

## Cálculo de las interacciones de largo alcance

---

Número de créditos: 10

Horas a la semana: 10

Teoría: 6

Práctica: 4

Autoestudio: 6

Requisitos: Ninguno

Clave: AFE-11

Asignatura: Optativa

Materia asociada a la Línea de investigación: OF

---

Descripción de la asignatura: Varios de los potenciales útiles para describir las interacciones entre partículas en la física son de naturaleza de largo alcance, entre ellos están el potencial de Coulomb y el potencial gravitacional. En esta materia se estudiarán los métodos utilizados para calcular estas interacciones.

Índice temático:

1. Introducción. Convergencia de los potenciales de largo alcance.
2. Método de Ewald para sistemas en bulto.
3. Método de Wolf para sistemas en bulto.
4. Método de Ewald para Slabs.
5. Método de Ewald para bulto adaptado a Slabs.
6. Método de Wolf para bulto adaptado a Slabs.

Bibliografía

- Jean Pierre Hansen and Ian R. McDonald, "Theory of simple liquids, Academic Press, 1990.

- M. P. Allen and D. J. Tildesley, Computer simulation of liquids. Clarendon Press, Oxford, 1987.
- D. Frenkel "Understanding molecular simulation" , Academic Press. 2001.
- J. M. Haile, "Molecular dynamics simulation", John Wiley & sons, inc. 1992.