

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

<b>Energías</b>		
Gaussian 03	Gamess versión Sep. 7 2006 R4	NWChem 5.0
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Cálculos de <b>"Molecular mechanics"</b> usando los campos de fuerza AMBER, DREIDING y UFF.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Cálculos de <b>"Molecular mechanics"</b> mediante su interoperabilidad con Tinker</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Cálculos de <b>"Molecular mechanics"</b> usando potenciales de par efectivo AMBER, GROMOS, CHARM ...</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Cálculos semi-empíricos</b> usando los Hamiltonianos modelo CNDO, INDO, MINDO/3, MNDO, AM1, y PM3.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Cálculos semi-empíricos</b> usando los Hamiltonianos modelo MNDO, AM1, y PM3.</li> </ul>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Cálculos SCF</b> usando funciones de onda Hartree-Fock "closed-shell" (RHF), "unrestricted open-shell" (UHF), y "restricted open-shell" (ROHF).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Cálculos SCF</b> usando funciones de onda Hartree-Fock "closed-shell" (RHF), "unrestricted open-shell" (UHF), y "restricted open-shell" (ROHF).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Self Consistent Field (SCF) o Hartree Fock (RHF, UHF).</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Cálculos de energía de correlación</b> usando <b>teoría de perturbaciones</b> Møller-Plesset hasta quinto orden (MP2, MP3, MP4 y MP5).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Cálculos de energía de correlación</b> usando <b>teoría de perturbaciones</b> Møller-Plesset (MP2).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Cálculos de energía de correlación</b> usando <b>teoría de perturbaciones</b> Møller-Plesset (MP2) y "Resolution of the identity integral approximation MP2" (RI-MP2). Non-canonical UMP2, UMP3 y UMP4.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Cálculos de <b>energía de correlación</b> usando usando <b>interacción de configuraciones</b> (CI) con todas las excitaciones dobles (CID) o con todas las dobles y simples (CISD).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Cálculos de <b>energía de correlación</b> usando usando <b>interacción de configuraciones</b> (CI) o "multi-reference" (MRCI).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Interacción de configuraciones:</b> CI con corrección de perturbación de segundo orden.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Teoría de <b>"Coupled cluster"</b> 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.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Teoría de <b>"Coupled cluster"</b> (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).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Teoría de <b>"Coupled cluster"</b> (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.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Teoría de la Densidad de la funcional (DFT), incluyendo la forma general, métodos híbridos de HF y DFT configurables por el usuario</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Teoría de la Densidad de la funcional (DFT) de forma general.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Gaussian Density Functional Theory (DFT) y Spin-orbit DFT (SODFT). Amplio esquema de funcionales de correlación e intercambio.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Métodos para la <b>energía de alta precisión:</b> 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-</li> </ul>		

<p>OCI/APNO, así como extrapolación CBS general; el método W1 de Martin.</p>		
<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>MCSCF</b> general, incluyendo espacio activo completo (CASSCF) con la inclusión opcional de correlación MP2. La variante RASSCF también está soportada</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>MCSCF</b> 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).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>MCSCF</b>: Complete active space SCF (CASSCF).</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• El método SCF "<b>Generalized Valence Bond-Perfect Pairing</b>" (GVB-PP).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• El método SCF "<b>Generalized Valence Bond</b>" (GVB).</li> </ul>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Energías de estados excitados</b> 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).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Energías de estados excitados</b>: El método "equation of motion coupled cluster" (EOMCC) es una extensión muy útil del método CC para el estado fundamental a estados excitados.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Energías de estados excitados</b>: 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.</li> </ul>
	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Efectos relativistas</b>: 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.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Efectos relativistas</b>: 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.</li> </ul>
		<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Cálculos de estructura electrónica con pseudopotenciales y onda plana</b>: Dinámica Molecular ab initio usando pseudopotenciales y métodos DFT de onda plana.</li> </ul>

## Gradientes y optimizaciones de geometría

Gaussian 03	Gamess versión Sep. 7 2006 R4	NWChem 5.0
<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Gradientes analíticos</b> 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.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Gradiente</b> de energía <b>analítico</b>: RHF, ROHF, UHF, MCSCF, CI, MP2, UMP2, DFT. Gradiente numérico para todos los métodos.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Gradiente</b> de energía <b>analítico</b>: 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.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Optimización geométrica de mínimos y "saddle points"</b> usando coordenadas internas o cartesianas o una mezcla de ellas. Búsqueda automatizada del <b>estado de transición</b> usando métodos quasi-Newton.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Optimización geométrica de mínimos y "saddle points"</b> usando coordenadas internas o cartesianas. Búsquedas quasi-Newton.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Optimización geométrica de mínimos y estados de transición.</b></li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Cálculo del camino de reacción mediante "intrinsic reaction coordinate" (<b>IRC</b>).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Cálculo del camino de reacción mediante "intrinsic reaction coordinate" (<b>IRC</b>). "Mode following". "Gradient Extremals".</li> </ul>	
	<ul style="list-style-type: none"> <li>• "Monte Carlo sampling": <b>Búsqueda de mínimos globales.</b></li> </ul>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Cálculos de dos o tres capas <b>ONIOM para energías y optimizaciones geométricas.</b></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Effective-Fragmentation-Method</b> for large molecule calculation</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Método híbrido <b>ONIOM</b> de Morokuma y colaboradores.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Cálculo de <b>intersecciones cónicas</b> mediante "state-averaged" CASSCF.</li> </ul>		
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Cálculo de <b>trayectorias clásicas</b> usando: Born Oppenheimer molecular dynamics (BOMD).</li> <li>• Propagación de los grados de libertad electrónicos mediante "Atom Centered Density Matrix Propagation" (ADMP), modelo de propagación de <b>dinámica molecular</b>. (métodos AM1, HF, y DFT).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• "Dynamic reaction coordinate" (DRC): <b>Trayectorias clásicas</b> usando energías QM.</li> <li>• Métodos <b>QM/MM</b>: <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Método "Effective fragment potential" (EFP) para: estudios de <b>clusters en líquidos</b>, estudios de efectos del <b>disolvente</b>, posibilidad de métodos continuos para el estudio de líquidos y solvatación, posibilidad de estudios de enzimas, proteínas, materiales...</li> <li>2. <b>SIMOMM</b>: Método QM/MM para química de superficies: La parte QM puede ser cualquier método implementado en GAMESS y la parte MM procede de Tinker</li> </ol> </li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Dinámica molecular</b> sobre la superficie de energía potencial ab initio completa.</li> <li>• <b>Simulación molecular clásica</b>: 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.</li> <li>• Campos de fuerza clásicos: <b>Potenciales de par efectivo</b> (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</li> </ul>

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

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

## Propiedades Moleculares

### Gaussian 03

### Gamess versión Sep. 7 2006 R4

### NWChem 5.0

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

### Modelos de Solvatación

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