

Метод молекулярной динамики

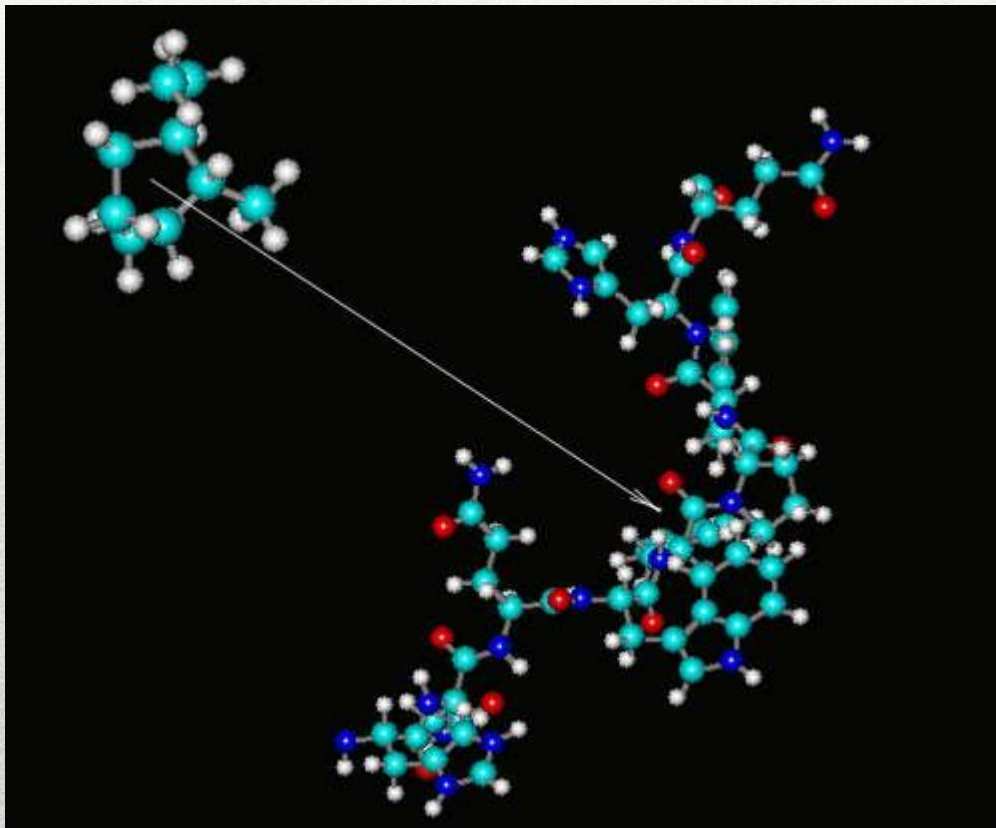


Автор работы: Ищенко Иван, МПЛ

**Научный руководитель:
Белоушко К.Е.**

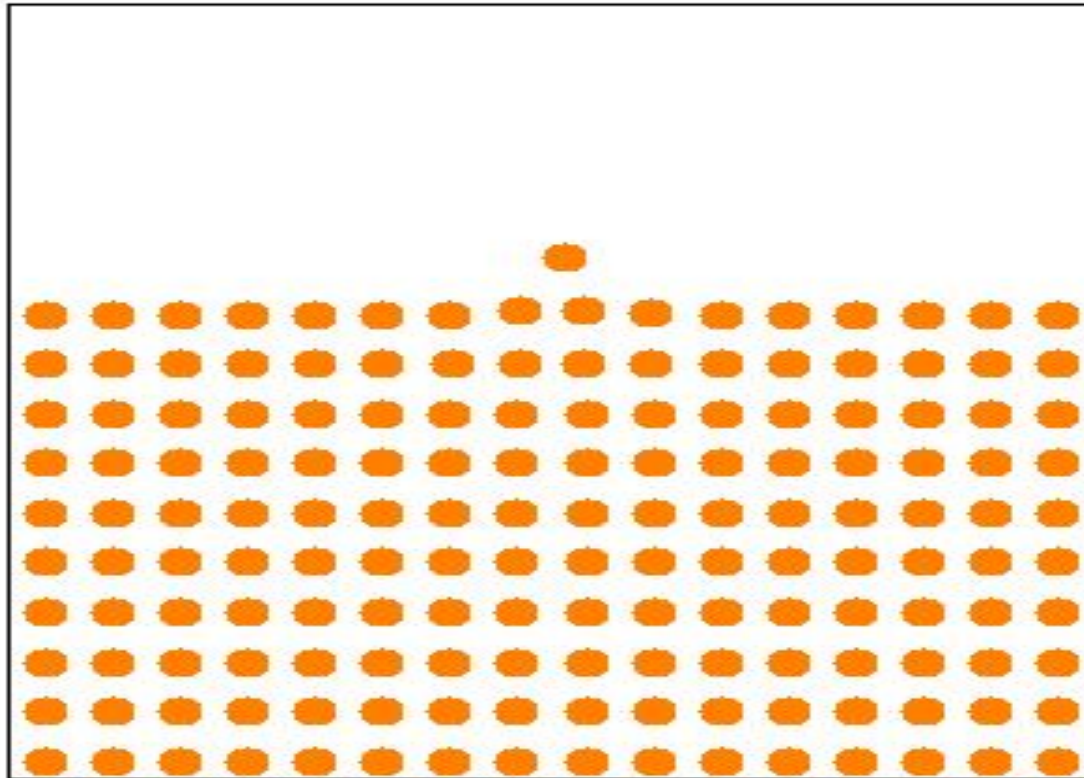
Моделирование химических реакций

Компьютерное моделирование



Метод научного исследования

time 0.353 ps



Молекулярная динамика



PROGRAM

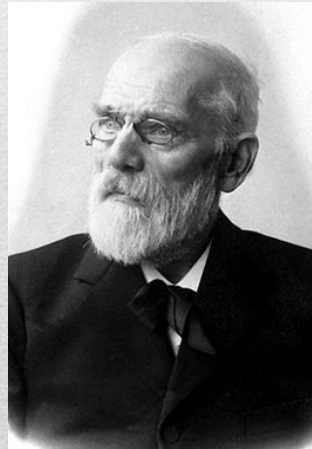
- Создание программы, моделирующей химические реакции

Цель

Forces, affecting the particles

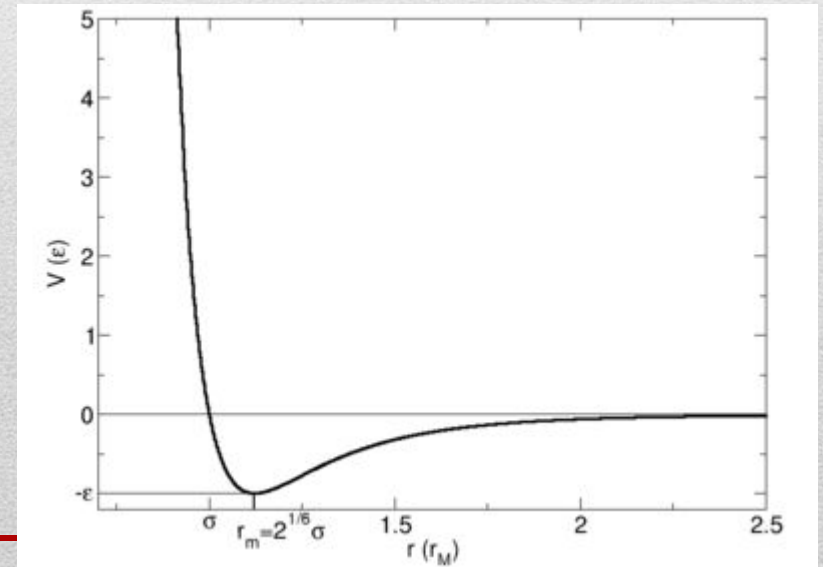


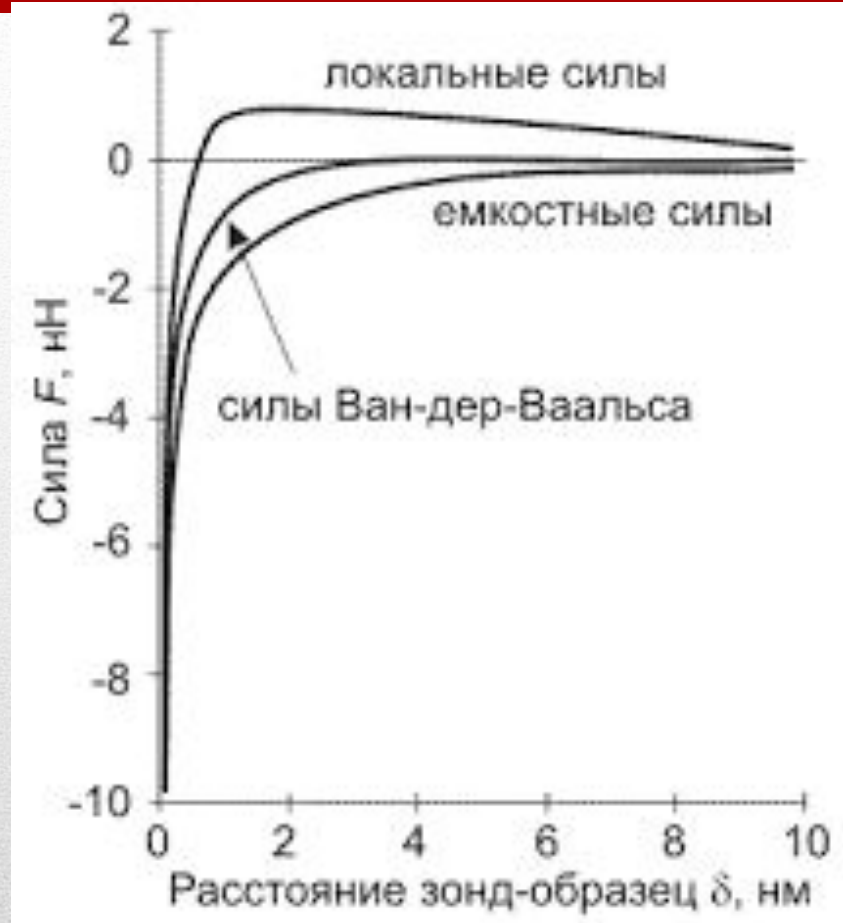
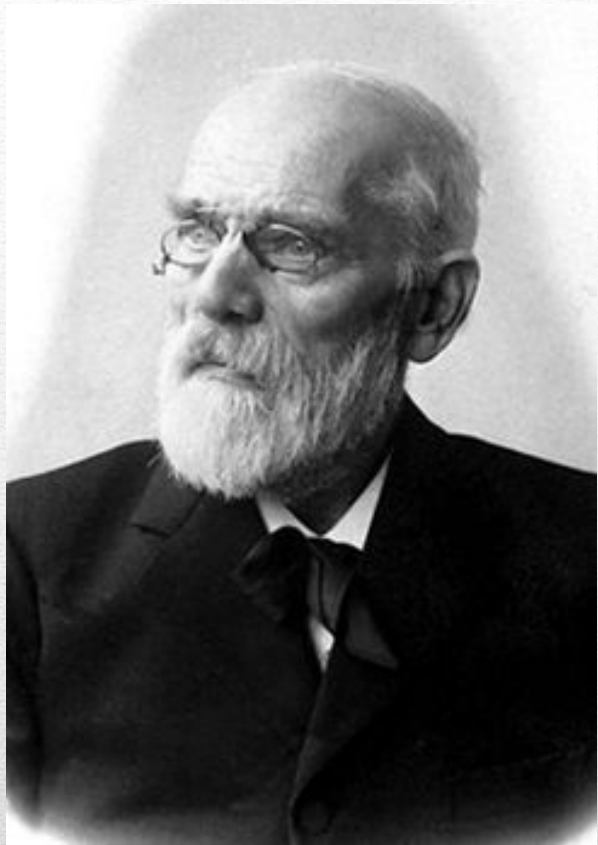
Potential of
Lennard-Jones



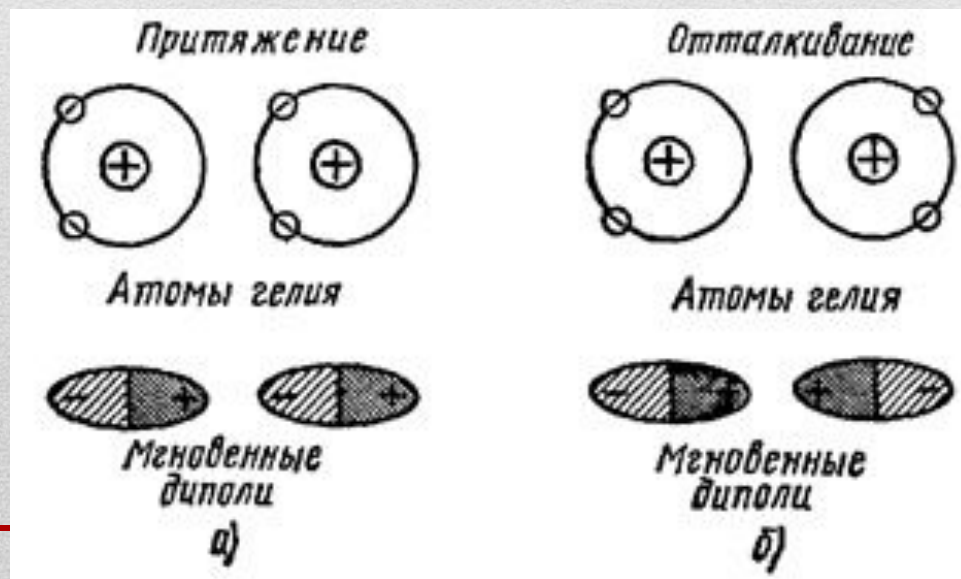
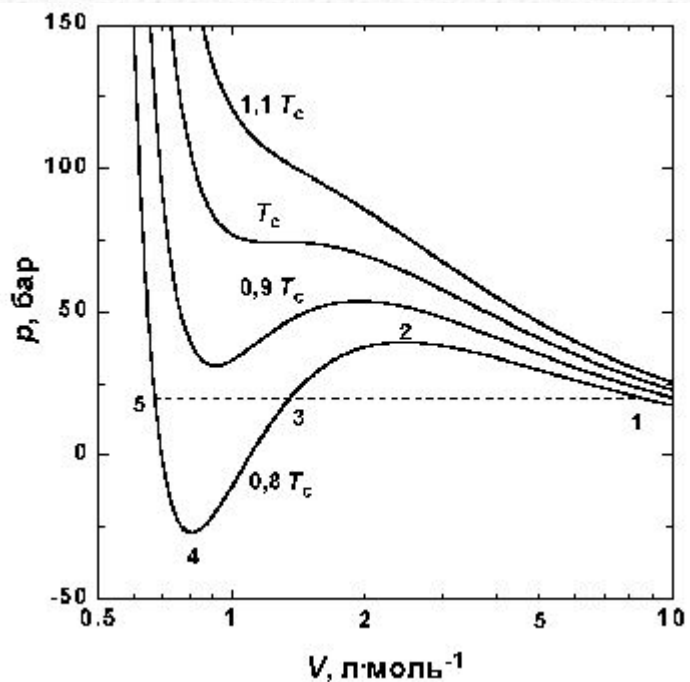
Forces of
Van-der-Vaals

Potential of Lennard-Jones





Van-der-Vaals algorithms



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

Расчеты



Программа

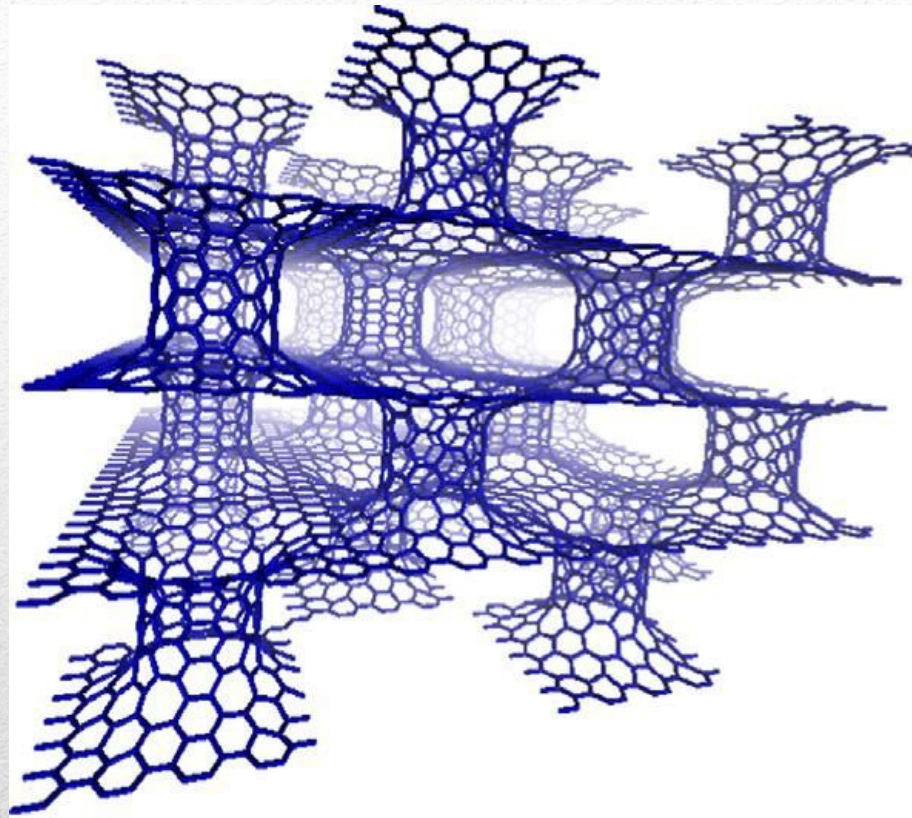
- Создана программа



Результаты

- 3D модель
- Перенос в другие системы

Перспективы



Спасибо за внимание
