

# Метод молекулярной динамики



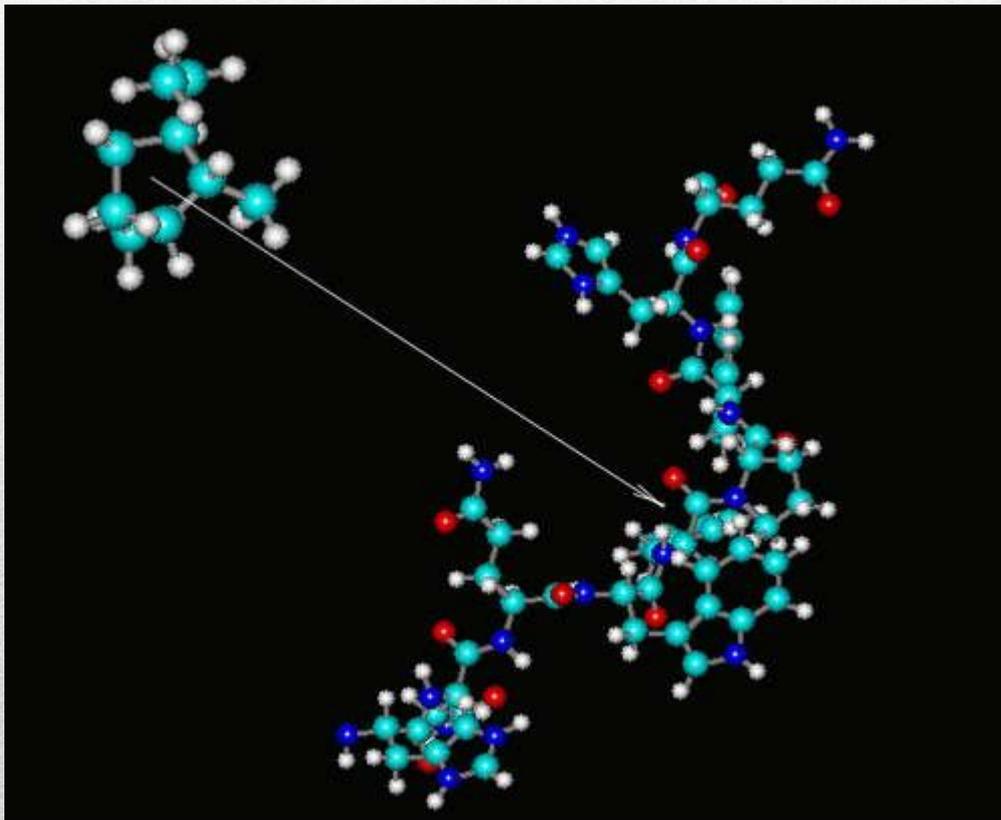
**Автор работы: Ищенко Иван, МПЛ**

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

**Моделирование химических реакций**

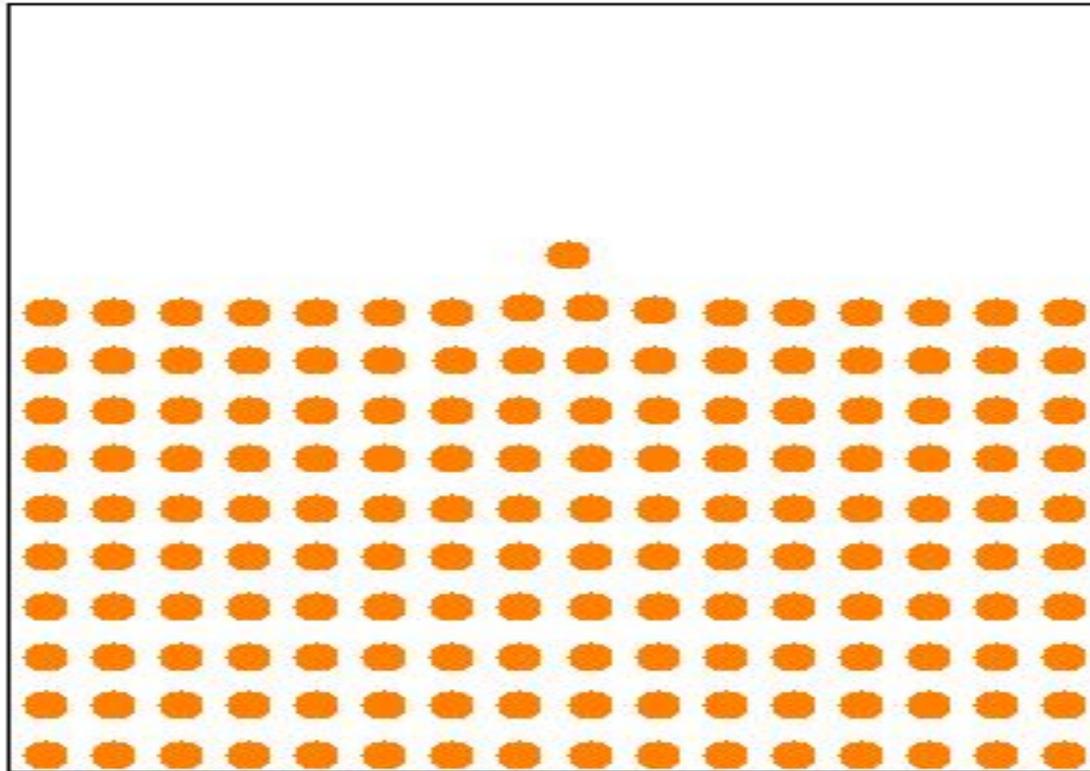
---

# Компьютерное моделирование



Метод научного исследования

time 0.353 ps



# Молекулярная динамика

---



**PROGRAM**

- Создание программы, моделирующей химические реакции

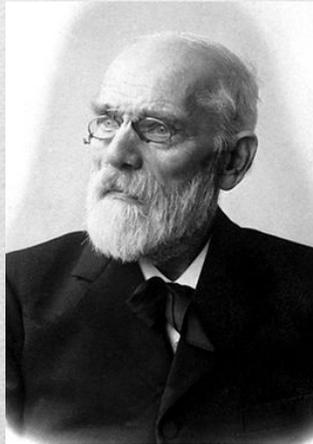
**Цель**

---

# Forces, affecting the particles



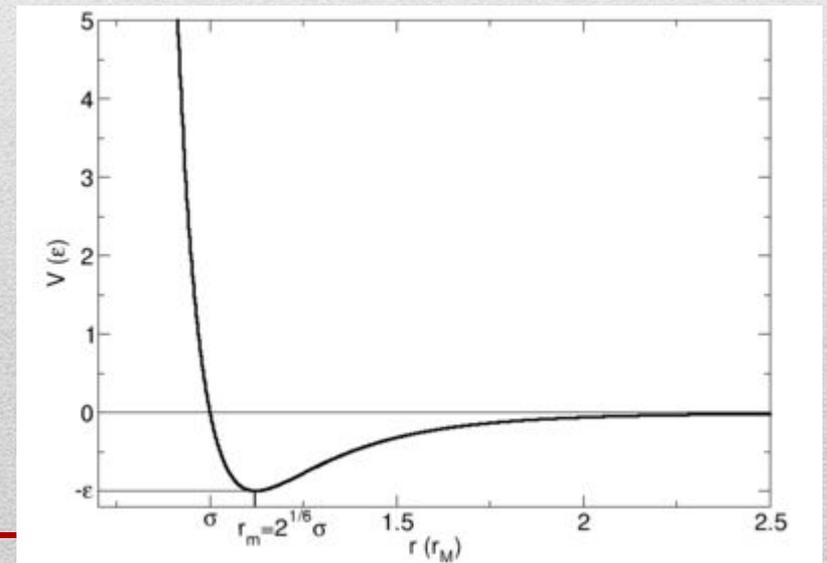
Potential of  
Lennard-Jones

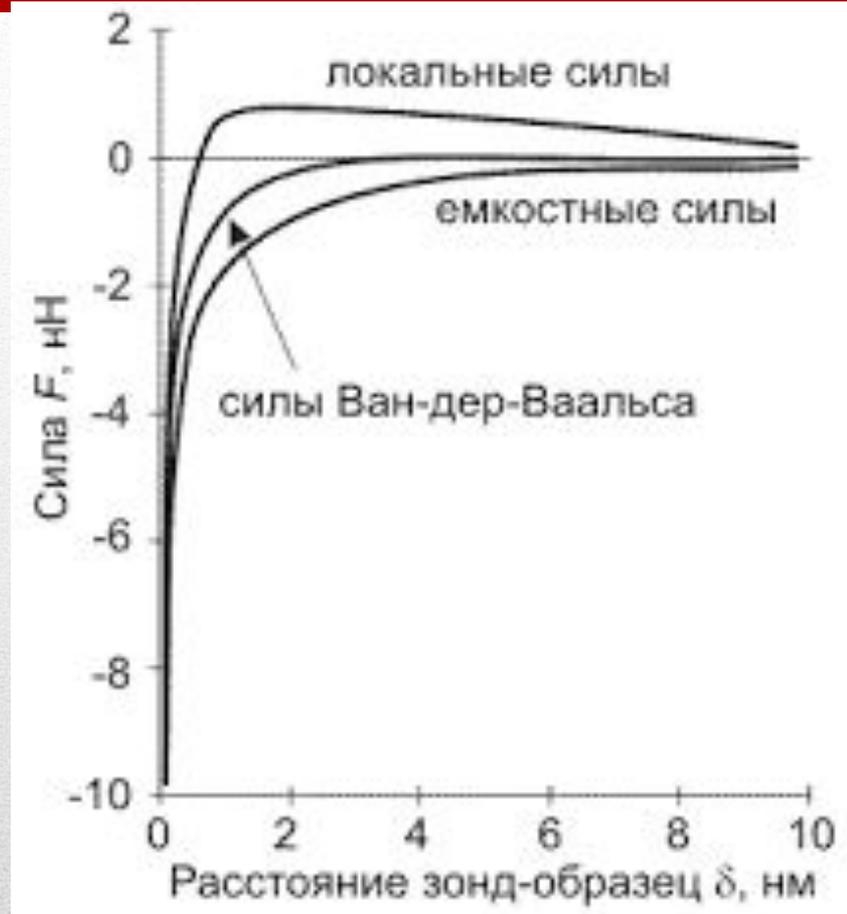
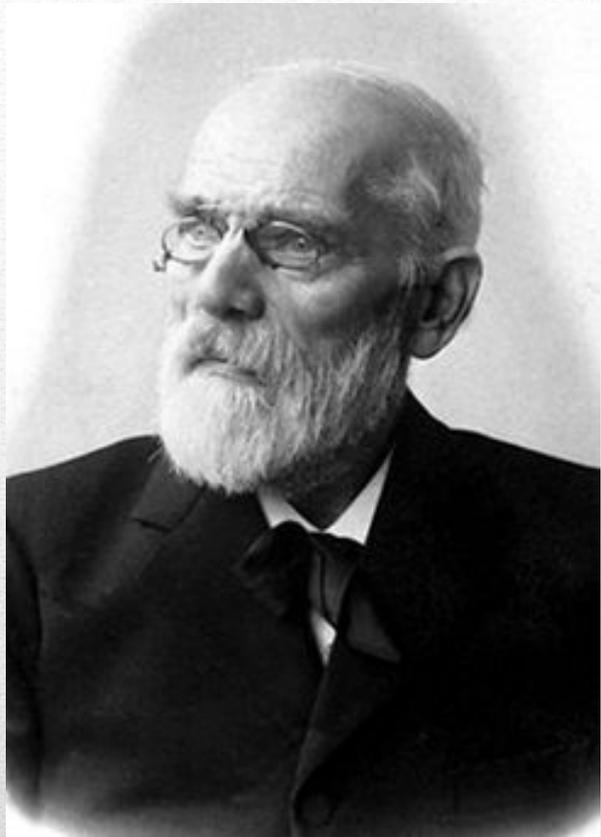


Forces of  
Van-der-Vaals

---

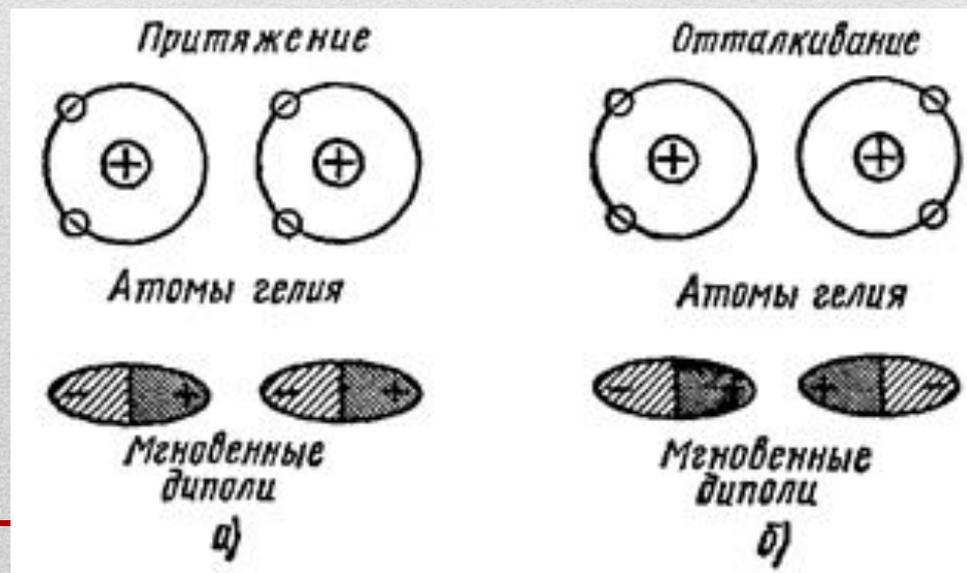
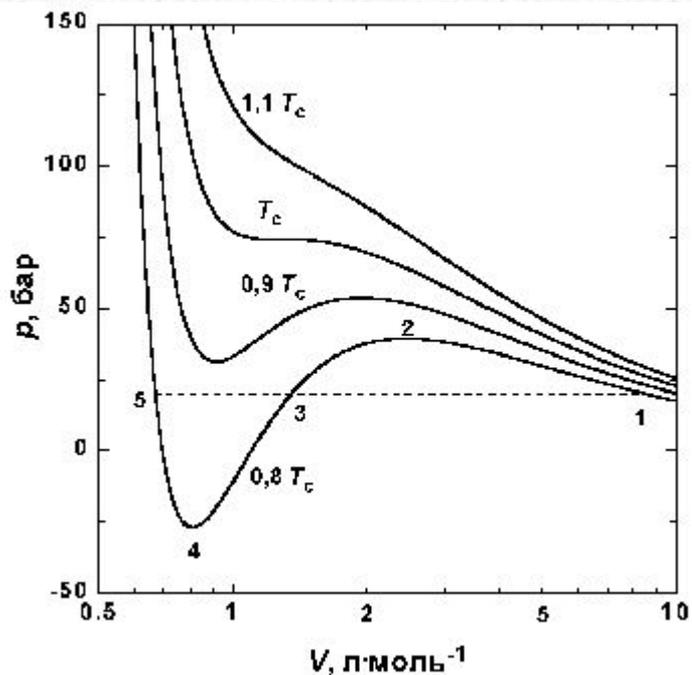
# Potential of Lennard-Jones





# Van-der-Vaals algorithms

---



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

# Расчеты

---



# Программа

---

- Создана программа



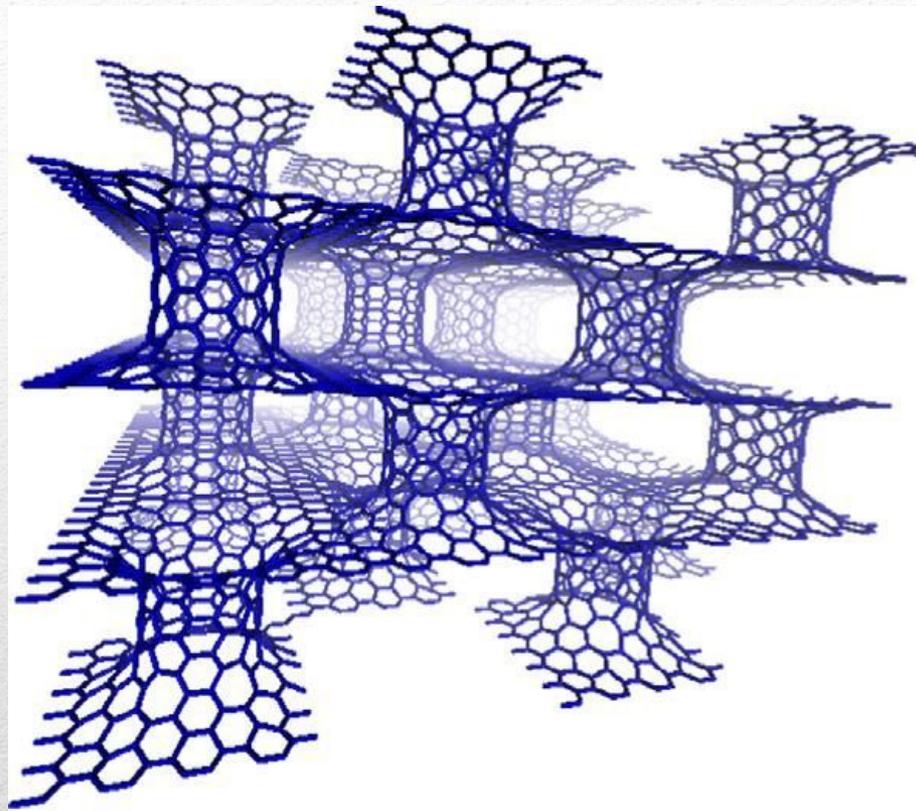
# Результаты

---

- 3D модель
- Перенос в другие системы

# **Перспективы**

---



**Спасибо за внимание**

---