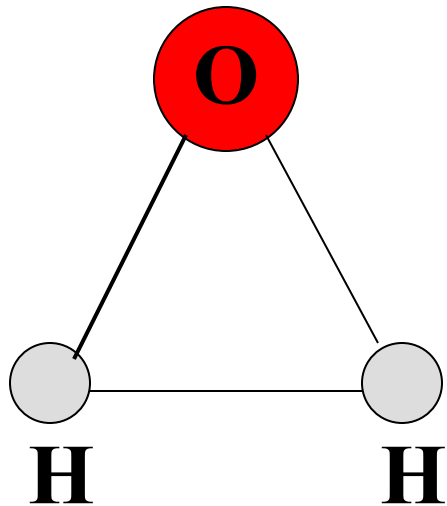


Л.13. Молекулярна динаміка зі зв'язками

- Молекулярні рідини
- Розрахунок потенціалу середньої сили між двома частинками



Модель води SPC/E:

Жорсткі молекули

$$r_{\text{OH}} = 1 \text{ \AA}$$

$$\angle \text{HOH} = 109.47^\circ$$

$$q_{\text{O}} = -0.8476 |e|$$

$$q_{\text{H}} = +0.4238 |e|$$

Потенціали: LJ+Coulomb