

- Which of Newton's laws is depicted in equation 1?

Es una forma de la segunda ley del movimiento de Newton, que establece que la aceleración de un objeto es directamente proporcional a la fuerza neta que actúa sobre él e inversamente proporcional a su masa.

- What is an "improper" dihedral?

Un dihedral “impropio” se refiere a un tipo especial de interacción dihedral utilizada en las simulaciones de dinámica molecular. Los dihedrales impropios se utilizan para restringir la geometría de las moléculas y no necesariamente tienen una relación simple con los enlaces químicos convencionales

- How are the parameters for a force field determined?

Today, such force fields present a good compromise between accuracy and computational efficiency. NAMD employs a common potential energy function that has the following contributions:

$$U_{total} = U_{bond} + U_{angle} + U_{dihedral} + U_{vdW} + U_{Coulomb}$$

- What is a "force field"?

En el contexto de las simulaciones de dinámica molecular, un “campo de fuerza” es un método computacional utilizado para estimar las fuerzas entre los átomos dentro de las moléculas y también entre las moléculas