

$$\begin{aligned}
E_{ij} &= \epsilon_{ij} \left(\left(\frac{s_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{s_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right) \\
&\epsilon_{ij} \left(\left(\frac{s_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{s_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right) \\
&\text{coulombs} \\
&\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \\
&\sum_{i=1}^N ASP(i)ASA(i) \\
U &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N flag(i,j) \left(\epsilon_{ij} \left(\left(\frac{s_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{s_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \right) + \sum_{i=1}^N ASP(i)ASA(i) \\
&ASA \\
ASA_i &= 0.2 * 4 * \pi * (r_i + R_{H2O})^2
\end{aligned}$$