

# Молекулярная механика

Иван Федянин

ВХК РАН

- 

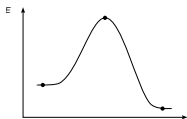
- 
- Figure 1 consists of three subplots. Subplot (a) shows the energy spectrum  $E(k)$  versus  $k$  for the linear case, with a parabolic curve centered at  $k=0$ . Subplot (b) shows the energy spectrum  $E(k)$  versus  $k$  for the nonlinear case, with a band structure and a sharp peak at  $k=0$ . Subplot (c) shows the time evolution of the energy spectrum  $E(k)$  versus  $k$  for the nonlinear case, with a peak at  $k=0$  that grows over time.

- 

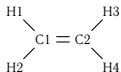
-

Часто в вычислительной химии необходимо знать энергию в определённых точках ППЭ:

минимума, седловой точки, вдоль какого-то сечения и т. д.



(Полная) энергия  $E$  может быть вычислена из уравнения Шрёдингера:



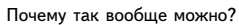
$$\hat{H}\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$$

$$\Psi = \Psi(R_{C1}, R_{C2}, R_{H1}, R_{H2}, R_{H3}, R_{H4}, r_1, r_2, \dots, r_{16})$$

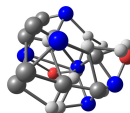
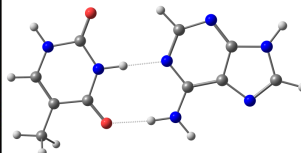
Это уравнение можно (приблизённо) решить, но всегда ли это необходимо?







- ## 1. Приближение Борна-Оппенгеймера!



1. Приближение Борна-Оппенгеймера!
2. Интерес представляют конформации, не очень удалённые от минимумов ППЭ!





Обрываем ряд на квадратичном выражении:

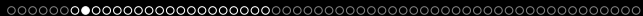
$$V(r) = V(r_0) + \frac{dV}{dr} dr + \frac{1}{2!} \frac{d^2V}{dr^2} dr^2 + \frac{1}{3!} \frac{d^3V}{dr^3} dr^3 + \dots$$

$$V(r) = \frac{1}{2}k (r - r_0)^2$$

- $V(r)$  — потенциальная энергия
- $k$  — силовая постоянная
- $r$  — расстояние
- $r_0$  — равновесное расстояние



$$V(r) = \frac{1}{2}k(r - r_0)^2$$

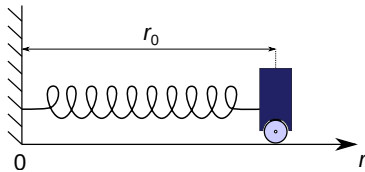


$$V(r) = \frac{1}{2}k (r - r_0)^2$$

$$F = -\frac{dV(r)}{dr} = -k(r - r_0)$$

$$V(r) = \frac{1}{2}k (r - r_0)^2$$

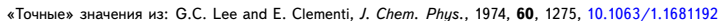
$$F = -\frac{dV(r)}{dr} = -k(r - r_0)$$



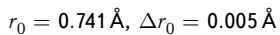
## Закон Гука

The graph displays the potential energy  $V$  in kcal/mol as a function of the internuclear distance  $r$  in Å for the  $H_2^+$  molecular ion. The curve is a smooth, symmetric parabola-like shape opening upwards, with its minimum value of 0 kcal/mol occurring at approximately  $r = 1.52$  Å. The y-axis is labeled  $V, \text{ ккал/моль}$  and ranges from 0 to 16 with major ticks every 2 units. The x-axis is labeled  $r, \text{ Å}$  and ranges from 1.3 to 1.7 with major ticks every 0.1 units.

$r, \text{ Å}$	$V, \text{ ккал/моль}$
1.35	12.8
1.40	5.5
1.45	1.8
1.50	0.2
1.52	0.0
1.55	0.2
1.60	1.8
1.65	5.5
1.70	12.8

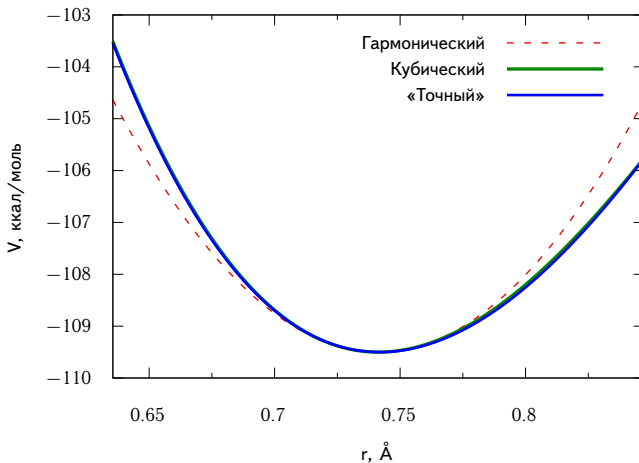


(экспериментальные спектроскопические данные + потенциал Галбурта—Хиршфельдера)



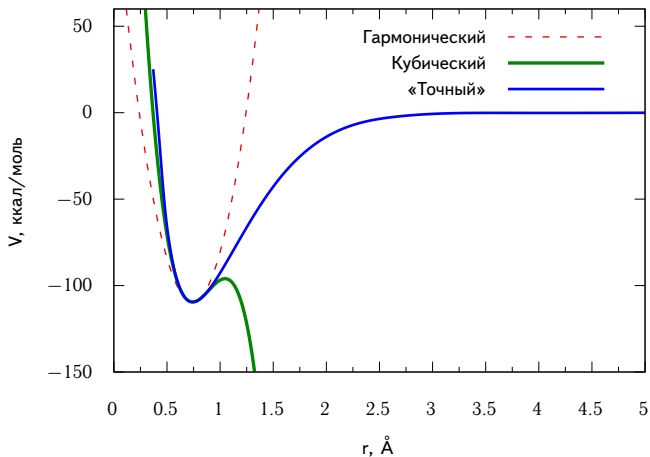
Можно ли улучшить потенциал? Конечно!

$$V(r) = \frac{1}{2}k (r - r_0)^2 + \frac{1}{6}k' (r - r_0)^3$$



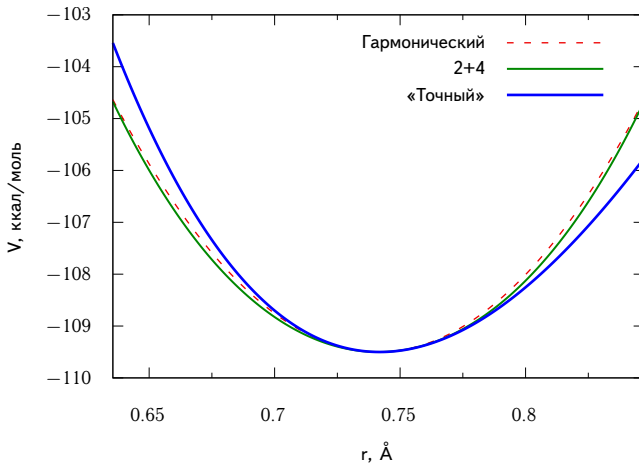
Можно ли улучшить потенциал? Конечно! Но есть проблема...

$$V(r) = \frac{1}{2}k (r - r_0)^2 + \frac{1}{6}k' (r - r_0)^3$$

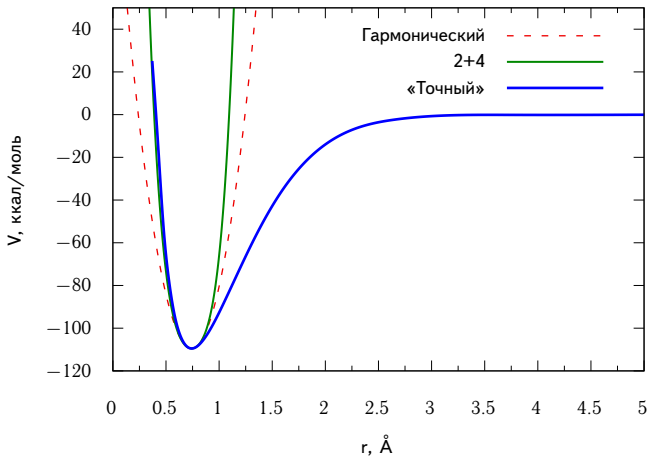


Может лучше взять следующий чётный член?

$$V(r) = \frac{1}{2}k (r - r_0)^2 + \frac{1}{24}k'' (r - r_0)^4$$



$$V(r) = \frac{1}{2}k (r - r_0)^2 + \frac{1}{24}k'' (r - r_0)^4$$



—

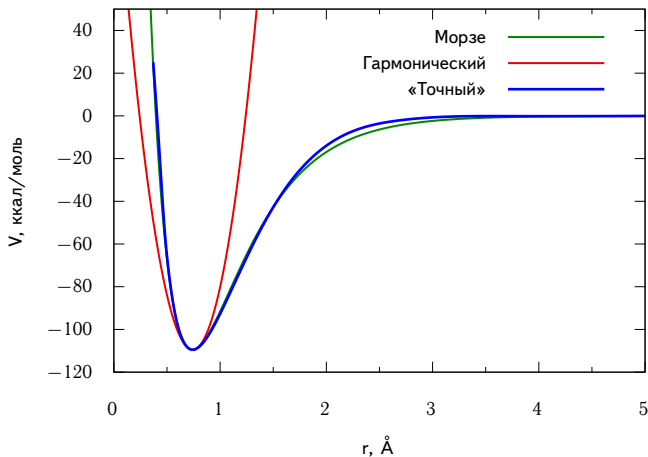
$$V(r) = \frac{1}{2} \left[ k + k^{(3)} (r - r_0) + k^{(4)} (r - r_0)^2 \right] (r - r_0)^2$$

Коэффициенты  $k^{(3)}$  и  $k^{(4)}$  включают в себя множители  $\frac{1}{3}$  и  $\frac{1}{12}$ .

## Потенциал Морзе

$$V(r) = D_e \left( 1 - e^{-a(r-r_0)} \right)^2$$

- $D_e$  — глубина потенциальной ямы
- $a = \sqrt{\frac{k}{2D_e}}$



$$V(r) = D_e \left( 1 - e^{-a(r-r_0)} \right)^2$$

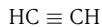
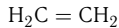
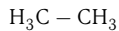
Разложение в ряд экспоненты (до 3 степени):

$$V(r) = D_e \left[ 1 - \left[ 1 - a(r-r_0) + \frac{1}{2}a^2(r-r_0)^2 - \frac{1}{6}a^3(r-r_0)^3 \right] \right]$$

$$V(r) = D_e \left[ a^2 - a^3(r-r_0) + \frac{7}{12}a^4(r-r_0)^2 \right] (r-r_0)^2$$

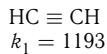
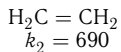
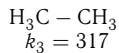
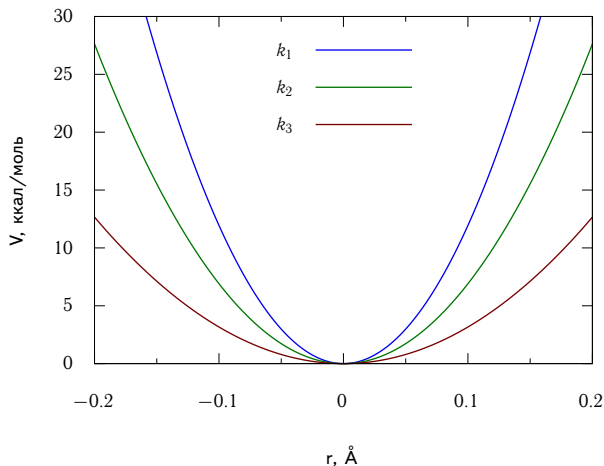
---


$$V(r) = \frac{1}{2} \left[ k + k^{(3)} (r-r_0) + k^{(4)} (r-r_0)^2 \right] (r-r_0)^2$$

$$V(r) = \frac{1}{2}k (r - r_0)^2$$


Где чья константа  $k_i$ ?

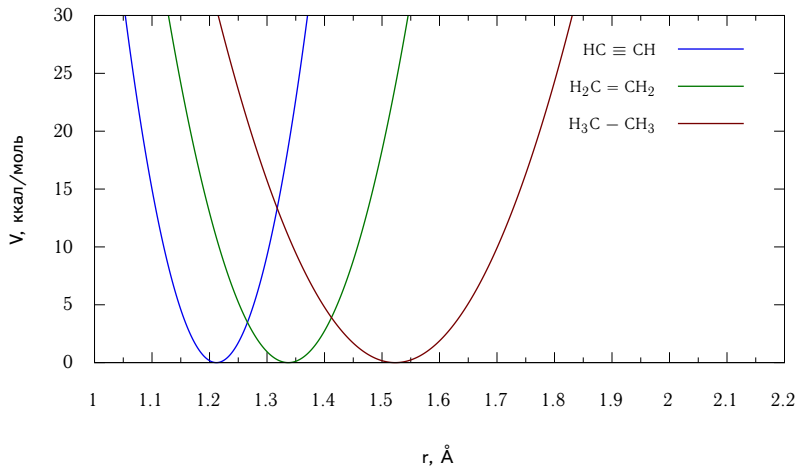
$$V(r) = \frac{1}{2}k (r - r_0)^2$$



ккал моль<sup>-1</sup> Å<sup>-2</sup>  
(силовое поле MM2)

Где чья константа  $k_i$ ?

$$V(r) = \frac{1}{2}k (r - r_0)^2$$



Начнём записывать общее выражение для потенциальной энергии системы:

$$V = V_b + \dots$$

$$V_b = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_b} k_{b,i} (r - r_{0,i})^2$$





Потенциалы для описания валентных взаимодействий

Силовые константы для углов

Продолжаем записывать общее выражение для потенциальной энергии системы:

$$V = V_b + V_a + \dots$$

$$V_b = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_b} k_{b,i} (r - r_{0,i})^2$$

$$V_a = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N_a} k_{a,j} (\alpha - \alpha_{0,j})^2$$

$$V(r_1, r_2) = V(0) + \frac{\partial V}{\partial r_1} dr_1 + \frac{\partial V}{\partial r_2} dr_2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial r_1^2} dr_1^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial r_2^2} dr_2^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial r_1 \partial r_2} dr_1 dr_2 + \dots$$

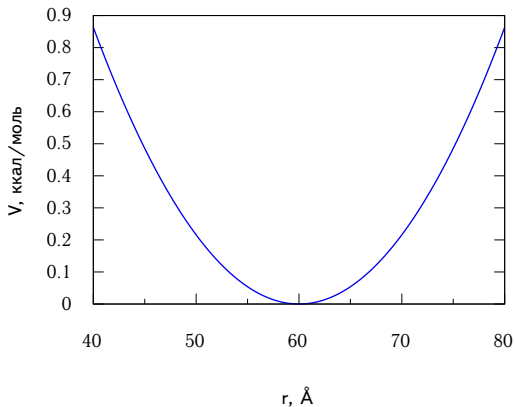
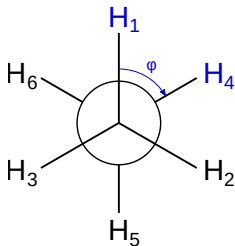
$$V(r_1, r_2) = V(0) + \frac{\partial V}{\partial r_1} dr_1 + \frac{\partial V}{\partial r_2} dr_2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial r_1^2} dr_1^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial r_2^2} dr_2^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial r_1 \partial r_2} dr_1 dr_2 + \dots$$

$$V(r, \alpha) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial r^2} dr^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial \alpha^2} d\alpha^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial r \partial \alpha} dr d\alpha \Rightarrow$$

$$V(r, \alpha) = \frac{1}{2} k_b (r - r_0)^2 + \frac{1}{2} k_a (\alpha - \alpha_0)^2 + \frac{1}{2} k_{ba} (r - r_0)(\alpha - \alpha_0)$$

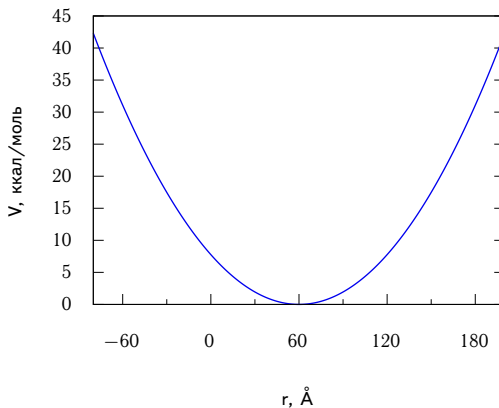
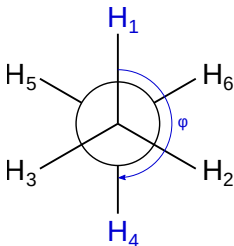
Снова разложение в ряд. Почему нет?

$$V(\varphi) = V(\varphi_0) + \frac{dV}{d\varphi} d\varphi + \frac{1}{2} \frac{d^2V}{d\varphi^2} d\varphi^2 + \dots \approx \frac{1}{2} k_t (\varphi - \varphi_0)^2$$



Снова разложение в ряд. Почему нет?

$$V(\varphi) = V(\varphi_0) + \frac{dV}{d\varphi} d\varphi + \frac{1}{2} \frac{d^2V}{d\varphi^2} d\varphi^2 + \dots \approx \frac{1}{2} k_t (\varphi - \varphi_0)^2$$



Функция непериодическая!

Тогда надо разложить в ряд, подходящий для периодических функций!

$$V(\varphi) = \sum_{j=0}^{\infty} k_j [\cos j(\varphi - \varphi_0)]$$

Тогда надо разложить в ряд, подходящий для периодических функций!

$$V(\varphi) = \sum_{j=0}^{\infty} k_j [\cos j(\varphi - \varphi_0)]$$

Ряд Фурье!

Где его оборвать?

Тогда надо разложить в ряд, подходящий для периодических функций!

$$V(\varphi) = \sum_{j=0}^{\infty} k_j [\cos j(\varphi - \varphi_0)]$$

Ряд Фурье!

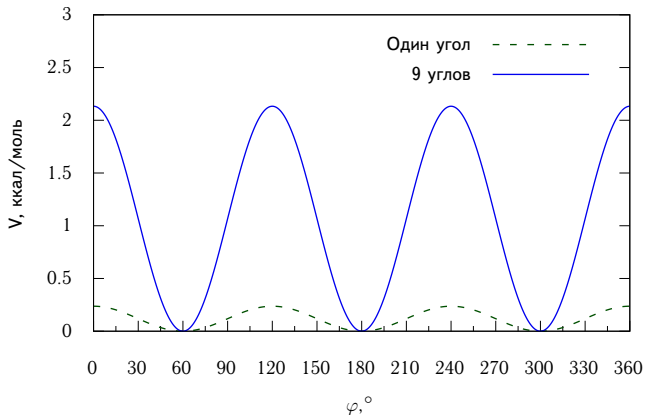
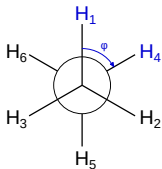
Где его оборвать?

$$V(\varphi) = \frac{1}{2}k_{t1}[1 + \cos(\varphi - \varphi_0)] + \frac{1}{2}k_{t2}[1 - \cos 2(\varphi - \varphi_0)] + \frac{1}{2}k_{t3}[1 + \cos 3(\varphi - \varphi_0)]$$

$$V(\varphi) = \frac{1}{2}k_{t1}[1 + \cos(\varphi - \varphi_0)] + \frac{1}{2}k_{t2}[1 - \cos 2(\varphi - \varphi_0)] + \frac{1}{2}k_{t3}[1 + \cos 3(\varphi - \varphi_0)]$$

### Нужны ли все три слагаемых?

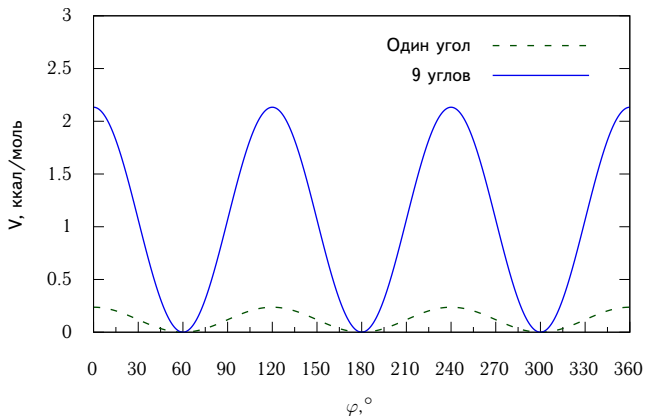
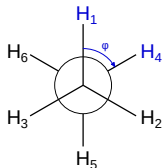
Этан:



$$V(\varphi) = \frac{1}{2}k_{t1}[1 + \cos(\varphi - \varphi_0)] + \frac{1}{2}k_{t2}[1 - \cos 2(\varphi - \varphi_0)] + \frac{1}{2}k_{t3}[1 + \cos 3(\varphi - \varphi_0)]$$

Нужны ли все три слагаемых?

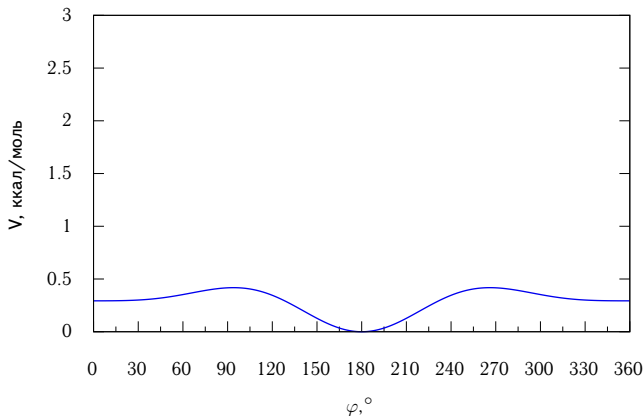
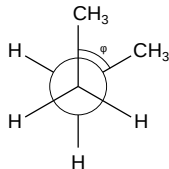
Этан:



$$V(\varphi) = \frac{1}{2}k_{t1}[1 + \cos(\varphi - \varphi_0)] + \frac{1}{2}k_{t2}[1 - \cos 2(\varphi - \varphi_0)] + \frac{1}{2}k_{t3}[1 + \cos 3(\varphi - \varphi_0)]$$

Нужны ли все три слагаемых?

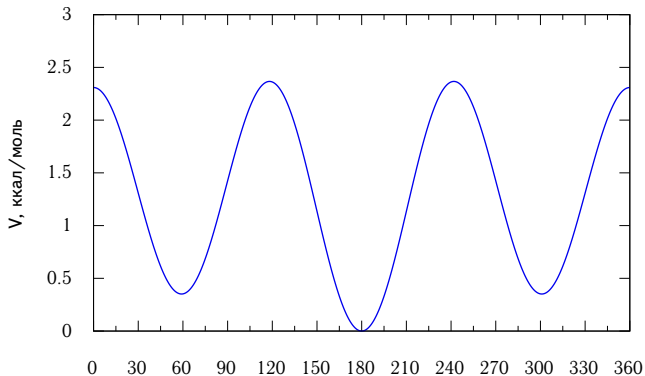
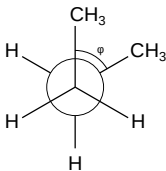
Бутан, только потенциал для угла C—C—C—C:

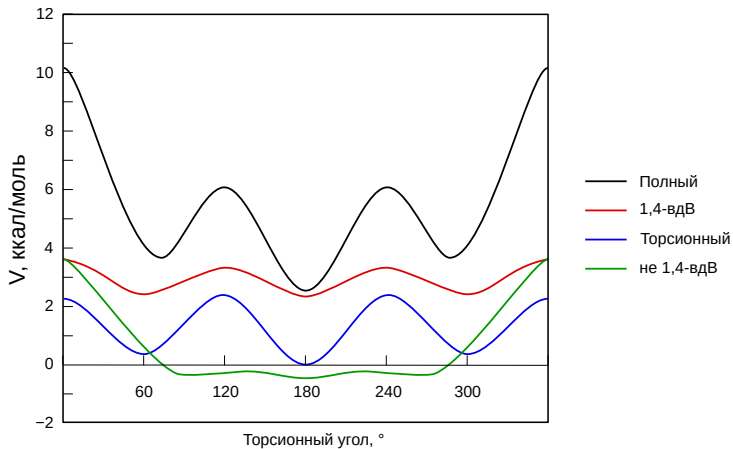


$$V(\varphi) = \frac{1}{2}k_{t1}[1 + \cos(\varphi - \varphi_0)] + \frac{1}{2}k_{t2}[1 - \cos 2(\varphi - \varphi_0)] + \frac{1}{2}k_{t3}[1 + \cos 3(\varphi - \varphi_0)]$$

### Нужны ли все три слагаемых?

Бутан, потенциал для всех 9 связей:

$$1 \text{ C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}$$
$$4 \text{ C}-\text{C}-\text{C}-\text{H}$$
$$4 \text{ H}-\text{C}-\text{C}-\text{H}$$




из данных <https://www.sas.upenn.edu/~rachelmr/EthaneButane.html>

Продолжаем записывать общее выражение для потенциальной энергии системы:

$$V = V_b + V_a + V_t + \dots$$

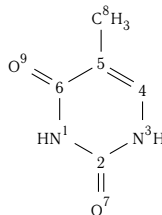
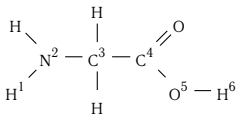
$$V_b = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_b} k_{b,i} (r - r_{0,i})^2$$

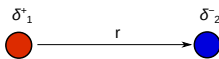
$$V_a = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N_a} k_{a,j} (\alpha - \alpha_{0,j})^2$$

$$V_t = \sum_{l=1}^{N_t} \left( \frac{1}{2} k_{t1,l} [1 + \cos(\varphi - \varphi_0)] + \frac{1}{2} k_{t2,l} [1 - \cos 2(\varphi - \varphi_0)] + \frac{1}{2} k_{t3,l} [1 + \cos 3(\varphi - \varphi_0)] \right)$$

$$V = \underbrace{V_b + V_a + (V_{ab}) + V_t + (V_{it}) + \dots}_{\text{Валентные взаимодействия}} + \underbrace{V_{vdW} + V_{el} + \dots}_{\text{Невалентные взаимодействия}}$$

- Для 1,2- и 1,3- атомов энергия невалентных взаимодействий не рассчитывается (уже включена в валентные);
- Для 1,5- и дальше — рассчитывается всегда;
- Для 1,4- энергия:
  - рассчитывается стандартным образом (чаще всего);
  - масштабируется на определённую величину ( $0 < x < 1$ );
  - не рассчитывается (редко).





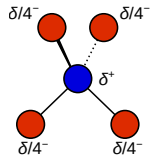
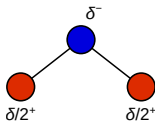
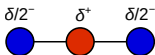
Электрический диполь

$$\vec{\mu} = \vec{r}_1 \delta_1 + \vec{r}_2 \delta_2$$

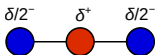
Чаще всего дипольный момент рассматривают для систем с  $|\delta_1^+| = |\delta_2^-|$

т. е. тех, у которых монопольный момент – общий заряд – равен 0

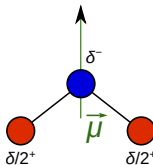
На каких рисунках  $\mu \neq 0$ ?



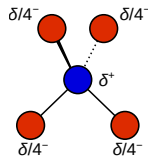
На каких рисунках  $\mu \neq 0$ ?



$D_{\infty h}$

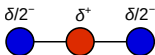


$C_{2v}$

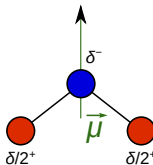


$T_d$

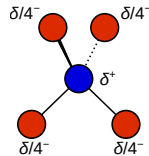
На каких рисунках  $\mu \neq 0$ ?



$D_{\infty h}$



$C_{2v}$



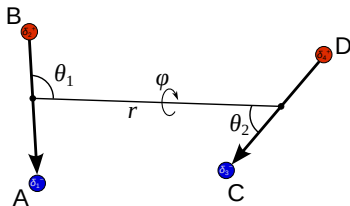
$T_d$

$\mu = 0$ , если в системе присутствует  $i$ , и/или больше одной оси  $C_n$

На каких рисунках взаимодействие выгодное (притяжение)?



d: отталкивание

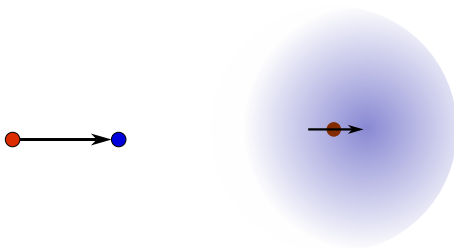


$$V_{\text{dd}} = -\frac{2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mu_1\mu_2}{r^3} (\cos\theta_1 \cos\theta_2 - \frac{1}{2} \sin\theta_1 \sin\theta_2 \cos\varphi)$$

## Наведённый диполь

$$\mu = 0$$

$$\mu = 0$$



$$\mu \neq 0$$





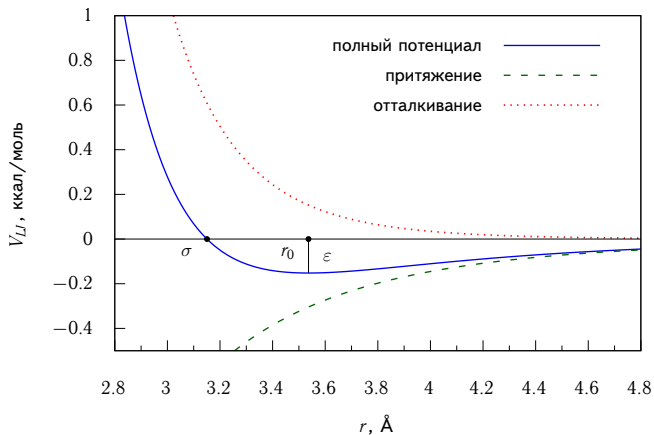
$$t = 0 + \delta t$$



$$V \propto \frac{1}{r^6}$$

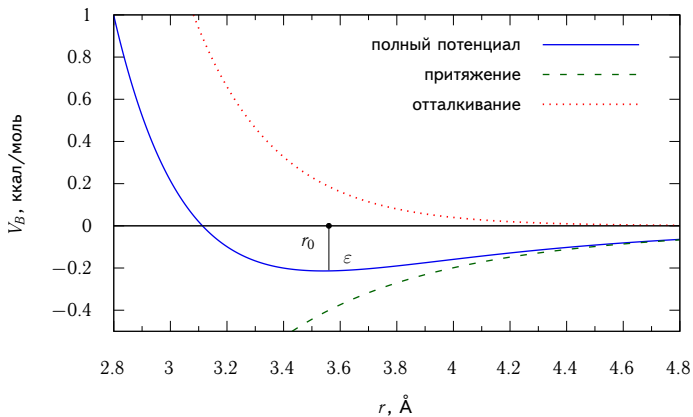
$$V_{LL} = \varepsilon \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right] = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

$$\sigma = \frac{r_0}{\sqrt[6]{2}}$$



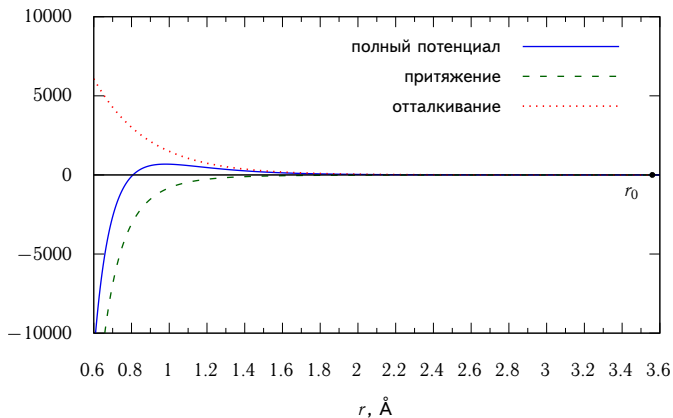
$$V_{6-exp} = Ae^{-Br} - \frac{C}{r^6}$$

$$V_B = \varepsilon \left[ e^{-r/r_0} - \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$



$$V_B = \varepsilon \left[ A e^{-Br/r_0} - C \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$

$$V_B = \varepsilon \left[ e^{-r/r_0} - \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$



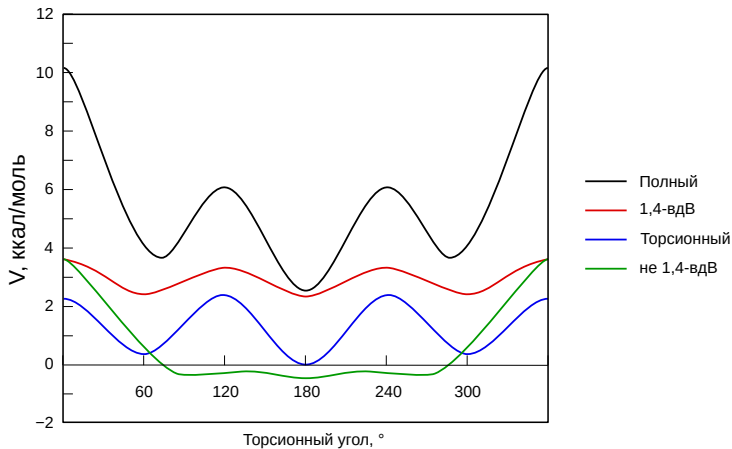
$$V_{LJ} = \varepsilon \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$

Параметры в силовых полях:  $r_0, \varepsilon$ :

Тип атома	$R_0$ , Å	$\varepsilon$ , ккал/моль	$\sigma$ , Å	$2r_{\text{vdW}}$ , Å
H (неполярный)	2.64	0.022	2.35	2.40
C (алькильный)	3.70	0.200	3.30	3.40
C (ароматический)	3.98	0.070	3.55	3.40
S (тиольный)	4.30	0.585	3.83	3.60

$$R_0(\text{AB}) = \frac{R_0(\text{A}) + R_0(\text{B})}{2} : \quad R_0(\text{H}_{\text{np}}\text{C}_{\text{ar}}) = \frac{2.64 + 3.98}{2} = 3.31$$

$$\varepsilon(\text{AB}) = \sqrt{\varepsilon(\text{A})\varepsilon(\text{B})} : \quad \varepsilon(\text{H}_{\text{np}}\text{S}_{\text{th}}) = \sqrt{0.022 \cdot 0.585} = 0.113$$



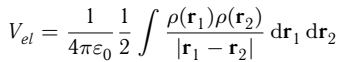
из данных <https://www.sas.upenn.edu/~rachelmr/EthaneButane.html>

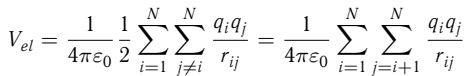


$$V = \underbrace{V_b + V_a + (V_{ab}) + V_t + (V_{it}) + \dots}_{\text{Валентные взаимодействия}} + \underbrace{V_{vdW} + \mathbf{V_{el}} + \dots}_{\text{Невалентные взаимодействия}}$$

### Закон Кулона:

$$V_{el} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r_{12}}$$

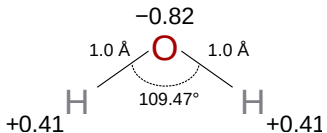




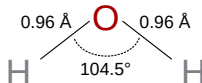


## Откуда брать частичные заряды на атомах?

- Из данных квантовой химии
- Параметризовать по наблюдаемым свойствам



модель SPC (Simple Point Charge)



### Экспериментальные данные

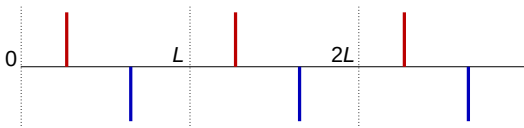


Модель точечных зарядов не учитывает поляризуемость молекул

т. е. изменении электронной плотности под влиянием окружения

0.  $A^{\delta+}; \delta+ = \text{const}$   
обычное (неполяризуемое) силовое поле;
1.  $A^{\delta+}; \delta+ \neq \text{const}$   
*флуктуирующие заряды [fluctuating charges]:*  
Величины зарядов уравниваются в процессе расчёта  
например, заряду приписывается фиктивная масса и величина заряда таким образом «двигается»;
2.  $A^{\delta_1 + \dots + \delta_2 +};$   
*осцилляторы Друде [Drude oscillators]*, «заряды на пружинках»  
Заряд делится надвое, и второй как-бы на пружинке.  
т. е. описывается потенциалом, определяющим атомную поляризуемость  
 $\alpha = q_D^2 / k_D.$
3.  $A \rightarrow$  (мультипольное разложение)  
постоянное (анизотропное) распределение  $\rho(r)$ : мультипольное разложение,  
изменяемый поляризуемый вклад: наводимый диполь  $\mu$ ,  
Величина  $\mu$  зависит от электростатического поля в точке.

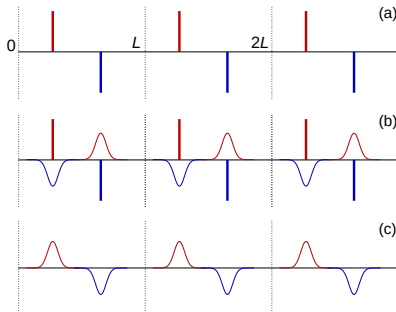
Заряды в периодической 1D ячейке:



$$V = \frac{1}{2} \sum_n' \sum_i^N \sum_j^N \frac{q_i q_j}{r_{ij} + nL}$$

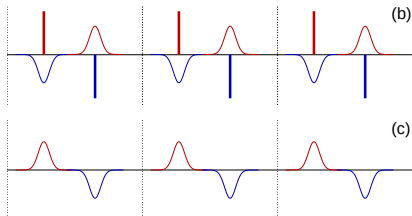
( $i \neq j | n = 0$ )

$$\rho_i(r) = q_i \delta(r - r_i)$$



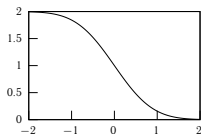
$$\rho_i(r) = q_i \delta(r - r_i)$$

$$\rho_i(r) = -q_i \left( \frac{\eta^2}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\eta^2(r-r_i)^2}$$



$$V = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left( \sum_{\mathbf{n}}' \frac{q_i q_j}{|\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}|} \operatorname{erfc}(\kappa |\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}|) + \frac{1}{\pi L^3} \sum_{k \neq 0} q_i q_j \left( \frac{2\pi}{k} \right)^2 e^{-k^2/4\kappa^2} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{ij}) \right) - \frac{\kappa}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N q_i^2 + \frac{2\pi}{3L^2} \left| \sum_{i=1}^N q_i \mathbf{r}_i \right|^2$$

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-t^2} dt$$



```
#####
##                                     ##
##  Force Field Definition           ##
##                                     ##
#####

forcefield                MM2-1991

bondunit                  71.94
bond-cubic                -2.0
bond-quartic              1.25      !! not in original MM2
angleunit                 0.02191418
angle-sextic              0.00000007
strbndunit               2.51118
opbndtype                ALLINGER
opbndunit                0.02191418
opbnd-sextic             0.00000007
torsionunit              0.5
vdwtype                  BUCKINGHAM
radiusrule               ARITHMETIC
radiustype               R-MIN
radiussize               RADIUS
epsilon rule             GEOMETRIC
a-exp term               290000.0
b-exp term               12.5
c-exp term               2.25
vdw-14-scale             1.0
chg-14-scale             1.0
electric                 332.0538
dielectric               1.5
```

$$V = \varepsilon \left[ A e^{-B \left( \frac{r}{r_0} \right)} - C \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$

$$\varepsilon_{XY} = \sqrt{\varepsilon_X \varepsilon_Y}$$

## Примеры описания силовых полей (2)

```
#####
##                                     ##
##   Atom Type Definitions           ##
##                                     ##
#####
```

atom	1	C	"CSP3 ALKANE"	6	12.000	4
atom	2	C	"CSP2 ALKENE"	6	12.000	3
atom	3	C	"CSP2 CARBONYL"	6	12.000	3
atom	4	C	"CSP ALKYNE, C=C=O"	6	12.000	2
atom	5	H	"NONPOLAR HYDROGEN"	1	1.008	1
atom	6	O	"-O- ALCOHOL, ETHER"	8	15.995	4
atom	7	O	"=O CARBONYL"	8	15.995	1
atom	8	N	"NSP3"	7	14.003	4
atom	9	N	"NSP2 AMIDE"	7	14.003	3
atom	10	N	"NSP"	7	14.003	2

```
#####
##                                     ##
##   Van der Waals Parameters         ##
##                                     ##
#####
```

vdw	1	1.9000	0.0440	
vdw	2	1.9400	0.0440	
vdw	3	1.9400	0.0440	
vdw	4	1.9400	0.0440	
vdw	5	1.5000	0.0470	0.915
vdw	6	1.7400	0.0500	
vdw	7	1.7400	0.0660	
vdw	8	1.8200	0.0550	
vdw	9	1.8200	0.0550	
vdw	10	1.8200	0.0550	

```
#####
##                                     ##
##   Van der Waals Pair Parameters   ##
##                                     ##
#####
```

vdwpair	1	5	3.3400	0.0460
vdwpair	1	36	3.3370	0.0460
vdwpair	2	21	2.3400	1.1000
vdwpair	2	23	2.3400	0.4000
vdwpair	2	24	2.3400	1.0000
vdwpair	2	28	2.3400	1.0000
vdwpair	6	21	1.8300	1.3000
vdwpair	6	23	1.8300	0.6000

## Примеры описания силовых полей (4)

```
#####
##                                     ##
##   Bond Stretching Parameters   ##
##                                     ##
#####
```

bond	1	1	4.400	1.5230
bond	1	2	4.400	1.4970
bond	1	3	4.400	1.5090
bond	1	4	5.200	1.4700
bond	1	5	4.600	1.1130
bond	1	6	5.360	1.4020

```
#####
##                                     ##
##   Angle Bending Parameters         ##
##                                     ##
#####
```

angle	1	1	1	0.450	109.47	109.51	109.50
angle	1	1	2	0.450	109.47	109.51	109.50
angle	1	1	3	0.450	107.80	109.90	110.00
angle	1	1	4	0.450	109.47	112.40	109.00
angle	1	1	5	0.360	109.39	109.41	110.00
angle	1	1	6	0.700	107.50	107.70	107.40
angle	1	1	8	0.570	109.47	108.80	109.50
angle	1	1	9	0.500	109.28	110.78	109.28
angle	1	1	11	0.650	109.50	107.50	109.50
angle	1	1	12	0.560	108.20		

```
#####
##                                     ##
##   Atomic Partial Charge Parameters   ##
##                                     ##
#####

charge      16           1.0000
charge      30           1.0000
charge      39           1.0000
charge      47          -0.5000

#####
##                                     ##
##   Bond Dipole Moment Parameters     ##
##                                     ##
#####

dipole      1    2           0.3000    0.500
dipole      1    3           0.3000    0.500
dipole      1    4           0.7500    0.500
dipole      1    6           0.4400    0.500
dipole      1    8           0.0400    0.500
dipole      1    9           1.4700    0.500
dipole      1   11           1.8200    0.500
dipole      1   12           1.9400    0.500
```

$$V_{dd} = -\frac{2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mu_1\mu_2}{r^3} (\cos\theta_1 \cos\theta_2 - \frac{1}{2} \sin\theta_1 \sin\theta_2 \cos\varphi)$$