

$$E_{ij} = \epsilon_{ij} \left(\left(\frac{s_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{s_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right)$$

$$\epsilon_{ij} \left(\left(\frac{s_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{s_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right)$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

$$\sum_{i=1}^N ASP(i)ASA(i)$$

$$U = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N flag(i,j) \left(\epsilon_{ij} \left(\left(\frac{s_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{s_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \right) + \sum_{i=1}^N ASP(i)ASA(i)$$