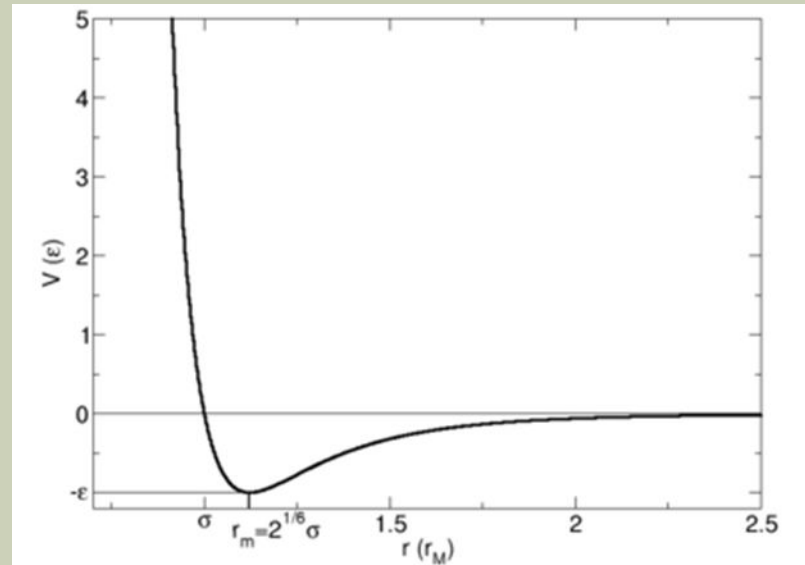
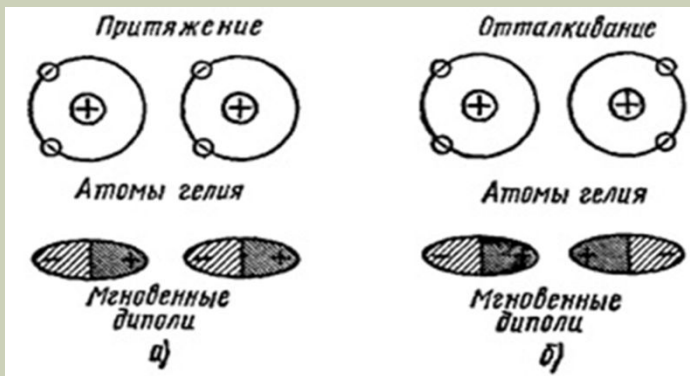


МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ.

Ищенко Иван, 9Б
класс

Научный
руководитель:
Белоушко К.Е.,
педагог ДО

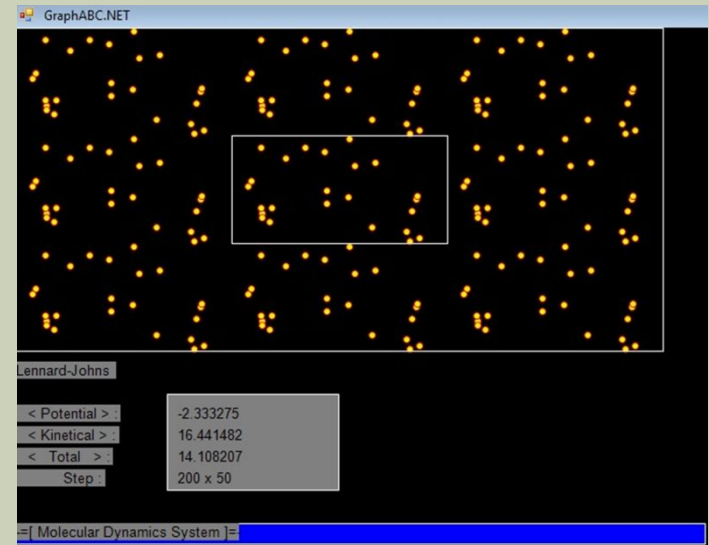
ЧТО УЧИТЫВАЕТСЯ?



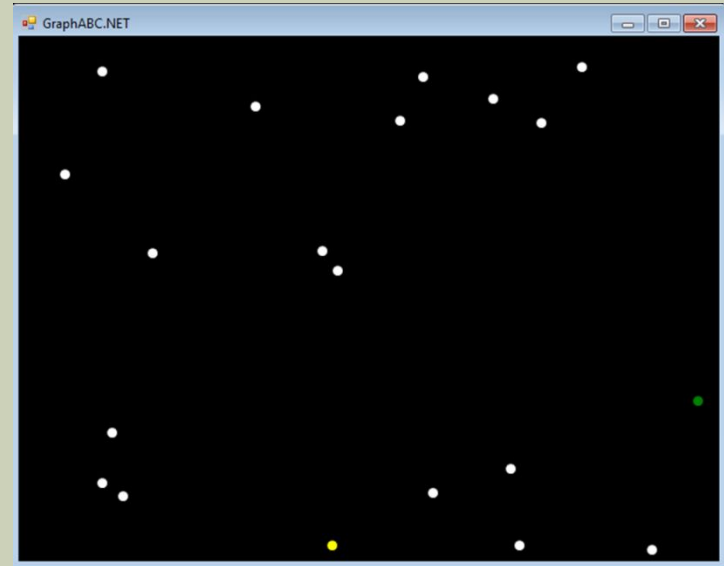
- 2й закон Ньютона
- Силы Ван-дер-Ваальса
- Потенциал Леннарда-Джонса

ПРОГРАММА

- 24x9 атомов
- Идеальный газ
- Расчеты скоростей, векторов движения
- Взаимодействие
- Дублирование



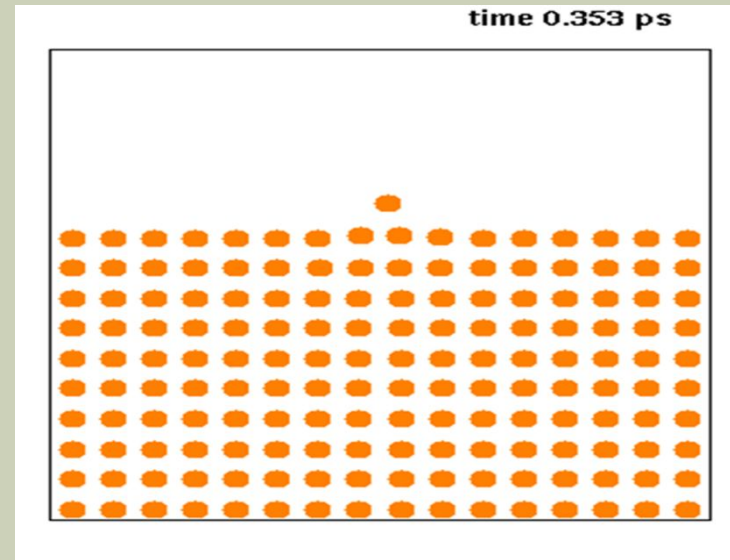
РАСЧЕТЫ



- Потенциальная
- Кинетическая
- Общая энергия системы
- Температура системы
- Давление

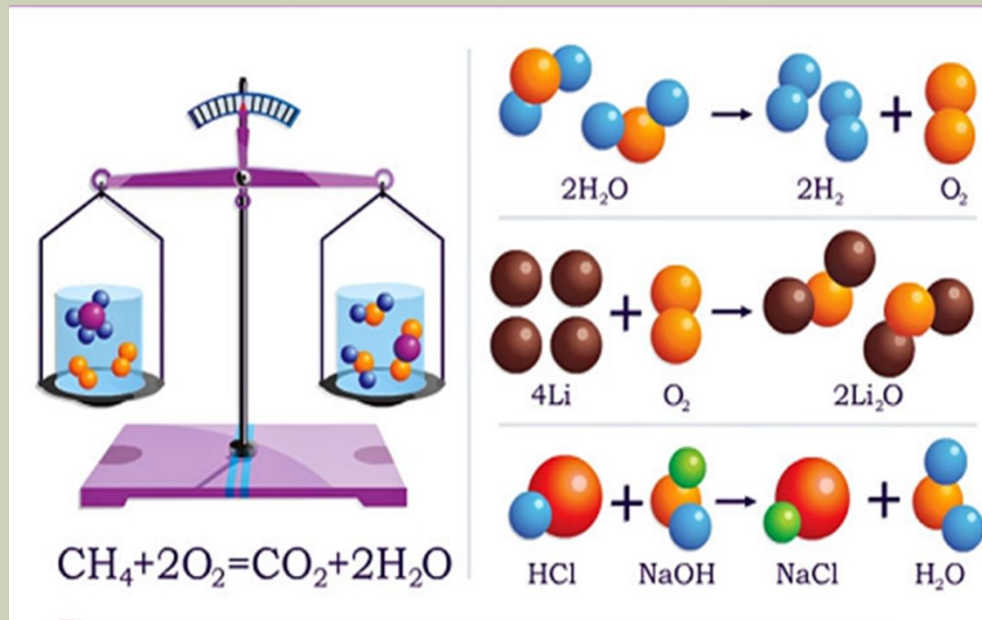
ПРОЦЕДУРЫ

- Инициализация
- Акселерация
- Метод Верле
- Расчет силы взаимодействия
- Вывод значений переменных



ПРИМЕНЕНИЕ

- Педагогика
- Химия
- Физика
- Исследования



ПЕРСПЕКТИВЫ

- Переход в 3-D
- Различные потенциалы взаимодействия
- Определенные вещества
- Разные соединения

