parte de Coulomb de los cálculos DFT puros. • Cuadratura numérica en cálculos de energías DFT XC y sus derivadas.
	Gamess versión Sep. 7 2006 R4	<ul style="list-style-type: none"> • Implementa todos los cálculos electrónicos basados en el método FMO (Fragment Molecular Orbital). El método FMO permite el uso de muchos de los métodos implementados en Gamess en sistemas muy grandes dividiendo el cálculo en fragmentos pequeños. • Muchos de los cálculos se pueden llevar a cabo en paralelo. • Algoritmos para el cálculo de las integrales moleculares a partir de las atómicas "in-core" (almacenamiento de las integrales atómicas en memoria), "directo" (las integrales se recalculan según se necesitan) y "convencional" (todas las integrales atómicas se almacenan en disco).
	NWChem 5.0	<ul style="list-style-type: none"> • Especialmente diseñado para su ejecución en supercomputadores de alto rendimiento masivamente paralelos. • Permite un gran escalado en casos de sistemas químicos grandes. • Algoritmos para el cálculo de las integrales moleculares a partir de las atómicas "in-core" (almacenamiento de las integrales atómicas en memoria), "directo" (las integrales se recalculan según se necesitan) y "semi-directo" (se almacenan parte de las integrales en disco).

Energías		
Gaussian 03	Gamess versión Sep. 7 2006 R4	NWChem 5.0
<ul style="list-style-type: none"> • Cálculos de "Molecular mechanics" usando los campos de fuerza AMBER, DREIDING y UFF. 	<ul style="list-style-type: none"> • Cálculos de "Molecular mechanics" mediante su interoperabilidad con Tinker 	<ul style="list-style-type: none"> • Cálculos de "Molecular mechanics" usando potenciales de par efectivo AMBER, GROMOS, CHARM ...
<ul style="list-style-type: none"> • Cálculos semi-empíricos usando los Hamiltonianos modelo CNDO, INDO, MINDO/3, MNDO, AM1, y PM3. 	<ul style="list-style-type: none"> • Cálculos semi-empíricos usando los Hamiltonianos modelo MNDO, AM1, y PM3. 	
<ul style="list-style-type: none"> • Cálculos SCF usando funciones de onda Hartree-Fock "closed-shell" (RHF), "unrestricted open-shell" (UHF), y "restricted open-shell" (ROHF). 	<ul style="list-style-type: none"> • Cálculos SCF usando funciones de onda Hartree-Fock "closed-shell" (RHF), "unrestricted open-shell" (UHF), y "restricted open-shell" (ROHF). 	<ul style="list-style-type: none"> • Self Consistent Field (SCF) o Hartree Fock (RHF, UHF).
<ul style="list-style-type: none"> • Cálculos de energía de correlación usando teoría de perturbaciones Møller-Plesset hasta quinto orden (MP2, MP3, MP4 y MP5). 	<ul style="list-style-type: none"> • Cálculos de energía de correlación usando teoría de perturbaciones Møller-Plesset (MP2). 	<ul style="list-style-type: none"> • Cálculos de energía de correlación usando teoría de perturbaciones Møller-Plesset (MP2) y "Resolution of the identity integral approximation MP2" (RI-MP2). Non-canonical UMP2, UMP3 y UMP4.
<ul style="list-style-type: none"> • Cálculos de energía de correlación usando usando interacción de configuraciones (CI) con todas las excitaciones dobles (CID) o con todas las dobles y simples (CISD). 	<ul style="list-style-type: none"> • Cálculos de energía de correlación usando usando interacción de configuraciones (CI) o "multi-reference" (MRCI). 	<ul style="list-style-type: none"> • Interacción de configuraciones: CI con corrección de perturbación de segundo orden.
<ul style="list-style-type: none"> • Teoría de "Coupled cluster" con sustituciones dobles (CCD), con simples y dobles (CCSD), Interacción de configuraciones cuadrática usando sustituciones simples y dobles, y teoría de los dobles de Brueckner (BD). También se puede calcular una contribución no-iterativa de los triples así como de los cuádruples para QCISD y BD. 	<ul style="list-style-type: none"> • Teoría de "Coupled cluster" (CC): Los programas CC programs incorporados en GAMESS permiten cálculos del convencional LCCD, CCD, CCSD, CCSD[T] (también conocido como CCSD+T(CCSD)), CCSD(T), y CCSD(TQ), "renormalized" (R) y "completely renormalized" (CR) CCSD[T], CCSD(T), y CCSD(TQ), y también de la aproximación para capa cerrada RHF "rigorously size extensive completely renormalized" CR-CC(2,3) (o CR-CCSD(T)L). 	<ul style="list-style-type: none"> • Teoría de "Coupled cluster" (CC): CCSD, CCSD(T), CCSD+T(CCSD). CCSD(T) y CCSD[T] para sistemas tanto de capa abierta como cerrada. Aproximaciones "Completely and locally renormalized coupled cluster". UCCD, ULCCD, UCCSD, ULCCSD, UQCISD, UCCSDT y UCCSDTQ. UCISD, UCISDT y UCISDTQ.
<ul style="list-style-type: none"> • Teoría de la Densidad de la funcional (DFT), incluyendo la forma general, métodos híbridos de HF y DFT configurables por el usuario 	<ul style="list-style-type: none"> • Teoría de la Densidad de la funcional (DFT) de forma general. 	<ul style="list-style-type: none"> • Gaussian Density Functional Theory (DFT) y Spin-orbit DFT (SODFT). Amplio esquema de funcionales de correlación e intercambio.
<ul style="list-style-type: none"> • Métodos para la energía de alta precisión: Teoría G1, G2, G2(MP2), G3, G3(MP2), y otras variantes; métodos de base completa (CBS): CBS-4, CBS-q, CBS-Q, CBS-Q//B3, y CBS- 		

<p>QC1/APNO, así como extrapolación CBS general; el método W1 de Martin.</p>		
<ul style="list-style-type: none"> • MCSCF general, incluyendo espacio activo completo (CASSCF) con la inclusión opcional de correlación MP2. La variante RASSCF también está soportada 	<ul style="list-style-type: none"> • MCSCF general incluyendo CASSCF (complete active space self-consistent field) o FORS (fully optimized reaction space). Opcionalmente puede ser ampliado por el método MCQDPT(CASSCF - MRMP2). También se ha implementado la variante ORMAS (Occupation Restricted Multiple Active Space). 	<ul style="list-style-type: none"> • MCSCF: Complete active space SCF (CASSCF).
<ul style="list-style-type: none"> • El método SCF "Generalized Valence Bond-Perfect Pairing" (GVB-PP). 	<ul style="list-style-type: none"> • El método SCF "Generalized Valence Bond" (GVB). 	
<ul style="list-style-type: none"> • Energías de estados excitados usando configuración de interacciones simples (CI-Singles), el método "time-dependent" para HF y DFT, el método semiempírico ZINDO, y método de Nakatsuji y colaboradores de "Symmetry Adapted Cluster/Configuration Interaction" (SAC-CI). 	<ul style="list-style-type: none"> • Energías de estados excitados: El método "equation of motion coupled cluster" (EOMCC) es una extensión muy útil del método CC para el estado fundamental a estados excitados. 	<ul style="list-style-type: none"> • Energías de estados excitados: CIS, TDHF, TDDFT, y Tamm-Dancoff TDDFT. EOM-CCSD, EOM-CCSDT, EOM-CCSDTQ para el cálculo de energías de excitación, momentos de transición y momento dipolar del estado excitado tanto para sistemas de capa abierta como cerrada. CCSD, CCSDT, CCSDTQ para el cálculo de momentos dipolares tanto para sistemas de capa abierta como cerrada.
	<ul style="list-style-type: none"> • Efectos relativistas: Correcciones escalares via transformaciones Douglas-Kroll de tercer orden con gradientes disponibles. Evaluación de elemento de matriz con acoplamiento spin-orbita y las resultantes funciones de onda con mezcla de spin. 	<ul style="list-style-type: none"> • Efectos relativistas: Aproximación Douglas-Kroll (spin-free one-electron) para todos los métodos. Aproximación Dirac Hamiltonian modificada por Dyalls (spin-free). Potenciales spin-orbita para métodos DFT y gradientes sin simetría.
		<ul style="list-style-type: none"> • Cálculos de estructura electrónica con pseudopotenciales y onda plana: Dinámica Molecular ab initio usando pseudopotenciales y métodos DFT de onda plana.

Gradientes y optimizaciones de geometría

Gaussian 03	Gamess versión Sep. 7 2006 R4	NWChem 5.0
<ul style="list-style-type: none"> • Gradientes analíticos de los métodos RHF, UHF, ROHF, GVB-PP, CASSCF, MP2, MP3, MP4(SDQ), CID, CISD, CCD, CCSD, QCISD, funcional de densidad, y energías de estado excitado CIS. 	<ul style="list-style-type: none"> • Gradiente de energía analítico: RHF, ROHF, UHF, MCSCF, CI, MP2, UMP2, DFT. Gradiente numérico para todos los métodos. 	<ul style="list-style-type: none"> • Gradiente de energía analítico: Self Consistent Field (SCF) o Hartree Fock (ROHF), Gaussian Density Functional Theory (DFT), Spin-orbit DFT (SODFT), MP2, Complete active space SCF (CASSCF). Gradiente numérico para todos los métodos.
<ul style="list-style-type: none"> • Optimización geométrica de mínimos y "saddle points" usando coordenadas internas o cartesianas o una mezcla de ellas. Búsqueda automatizada del estado de transición usando métodos quasi-Newton. 	<ul style="list-style-type: none"> • Optimización geométrica de mínimos y "saddle points" usando coordenadas internas o cartesianas. Búsquedas quasi-Newton. 	<ul style="list-style-type: none"> • Optimización geométrica de mínimos y estados de transición.
<ul style="list-style-type: none"> • Cálculo del camino de reacción mediante "intrinsic reaction coordinate" (IRC). 	<ul style="list-style-type: none"> • Cálculo del camino de reacción mediante "intrinsic reaction coordinate" (IRC). "Mode following". "Gradient Extremals". 	
	<ul style="list-style-type: none"> • "Monte Carlo sampling": Búsqueda de mínimos globales. 	
<ul style="list-style-type: none"> • Cálculos de dos o tres capas ONIOM para energías y optimizaciones geométricas. 	<ul style="list-style-type: none"> • Effective-Fragmentation-Method for large molecule calculation 	<ul style="list-style-type: none"> • Método híbrido ONIOM de Morokuma y colaboradores.
<ul style="list-style-type: none"> • Cálculo de intersecciones cónicas mediante "state-averaged" CASSCF. 		
<ul style="list-style-type: none"> • Cálculo de trayectorias clásicas usando: Born Oppenheimer molecular dynamics (BOMD). • Propagación de los grados de libertad electrónicos mediante "Atom Centered Density Matrix Propagation" (ADMP), modelo de propagación de dinámica molecular. (métodos AM1, HF, y DFT). 	<ul style="list-style-type: none"> • "Dynamic reaction coordinate" (DRC): Trayectorias clásicas usando energías QM. • Métodos QM/MM: <ol style="list-style-type: none"> 1. Método "Effective fragment potential" (EFP) para: estudios de clusters en líquidos, estudios de efectos del disolvente, posibilidad de métodos continuos para el estudio de líquidos y solvatación, posibilidad de estudios de enzimas, proteínas, materiales... 2. SIMOMM: Método QM/MM para química de superficies: La parte QM puede ser cualquier método implementado en GAMESS y la parte MM procede de Tinker 	<ul style="list-style-type: none"> • Dinámica molecular sobre la superficie de energía potencial ab initio completa. • Simulación molecular clásica: Energía de una configuración, minimización de la energía, simulaciones de dinámica molecular, cálculos de energía libre ("multistep thermodynamic perturbation" (MSTP) o "multiconfiguration thermodynamic integration" (MCTI)), Q-HOP en dinámica molecular. • Campos de fuerza clásicos: Potenciales de par efectivo (forma funcional usada en AMBER, GROMOS, CHARMM, etc.), polarización de primer orden, polarización auto-consistente, "Smooth particle mesh Ewald (SPME)", evaluación de fuerzas, condiciones de frontera periódicas, relajación de

		restricciones, cálculos de temperatura y presión.
		<ul style="list-style-type: none"> Combinación de descripciones clásicas y cuánticas: Minimizaciones y simulaciones de dinámica molecular QM/MM, simulaciones de dinámica molecular cuántica con todos los métodos con cálculo de gradientes. Mediante el módulo DIRDYVTST es posible la obtención de un fichero de input para POLYRATE, el cual permite el cálculo de constantes de velocidad mediante teoría del estado de transición.

Frecuencias y segundas derivadas		
Gaussian 03	Gamess versión Sep. 7 2006 R4	NWChem 5.0
<ul style="list-style-type: none"> Cálculo analítico de constantes de fuerza, polarizabilidades, hiperpolarizabilidades y derivadas del dipolo para los métodos RHF, UHF, DFT, RMP2, UMP2 y CASSCF, y para estados excitados usando CIS. Mediante diferenciación numérica para los métodos MP3, MP4(SDQ), CID, CISD, CCD y QCISD. 	<ul style="list-style-type: none"> Hessiano analítico: RHF, ROHF, TCSCF/GVB, MCSCF. Hessiano numérico para todos los métodos. Cálculo analítico de constantes de fuerza para los métodos RHF, ROHF, TCSCF/GVB, MCSCF y mediante diferenciación numérica para el resto de métodos. Polarizabilidades, hiperpolarizabilidades para todos los métodos de forma numérica. Para funciones SCF, CI y algunos casos MP2 se usa la diferenciación de los momentos dipolares. 	<ul style="list-style-type: none"> Hessiano analítico: Self Consistent Field (SCF) o Hartree Fock (RHF, UHF), Gaussian Density Functional Theory (DFT). Hessiano numérico para todos los métodos. Cálculo analítico de constantes de fuerza para los métodos Self Consistent Field (SCF) o Hartree Fock (RHF, UHF), Gaussian Density Functional Theory (DFT) y mediante diferenciación numérica para el resto de métodos.
<ul style="list-style-type: none"> Análisis vibracional armónico y análisis termoquímico usando isótopos arbitrarios, temperatura y presión. Análisis de modos normales en coordenadas internas. 	<ul style="list-style-type: none"> Análisis vibracional armónico 	<ul style="list-style-type: none"> Análisis de modos normales de vibración en coordenadas cartesianas.
<ul style="list-style-type: none"> Cálculo de intensidades de IR y Raman para transiciones vibracionales. Cálculos de dos o tres capas ONIOM para energías y optimizaciones geométricas. 	<ul style="list-style-type: none"> Intensidades IR y Raman Effective-Fragmentation-Method for large molecule calculation 	<ul style="list-style-type: none"> Método híbrido ONIOM de Morokuma y colaboradores.
<ul style="list-style-type: none"> Cálculo del acoplamiento armónico vibración-rotación. Cálculos anarmónicos para vibración y acoplamiento armónico vibración-rotación para los métodos con segundas derivadas analíticas disponibles. 		

Propiedades Moleculares		
Gaussian 03	Gamess versión Sep. 7 2006 R4	NWChem 5.0
<ul style="list-style-type: none"> • Cálculo de varias propiedades monoeléctricas usando los métodos SCF, DFT, MP2, CI, CCD y QCISD incluyendo análisis de población de Mulliken, momentos multipolo, análisis de población natural, potenciales electroestáticos y cálculo de cargas usando esquemas Merz-Kollman-Singh, CHelp o CHelpG. 	<ul style="list-style-type: none"> • Cálculo de varias propiedades: momentos multipolo, análisis de multipolo distribuido de Stone, potenciales electroestáticos, campo eléctrico y su gradiente, análisis de población de Mulliken y Lowdin. 	<ul style="list-style-type: none"> • Evaluación de propiedades monoeléctricas estáticas. Cálculos de cargas mediante ajuste del potencial electroestático (método CHELPG). Generación del fichero de densidad electrónica para la obtención de gráficos.
<ul style="list-style-type: none"> • Tensores de apantallamiento RMN y susceptibilidades magnéticas usando métodos SCF, DFT y MP2. 	<ul style="list-style-type: none"> • Desplazamientos RMN 	<ul style="list-style-type: none"> • Análisis de modos normales de vibración en coordenadas cartesianas.
<ul style="list-style-type: none"> • Cálculo de intensidades de IR y Raman para transiciones vibracionales. 	<ul style="list-style-type: none"> • Intensidades IR y Raman 	
	<ul style="list-style-type: none"> • Herramientas interpretativas: <ol style="list-style-type: none"> 1. "Localized molecular orbitals" (LMO) 2. "Localized charge distributions" (LCD) 	
<ul style="list-style-type: none"> • Intensidades de "Vibrational circular dichroism" (VCD) y actividad óptica Raman. 		
<ul style="list-style-type: none"> • Afinidades electrónicas y potenciales de ionización. 		
<ul style="list-style-type: none"> • Acoplamiento spin-orbita aproximado entre dos estados de spin en cálculos CASSCF 		
<ul style="list-style-type: none"> • "Electronic circular dichroism". 		
<ul style="list-style-type: none"> • Rotación óptica via GIAOs. 		
<ul style="list-style-type: none"> • Estructura hiperfina en espectros: tensores g, constantes cuadrupolo nuclear eléctrico, constantes rotacionales, Términos de distorsión centrífuga, términos de spin de rotación electrónica, términos de spin de rotación nuclear, términos hiperfinos dipolares y términos de contacto de Fermi. 		
	<ul style="list-style-type: none"> • Densidades de spin en núcleos (ESR). Probabilidades de transición, solapamientos de Franck-Condon 	
	<ul style="list-style-type: none"> • Teorema de Virial y componentes energéticos. 	

Modelos de Solvatación

Gaussian 03	Gamess versión Sep. 7 2006 R4	NWChem 5.0
<ul style="list-style-type: none"> • Todos los métodos emplean la metodología "self-consistent reaction field" (SCRf) para el modelado de sistemas en solución. • Modelo Onsager (dipolo y esfera), incluyendo primeras y segundas derivadas analíticas a niveles HF y DFT, y energías a niveles MP2, MP3, MP4(SDQ), CI, CCD y QCISD. • Modelo PCM (Polarized Continuum Model) de Tomasi y colaboradores para energías HF, DFT, MP2, MP3, MP4(SDQ), QCISD, CCD, CCSD, CID y CISD y para gradientes y frecuencias HF y DFT. <ul style="list-style-type: none"> • Se pueden hacer cálculos de efectos del disolvente para estados excitados. • Modelo IPCM para energía a niveles HF y DFT. • Modelo SCI-PCM ("self-consistent isodensity surface") para energía, gradientes y frecuencias numéricas a niveles HF y DFT. 	<ul style="list-style-type: none"> • Modelo SCRf ("Self Consistent Reaction Field"): energías y gradientes RHF, UHF, ROHF, GVB y MCSCF. • Modelo de cavidad esférica Kirkwood-Onsager. Este método está implementado para funciones de onda RHF, UHF, ROHF, GVB y MCSCF y gradientes. • Modelo PCM ("Polarizable Continuum Model"): energías y gradientes RHF, ROHF, UHF, GVB y MCSCF y sus correspondientes DFT. • Modelos SVPE ("Surface Volume Polarization for Electrostatics") y SS(V)PE("the Surface and Simulation of Volume Polarization for Electrostatics"): energías RHF, UHF, ROHF, GVB y MCSCF. • Modelo COSMO ("Conductor-like screening model"): Energías y gradientes para RHF y MP2 de capa cerrada 	<ul style="list-style-type: none"> • Modelo COSMO ("Conductor-like screening model"): Para métodos SCF y DFT de capa abierta y cerrada.