

La **química computacional** es una rama de la química que utiliza **modelos matemáticos y simulaciones por ordenador** para estudiar y predecir el comportamiento de moléculas y sistemas químicos.

En lugar de realizar experimentos en un laboratorio, los químicos computacionales usan **algoritmos, teoría cuántica, mecánica clásica** y poder de cálculo para resolver problemas relacionados con la estructura, reactividad, propiedades y dinámica de las sustancias químicas.

La química computacional es esencial en muchas áreas, incluyendo:

- **Diseño de nuevos fármacos** (drug discovery).
- **Estudio de reacciones químicas complejas**, donde los experimentos son costosos o peligrosos.
- **Predicción de propiedades físicas y químicas** (como espectros IR, UV, NMR, energía de ionización, solubilidad).
- **Simulación de materiales y catalizadores**.
- **Estudio de interacciones moleculares** (como enlaces de hidrógeno o fuerzas de Van der Waals).
- **Química teórica**, para validar modelos fundamentales de la materia.

Hay varios niveles de aproximación, que se eligen según el equilibrio entre precisión y coste computacional:

1. *Mecánica cuántica (ab initio y DFT)*

- Usa principios de la mecánica cuántica (ecuación de Schrödinger) para modelar electrones y enlaces químicos.
- Métodos comunes:
 - **Hartree-Fock (HF)**
 - **Métodos post-HF** (MP2, CCSD, etc.)
 - **DFT (Teoría del Funcional de la Densidad)** – el más usado por su eficiencia.

2. *Mecánica molecular*

- Usa modelos clásicos (campos de fuerza) para simular sistemas grandes como proteínas o polímeros.
- Ejemplos: AMBER, CHARMM, GROMOS.

3. *Métodos híbridos (QM/MM)*

- Combinan mecánica cuántica (QM) para la región activa de una molécula y mecánica molecular (MM) para el entorno. Muy útil en **bioquímica** y **catálisis**.