bond A-B (a)

bond B-B (b)

angle A-B-B (c)

angle B-A-B (d)

improper A-B-B-B (e)

Ryckaert-Belleman B-A-B-B (f)

rdf A-A (g)

rdf B-B (h)

$p(\theta)$

$\theta$ [°]

$g(r)$

$r$ [Å]

rdf

reference
model A
model B
model C