

Introducción a la química computacional mediante MOPAC: una estrategia práctica para estudiantes de licenciatura

Marisol Ibarra Rodríguez,^{a*} Luz Ibarra Rodríguez,^b Mario Sánchez^b

^aFacultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Nuevo León, San Nicolas de los Garza, Monterrey, México.

^bCentro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C., Alianza Norte 202, PIIT, Carretera Monterrey-Aeropuerto Km. 10, C. P. 66628 Apodaca, Nuevo León, México

Cite this: *Chem. Sci. Technol.* **2026**, 000006

Received: August 17, 2026

*Email: mibarod_22@hotmail.com

Accepted: August 21, 2026

Published: August 24, 2026

RESUMEN

Las herramientas computacionales en la formación de estudiantes de licenciatura representan una oportunidad para fortalecer la comprensión de conceptos relacionados con la estructura molecular, energía, enlace químico y propiedades electrónicas de moléculas orgánicas e inorgánicas. En este escrito se propone el uso del programa MOPAC (Molecular Orbital PACKage) como recurso didáctico para introducir a los estudiantes en los fundamentos de la química computacional. MOPAC emplea métodos semiempíricos que permiten estudiar estructuras moleculares y obtener información sobre propiedades energéticas, geométricas y electrónicas con un costo computacional reducido. Una ventaja destacada es que el programa es gratuito para uso académico. La estrategia incluye sesiones introductorias sobre química computacional, capacitación en el uso del software y ejercicios prácticos de construcción, optimización y análisis de moléculas sencillas. Los estudiantes comparan estructuras iniciales y optimizadas, analizan longitudes y ángulos de enlace, energías moleculares y propiedades electrónicas, vinculando los resultados con conceptos de química general, inorgánica, orgánica y fisicoquímica.

PALABRAS CLAVE

Química computacional; MOPAC; educación química; modelado molecular; química cuántica; licenciatura.

INTRODUCCIÓN

La química computacional es una herramienta complementaria a los proyectos experimentales y constituye actualmente un componente importante de la investigación en química, ya que permite estudiar estructuras, energías, propiedades electrónicas y procesos químicos que enriquecen la información obtenida experimentalmente. Para estudiantes de licenciatura, el área de química

computacional puede representar un reto, debido a que conceptos como orbitales moleculares, superficies de energía potencial, optimización geométrica y métodos de aproximación cuántica pueden resultar abstractos cuando se presentan exclusivamente desde una perspectiva teórica [1].

Las herramientas computacionales durante la formación universitaria pueden contribuir a establecer una conexión entre los conceptos fundamentales de la química y su representación



Figura 1. Metodología práctica para estudiantes de licenciatura, aprendizaje mediante MOPAC.

mediante modelos teóricos [2]. Las actividades prácticas de química computacional pueden incorporarse a cursos de química general mediante clases virtuales [3]. MOPAC constituye una alternativa educativa gratuita que emplea métodos semiempíricos y permite obtener información sobre estructuras moleculares, energía, propiedades termodinámicas y espectroscópicas. Entre sus aplicaciones más comunes se encuentra la optimización geométrica, procedimiento mediante el cual la estructura molecular inicial se modifica iterativamente hasta alcanzar una configuración de equilibrio asociada con un mínimo en la superficie de energía potencial [4].

El objetivo de este trabajo es desarrollar una estrategia didáctica basada en MOPAC que permita introducir a estudiantes de licenciatura en los fundamentos de la química computacional, favoreciendo la relación entre los conocimientos adquiridos en cursos tradicionales de química y su aplicación mediante herramientas de modelado molecular (Figura 1).

METODOLOGÍA DOCENTE

La estrategia se describe mediante cuatro etapas: introducción conceptual, capacitación computacional, desarrollo de ejercicios prácticos e interpretación de resultados (Figura 2).

Etapas 1: Introducción conceptual. Se realiza una introducción general a la química computacional, explicando conceptos básicos como métodos cuánticos, métodos semiempíricos, optimización geométrica, energía molecular y orbitales moleculares. El propósito es proporcionar los conocimientos necesarios para que los estudiantes

comprendan qué información puede obtenerse mediante un cálculo computacional, así como sus alcances y limitaciones.

Etapas 2: Capacitación computacional. Los estudiantes descargan MOPAC y un visualizador molecular gratuito. En esta etapa se pueden realizar sesiones de capacitación mediante plataformas virtuales, en las cuales se muestra el procedimiento para construir una estructura molecular, preparar un archivo de entrada, seleccionar el método de cálculo y ejecutar una optimización. La geometría molecular puede definirse mediante coordenadas cartesianas o internas, de acuerdo con las opciones disponibles en MOPAC. Es importante resaltar que existen visualizadores gratuitos como Avogadro [5], que permiten construir moléculas y manipular los archivos de salida de MOPAC [1]. Esta herramienta facilita la comprensión de la geometría molecular y permite verificar visualmente las estructuras antes y después de realizar los cálculos.

Etapas 3: Desarrollo de ejercicios prácticos. Para facilitar la comprensión de los estudiantes, se recomienda utilizar moléculas sencillas como H_2O , NH_3 , CH_4 , CO_2 , CH_3OH o ácido acético. Los estudiantes practican la construcción de las moléculas en el visualizador y posteriormente realizan cálculos utilizando un método semiempírico, como PM7. Los estudiantes deben comparar la geometría inicial con la estructura obtenida después de la optimización, analizando longitudes de enlace, ángulos de enlace y energía del sistema, y comparándolos con valores reportados en la literatura. Es importante resaltar que la computadora se convierte en una

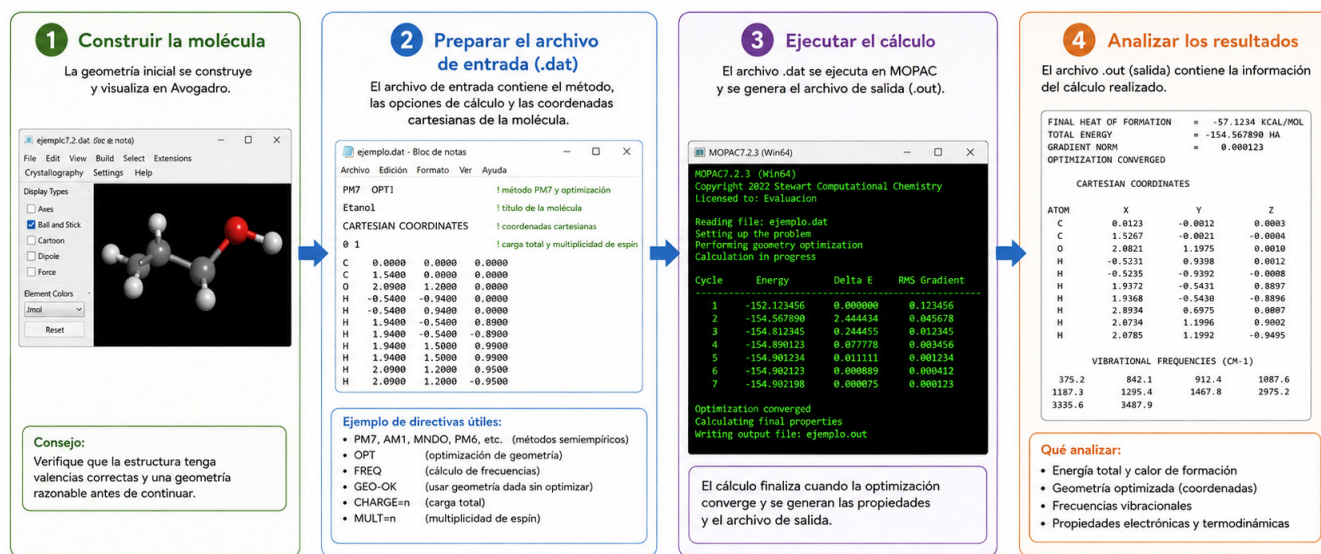


Figura 2. Flujo de trabajo para el uso del programa MOPAC: construcción de la molécula, preparación del archivo de entrada, ejecución del cálculo y análisis de resultados.

herramienta para aprender y analizar química, en lugar de ser únicamente un recurso tecnológico.

RESULTADOS ESPERADOS

La implementación del programa MOPAC en cursos de química puede contribuir al desarrollo de diferentes competencias en los estudiantes de licenciatura. Uno de los principales objetivos es mejorar la comprensión de conceptos relacionados con estructura molecular y energía mediante la observación directa de los cambios producidos durante una optimización geométrica. Los estudiantes pueden visualizar cómo una estructura inicial aproximada es modificada iterativamente hasta alcanzar el equilibrio y la estabilidad estructural.

Los estudiantes desarrollarán competencias básicas en modelado molecular, preparación de cálculos, manejo de archivos de entrada y análisis de resultados computacionales. Estas habilidades pueden constituir una base para posteriormente utilizar programas de mayor complejidad y abordar sistemas relacionados con investigación en química, materiales, energía u otras áreas de aplicación.

Esta práctica educativa puede favorecer modalidades de enseñanza a distancia o híbridas,

ya que las actividades de química computacional pueden realizarse mediante sesiones virtuales de capacitación y se pueden establecer ejercicios individuales o colaborativos, lo que amplía las posibilidades de incorporar este tipo de herramientas en diferentes cursos de licenciatura. Experiencias previas con actividades de química computacional han demostrado su viabilidad en el uso del programa MOPAC representa una alternativa accesible y efectiva para introducir conceptos de química computacional en estudiantes de licenciatura. Los docentes pueden contribuir al desarrollo de competencias computacionales y científicas, fortalecer el aprendizaje activo y despertar el interés de los estudiantes por la investigación en química computacional. Se recomienda enfatizar la aplicación de los resultados, ya que MOPAC no solo es una herramienta educativa, sino que también genera información valiosa para comparar propiedades de sistemas moleculares con datos experimentales o teóricos reportados en la literatura. La integración de esta estrategia didáctica en el currículo de química puede fortalecer la formación de los estudiantes y prepararlos para abordar problemas más complejos en etapas avanzadas de su formación académica y profesional.

REFERENCIAS

1. Suárez Millán, M. del C., Betancourt Arango, J. P. La Química Computacional como mediación pedagógica para el aprendizaje de conceptos inorgánicos. *Educación Química* **2023**, 34. DOI: 10.22201/fq.18708404e.2023.1.77684
2. Shawn C. Sendlinger, Clyde R. Metz. Computational Chemistry for Chemistry Educators, *J. Comput. Sci. Educ.* **2010**, 1, 28. DOI: 10.22369/issn.2153-4136/1/1/4
3. Tamar Traube, Ron Blonder. A Computational Chemistry Course for Teachers: From Research Laboratories to High-School Chemistry Teaching, *J. Chem. Educ.* **2023**, 100, 4360. DOI: 10.1021/acs.jchemed.3c00645
4. Stewart, J. J. P. MOPAC2016. Stewart Computational Chemistry, Colorado Springs, CO, USA. Disponible en OpenMOPAC.net **2016**, 11, 8025. DOI: 10.21105/joss.08025
5. Hanwell, M.D., Curtis, D.E., Lonie, D.C. *et al.* Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *J. Cheminform.* **2012**, 4, 17. DOI: 10.1186/1758-2946-4-17