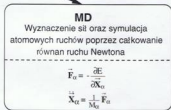


Określanie najbardziej stabilnych stanów konformacyjnych.
 "Docking" inhibitorów w centrach wiążących.
 Zwijanie się białek.



Symulacja szybkich, zależnych od czasu procesów molekularnych, np. lokalnych przejść konformacyjnych.
 Analiza procesów hydratacyjnych i innych dynamicznych oddziaływań międzycząsteczkowych.
 Biologiczna aktywność z atomowych ruchów.

Molecular Mechanics (PEF, CFF)

$$E_{\text{bond}} = \sum K_r (r - r_0)^2$$

$$E_{\text{angle}} = \sum K_\theta (\theta - \theta_0)^2$$

$$E_{\text{torsion}} = \sum V_3/2 (1 + \cos(3\tau))$$

$$E_{\text{gauche}} = \sum V_2/2 (1 + \cos(2\tau))$$

$$E_{\text{van der Waals}} = \sum A_{ij}/r_{ij}^{12} - B_{ij}/r_{ij}^6$$

$$E_{\text{coulomb}} = \sum q_i q_j / \epsilon r_{ij}$$