

Cálculo de las frecuencias de vibración de una molécula mediante la resolución numérica de la ecuación de Newton

Santiago Heredia Avalos y Rafael García Molina

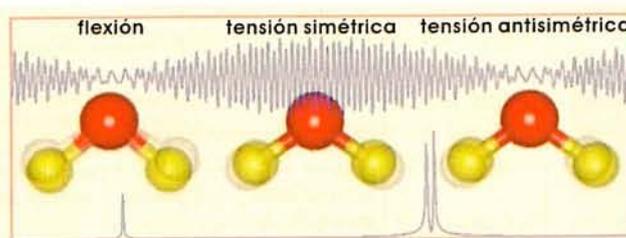
We have developed a procedure to calculate the frequencies corresponding to the normal modes of vibration for simple molecules, which is based in the numerical resolution of Newton's equation of motion for each one of the atoms in the molecule. The time evolution of the atomic coordinates results from the superposition of several oscillatory movements with different frequencies, which are associated to the normal modes of the molecular vibration. These frequencies are obtained calculating the Fourier transform of the time evolution of one of these atomic coordinates. We have applied this method to the water molecule, determining the frequencies of its three vibration normal modes, which agree quite well with both experimental and calculated data appearing in the literature.

1. Introducción

Las vibraciones de moléculas sencillas suelen mencionarse en los primeros cursos de física como ejemplo típico de oscilaciones acopladas [1], sin embargo la resolución detallada del problema se suele posponer hasta que se estudian las pequeñas oscilaciones y se introducen los modos propios de un conjunto de osciladores acoplados [2]. Las moléculas de CO₂ (lineal) y de H₂O (triangular) son dos de los casos que se estudian típicamente [3].

Una molécula constituida por N átomos posee en total $3N$ grados de libertad, que corresponden a la terna de coordenadas de cada uno de los N átomos. De estos grados de libertad, 3 corresponden a la traslación de la molécula a lo largo de cada uno de los ejes cartesianos y otros 3 están asociados a la rotación de la molécula en torno a estos ejes. Por tanto, los $3N - 6$ grados de libertad restantes corresponden a los modos normales de vibración de la molécula; en el caso de una molécula lineal habría $3N - 5$ modos de vibración, ya que la rotación en torno al eje de la molécula carece de sentido. Nuestro objetivo es estudiar las vibraciones moleculares asociadas a estos $3N - 6$ grados de libertad, por esta razón, de los $3N$ grados de libertad totales es preciso eliminar aquéllos correspondientes a la traslación y a la rotación de la molécula. Como veremos, estas restricciones al movimiento de la molécula están asociadas con las leyes de conservación del momento lineal y del momento angular.

En la actualidad, el gran desarrollo de los ordenadores personales ha favorecido la utilización del cálculo numérico tanto para ilustrar la resolución de problemas elementales como para abordar el estudio de sistemas que no pueden resolverse analíticamente de forma sencilla [4-6].



En este trabajo presentamos un procedimiento para calcular numéricamente las frecuencias de los modos normales de vibración de moléculas sencillas. El método se basa en la resolución numérica de las ecuaciones de Newton del movimiento de cada uno de los átomos que constituyen la molécula, los cuales interactúan entre sí mediante un potencial que puede tener cualquiera de las formas típicas que representan la interacción entre los constituyentes moleculares (fuertemente repulsiva a cortas distancias, y suavemente atractiva a grandes distancias, con un mínimo que corresponde a la situación de equilibrio).

De esta forma obtenemos cómo varían con el tiempo las coordenadas espaciales y las velocidades de cada uno de los átomos que forman la molécula; la evolución temporal de cualquiera de estas magnitudes muestra un comportamiento periódico, resultante del acoplamiento de diversos modos de vibración. Aplicando la transformada de Fourier a cualquiera de las coordenadas o de las componentes de las velocidades atómicas, obtenemos las frecuencias de los modos propios de vibración de la molécula.

2. Procedimiento de cálculo

Consideremos una molécula formada por N átomos cuyas coordenadas en equilibrio son conocidas. Al desplazar estos átomos de las posiciones de equilibrio, aparecen fuerzas interatómicas que tien-

den a desplazarlos hacia sus posiciones de equilibrio. Así, las coordenadas de estos átomos evolucionarán según la naturaleza de las fuerzas interatómicas implicadas, produciéndose oscilaciones de los átomos alrededor de sus posiciones de equilibrio.

El movimiento de este conjunto de átomos puede descomponerse en tres tipos de movimiento: la traslación del centro de masas de la molécula, la rotación respecto de cada uno de los ejes cartesianos y, por último, las variaciones de las posiciones relativas interatómicas, las cuales producen los movimientos de vibración.

Para proceder al estudio numérico del movimiento de los átomos que constituyen la molécula, perturbaremos ligeramente sus posiciones iniciales, de manera que la fuerza \mathbf{F}_j que actúe sobre el átomo j sea distinta de cero. Las ecuaciones de Newton del movimiento describen la evolución temporal de las coordenadas de cada átomo (de masa m_j) sometido a una fuerza dada:

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_j(t)}{dt^2} = \frac{\mathbf{F}_j(t)}{m_j} \quad (1)$$

donde $\mathbf{r}_j(t) = [x_j(t), y_j(t), z_j(t)]$ es el vector posición cuando ha transcurrido un tiempo t después de iniciada la perturbación.

La ecuación (1) aplicada a las 3 coordenadas de cada átomo de la molécula constituye un sistema de $3N$ ecuaciones diferenciales de segundo orden, por ello es necesario conocer $6N$ condiciones de contorno. En nuestro caso usaremos las $3N$ coordenadas y las $3N$ velocidades iniciales del conjunto de átomos que forman la molécula, todas ellas después de la perturbación inicial. Por comodidad en el cálculo consideraremos que estas $3N$

velocidades iniciales son nulas. Por otra parte, si consideramos que inicialmente la molécula estaba en reposo (momento lineal y momento angular nulos), para evitar aquellas situaciones en las cuales la molécula experimentaría un movimiento de traslación o rotación sólo deben perturbarse $3N - 6$ coordenadas atómicas (correspondientes a los $3N - 6$ grados de libertad asociados a la vibración), de tal manera que las 6 coordenadas atómicas restantes se deben calcular aplicando la conservación del momento lineal y angular.

Si $\mathbf{r}_{0,j} = (x_{0,j}, y_{0,j}, z_{0,j})$ es el vector posición del átomo j -ésimo antes de la perturbación y $\mathbf{r}_j(t)$ es el vector posición de este mismo átomo en el instante t después de la perturbación, la conservación del momento lineal de la molécula implica que

$$\sum_{j=1}^N m_j \mathbf{r}_j(t) = 0 \quad (2)$$

y la conservación del momento angular da lugar a

$$\sum_{j=1}^N m_j \mathbf{r}_{0,j} \times [\mathbf{r}_j(t) - \mathbf{r}_{0,j}] = 0 \quad (3)$$

En la ecuación anterior hemos tenido en cuenta que los vectores de posición están expresados con respecto al centro de masa de la molécula.

Como vemos, si inicialmente perturbamos aleatoriamente $3N - 6$ coordenadas atómicas cualesquiera, las ecuaciones (2) y (3) aplicadas al instante inicial $t = 0$ nos permiten calcular las 6 coordenadas atómicas iniciales restantes garantizando la ausencia de rotación o traslación posterior a la perturbación inicial.

Una vez conocidas las $3N$ coordenadas atómicas iniciales (fuera de la posición de equilibrio), su evolución temporal dependerá del tipo de interacción que experimenten. Describiremos la energía de interacción en función de un potencial de interacción $V(q)$ que dependa de coordenadas internas q de la molécula. La fuerza asociada a la interacción a lo largo de la coordenada interna q se determinará a partir de la expresión $F(q) = -\partial V(q)/\partial q$.

La dependencia de la fuerza de interacción con las coordenadas internas implica que en cada tiempo t la fuerza sobre cada átomo dependerá de las coordenadas instantáneas de todos los átomos del sistema ($\mathbf{F}_j(t) = \mathbf{F}_j[\mathbf{r}_1(t), \dots, \mathbf{r}_N(t)]$), con lo cual tendremos que resolver un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas, ya que las coordenadas atómicas que deseamos calcular dependen de las fuerzas de interacción, las cuales a su vez también dependen de las coordenadas atómicas.

Los diversos métodos utilizados para resolver las ecuaciones del movimiento se basan en discretizar de alguna forma la derivada temporal que aparece en la ecuación (1). Algunos textos de física general tratan la resolución numérica de ecuaciones del movimiento (por ejemplo, en la Ref. [7] se discuten con detenimiento las oscilaciones de un péndulo y la órbita de un planeta); para conocer más detalles sobre los diversos algoritmos numéricos pueden consultarse textos de cálculo numérico [8, 9] o artículos específicos [10]. Nosotros emplearemos el algoritmo de Verlet [11]

$$\mathbf{r}_j(t + \Delta t) = 2\mathbf{r}_j(t) - \mathbf{r}_j(t - \Delta t) + \frac{\mathbf{F}_j(t)}{m_j} (\Delta t)^2 \quad (4)$$

para calcular la nueva posición de cada átomo después de un paso de tiempo Δt . Este algoritmo resulta muy útil para calcular trayectorias en sistemas de muchas partículas, ya que es invariante bajo inversión temporal y permite obtener la posición de cada partícula con un buen error de truncación en los cálculos. Conviene destacar que cuando usamos este algoritmo no es preciso conocer las velocidades de los átomos que constituyen la molécula. En cualquier caso, si queremos calcularlas podemos recurrir a la expresión

$$\mathbf{v}_j(t) = \frac{\mathbf{r}_j(t + \Delta t) - \mathbf{r}_j(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (5)$$

El resultado que obtengamos para la evolución temporal de las coordenadas dependerá del algoritmo numérico que utilicemos, de las condiciones iniciales impuestas por la perturbación y del paso de tiempo Δt que se emplee para resolver la ecuación del movimiento (4). Este paso de tiempo ha de ser suficientemente pequeño para que las trayectorias sean precisas, y a la vez suficientemente grande para minimizar el tiempo de cálculo en el ordenador. Una buena solución (o, al menos, una solución razonablemente satisfactoria) es exigir que, para el Δt escogido, se conserve el momento lineal, el momento angular y la energía del sistema estudiado. Es decir, además de satisfacer las ecuaciones (2) y (3), se debe cumplir que $E_{\text{total}}(t_0 + n \Delta t) = E_{\text{total}}(t_0)$ (siendo t_0 el tiempo inicial) después de transcurridos n pasos de tiempo Δt .

La evolución temporal de cada una de las coordenadas obtenidas por el procedimiento descrito anteriormente surge como una combinación lineal de los movimientos asociados a los $3N - 6$

modos normales de vibración de la molécula, ya que hemos eliminado la traslación y la rotación de la misma. Para obtener cada una de las frecuencias ν_k asociadas a los modos normales de vibración basta con realizar la transformada de Fourier de la dependencia temporal de cualquiera de estas coordenadas; por ejemplo, para la coordenada x_j tendríamos [9]

$$x_j(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} dt x_j(t) e^{i2\pi\nu t}. \quad (6)$$

Una representación gráfica de x_j en función de ν nos permitirá obtener fácilmente las frecuencias ν_k asociadas a cada modo normal de vibración, ya que $x_j(\nu)$ es distinta de cero sólo cuando $\nu \equiv \nu_k$. Se podría realizar una discusión análoga a la anterior para las coordenadas $y_j(t)$ y $z_j(t)$.

En resumen, una vez obtenida la evolución temporal de las coordenadas de todos los átomos, aplicaremos la transformada de Fourier a una cualquiera de ellas, lo cual nos dará el espectro de frecuencias ν_k de las vibraciones moleculares para un potencial de interacción determinado.

3. Aplicación a un caso concreto: vibraciones de la molécula de agua

A continuación aplicaremos el modelo que acabamos de describir a una molécula sencilla, como la de agua. Esta molécula tiene una estructura triangular y está constituida por dos átomos de hidrógeno unidos respectivamente a un átomo de oxígeno. Así pues, como $N=3$, la molécula de agua tiene 3 grados de libertad asociados al movimiento de vibración ($3 \cdot 3 - 6 = 3$); por tanto, le corresponderán 3 frecuencias de vibración. En lo sucesivo usaremos la siguiente nomenclatura: $\mathbf{r}_1(t)$ y $\mathbf{r}_3(t)$ serán los vectores posición de los átomos de hidrógeno, mientras que $\mathbf{r}_2(t)$ será el vector posición del átomo de oxígeno.

Un potencial de interacción tipo Morse [12]

$$V(q) = D_q \left\{ \exp[-\alpha_q(q - q_0) - 1] \right\}^2 \quad (7)$$

describe bastante bien la interacción a lo largo del enlace O-H, así como la interacción angular H-O-H [13]; en cada caso, las coordenadas internas son, respectivamente, la longitud d del enlace O-H y el ángulo θ entre ambos enlaces O-H. Los parámetros D_q , α_q y q_0 representan, respectivamente, la energía de disociación del enlace, la intensidad de la interacción y la coordenada interna de equilibrio.

El módulo de la fuerza recuperadora asociada a la coordenada interna q es:

$$F_q = -\frac{\partial V(q)}{\partial q} = 2\alpha_q D_q \exp[-\alpha_q(q - q_0)] \cdot \{\exp[-\alpha_q(q - q_0)] - 1\} \quad (8)$$

En la tabla I aparecen los parámetros que intervienen en la ecuación (7) para cada coordenada interna [13].

Tabla I. Parámetros que intervienen en la ecuación (7) para cada coordenada interna [13]

| q | q_0 | D_q (eV) | α_q |
|----------|----------------------------|--------------------|---|
| d | $d_0 = 0.9572 \text{ \AA}$ | $D_d = 5.691$ | $\alpha_d = 2.141 \text{ \AA}^{-1}$ |
| θ | $\theta_0 = 104.52^\circ$ | $D_\theta = 4.261$ | $\alpha_\theta = 0.7060 (\text{^\circ})^{-1}$ |

Los potenciales de Morse responsables de la interacción a lo largo del enlace y angular, respectivamente, para la molécula de agua aparecen representados mediante líneas continuas en la figura 1, junto con el parámetro característico D_q en cada caso. Puede comprobarse que la longitud de equilibrio del enlace O-H y el ángulo de equilibrio H-O-H corresponden, respectivamente, a los valores d_0 y θ_0 que aparecen en la tabla I. Las líneas discontinuas representan, en cada caso, el potencial armónico que se obtendría en la aproximación de pequeñas oscilaciones alrededor de los valores d_0 y θ_0 , respectivamente.

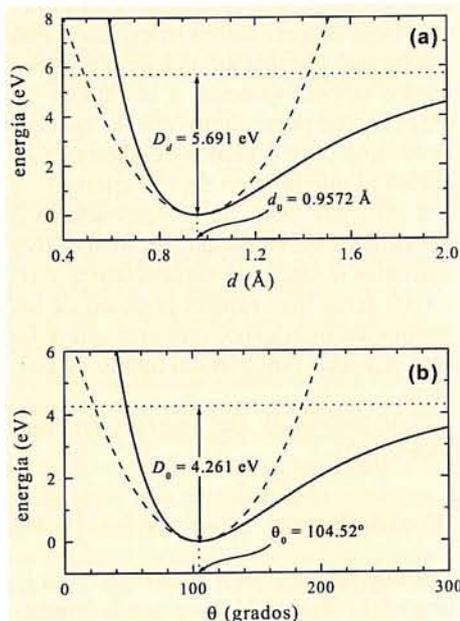


Figura 1. Potencial de Morse para la interacción (a) de enlace y (b) angular en la molécula de agua. Aparecen indicados los parámetros del potencial más representativos en cada caso. Las curvas discontinuas representan los potenciales de oscilador armónico equivalentes a los correspondientes potenciales de Morse en el caso de pequeñas oscilaciones.

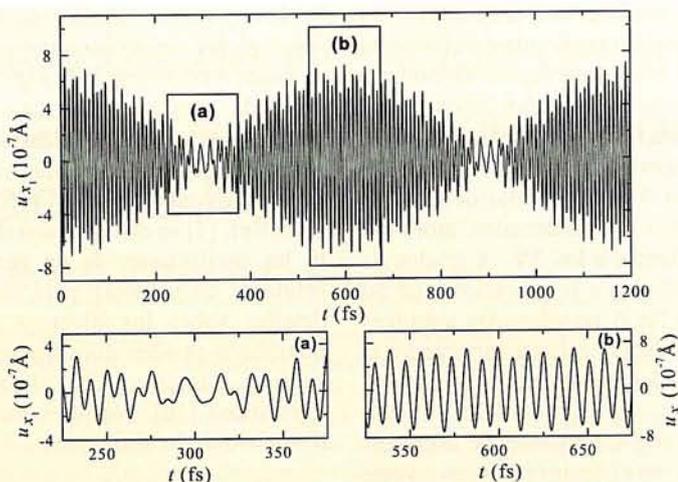


Figura 2. Evolución temporal del desplazamiento de la posición de equilibrio u_{x_1} , correspondiente a uno de los átomos de hidrógeno que constituyen la molécula de agua. Las figuras (a) y (b) muestran sendos detalles de u_{x_1} . Las perturbaciones de las coordenadas de equilibrio iniciales son $u_{x_1}(0) = 5 \cdot 10^{-7} \text{ \AA}$, $u_{y_1}(0) = -6 \cdot 10^{-7} \text{ \AA}$ y $u_{x_2}(0) = 10^{-7} \text{ \AA}$; el paso de tiempo y el intervalo temporal usados son, respectivamente, $\Delta t = 5 \cdot 10^{-5} \text{ fs}$ y $T = 5 \cdot 10^3 \text{ fs}$.

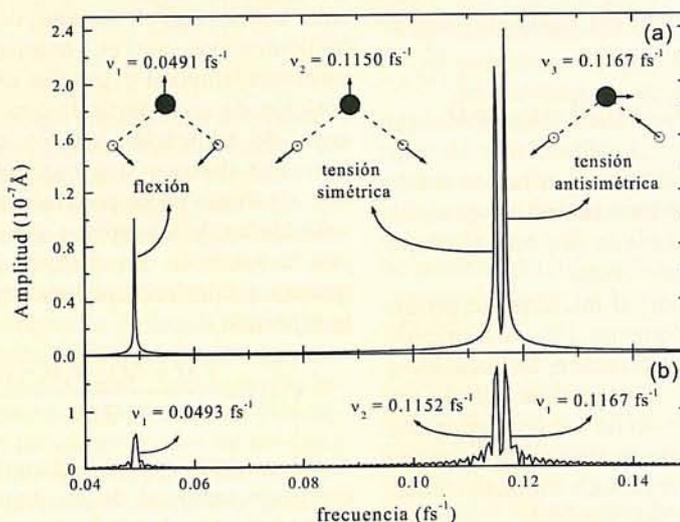


Figura 3. Espectro de frecuencias obtenido tras aplicar la transformada de Fourier a la evolución temporal de la posición $x_1(t)$ de uno de los átomos de hidrógeno. Los resultados de la figura (a) se han obtenido con $\Delta t = 5 \cdot 10^{-5} \text{ fs}$ y $T = 5 \cdot 10^3 \text{ fs}$, y los de la figura (b) usando $\Delta t = 5 \cdot 10^{-4} \text{ fs}$ y $T = 1.2 \cdot 10^3$. En ambos casos se obtienen frecuencias de vibración semejantes, aunque peor definidas en la figura (b).

Considerando la estructura geométrica de la molécula de agua es posible restringir su movimiento al plano xy , con lo cual, $z_j(t) = z_{0,j} = 0$, y las ecuaciones vectoriales (2) y (3) se reducen a

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^3 m_j x_j(t) &= 0 \\ \sum_{j=1}^3 m_j y_j(t) &= 0 \\ \sum_{j=1}^3 m_j \{x_{0,j} [y_j(t) - y_{0,j}] - \\ &\quad - y_{0,j} [x_j(t) - x_{0,j}]\} = 0 \end{aligned} \quad (9)$$

donde las dos primeras expresiones provienen de la conservación del momento

lineal (la posición del centro de masas no cambia) y la última de la conservación del momento angular (la molécula no gira).

Para resolver las ecuaciones del movimiento de cada átomo, hemos aplicado el algoritmo de Verlet [11] con un paso de tiempo $\Delta t = 5 \cdot 10^{-5} \text{ fs}$ y hemos calculado las coordenadas de todos los átomos durante un intervalo temporal $T = 5 \cdot 10^3 \text{ fs}$. El valor escogido para Δt y T es tal que la duración del cálculo no es muy larga (unos 7 minutos en un ordenador Pentium III 600 MHz) y los resultados obtenidos satisfacen las restricciones físicas impuestas (leyes de conservación).

En la figura 2 se muestra la evolución temporal del desplazamiento de la posición de equilibrio $u_{x_1}(t) = x_1(t) - x_{0,1}$ que corresponde a uno de los átomos de hidrógeno de la molécula de agua, cuando las perturbaciones iniciales son $u_{x_1}(0) = 5 \cdot 10^{-7}$ Å, $u_{y_1}(0) = -6 \cdot 10^{-7}$ Å y $u_{x_3}(0) = 10^{-7}$ Å, elegidas al azar. En esta figura puede apreciarse una estructura periódica (tanto globalmente como en los detalles que se han ampliado), aunque no es sencillo discernir a simple vista un comportamiento armónico simple. Esto es debido a que el movimiento de cualquiera de los átomos es el resultante de la superposición de los modos propios de vibración de la molécula, tal y como se indica en el texto.

Aplicando la transformada de Fourier [9] a la coordenada representada en la figura 2, obtenemos el espectro de frecuencias que aparece en la figura 3a. Como puede apreciarse, se distinguen claramente tres picos que corresponden a las frecuencias de los tres modos de vibración de la molécula de agua: la flexión del ángulo H-O-H y las tensiones simétrica y antisimétrica del enlace O-H. En la tabla II se muestran los valores de las frecuencias de vibración calculadas a partir de la transformada de Fourier de u_{x_1} , así como resultados obtenidos tanto experimentalmente como mediante cálculos más elaborados [1, 3, 14-16]. Como se puede apreciar, el acuerdo es bastante satisfactorio.

Evidentemente, si aumentamos el valor del paso Δt y disminuimos el valor del intervalo temporal T , obtendremos resultados en un tiempo de cálculo inferior, pero a costa de incrementar la imprecisión de los resultados obtenidos. En la figura 3b se muestra la transformada de Fourier de $u_{x_1}(t)$ cuando $\Delta t = 5 \cdot 10^{-4}$ fs y $T = 1.2 \cdot 10^3$ fs. En este caso el tiempo necesario para realizar el cálculo con el mismo ordenador es de tan solo 10 segundos. A pesar de que las frecuencias asociadas a los modos normales de vibración se encuentran en este caso menos definidas, el resultado es bastante similar al obtenido cuando se empleaba un tiempo de cálculo unas cuarenta veces superior. Esto nos da una idea de la robustez del método numérico expuesto.

4. Conclusiones

El método que hemos presentado puede aplicarse a diversas moléculas sencillas (por ejemplo: D_2O , CO_2 , C_6H_6 ,

Tabla II. Frecuencias de vibración de la molécula de agua. En la segunda fila se muestran los resultados obtenidos a partir de la transformada de Fourier de u_{x_1} , usando los parámetros Δt y T que se indican. En las siguientes filas se recopilan varios resultados, tanto teóricos como experimentales, que aparecen en la bibliografía [1, 3, 14-16]

| | Flexión ν_1 (fs ⁻¹) | Tensión simétrica ν_2 (fs ⁻¹) | Tensión antisimétrica ν_3 (fs ⁻¹) |
|--|--|--|--|
| $\Delta t = 5 \cdot 10^{-5}$ fs, $T = 5 \cdot 10^3$ fs | 0.04907 | 0.1150 | 0.1167 |
| $\Delta t = 5 \cdot 10^{-4}$ fs, $T = 1.2 \cdot 10^3$ fs | 0.04932 | 0.1152 | 0.1167 |
| Alonso y Finn [1] | 0.04802 | 0.1099 | 0.1131 |
| Díaz Peña y Reig Muntaner [3] | 0.04782 | 0.1095 | 0.1126 |
| Barrow [14] | 0.04632 | 0.1095 | 0.1126 |
| Lacey [15] | 0.04925 | 0.1149 | 0.1180 |
| CRC Handbook [16] | 0.04782 | 0.1096 | 0.1126 |

etc.), con tal que se conozcan los potenciales que describen las interacciones intramoleculares.

Esta forma de estudiar las vibraciones moleculares usa conceptos clásicos fácilmente accesibles a estudiantes de los primeros cursos universitarios. Las ecuaciones de Newton (aplicadas a un conjunto de partículas), así como los potenciales de interacción y las leyes de conservación, son materias que se tratan habitualmente en un primer curso de física (tanto para estudiantes de las titulaciones de Física como de Química). Por otra parte, la discretización de ecuaciones diferenciales y la transformada de Fourier se suelen abordar con más detenimiento al discutir procedimientos numéricos de interés en Física (y Química), como pueden ser las asignaturas de Física Computacional o de Métodos Matemáticos de la Física.

Además, el procedimiento de aplicar a un problema concreto (como es el de las vibraciones moleculares) los conocimientos adquiridos "en abstracto", tales como leyes de conservación, ecuaciones de Newton, transformada de Fourier, etc. sirve para que los estudiantes los comprendan y retengan mejor.

Bibliografía

- [1] M. ALONSO Y E. J. FINN, *Física* (Addison-Wesley Iberoamericana, Wilmington, Delaware, 1995). Secc. 10.11.
- [2] L. D. LANDAU Y E. M. LIFSHITZ, *Mecánica*, 2º ed., Vol. 1 del *Curso de física teórica* (Reverté, Barcelona, 1975). Probl. 2, Secc. 24.
- [3] M. DÍAZ PEÑA Y A. REIG MUNTANER, *Química Física*, Vol. 1 (Alhambra, Madrid, 1972) p. 134.
- [4] N. W. PREYER, The coupled harmonic oscillator. Not just for seniors anymore, *The Physics Teacher* **34** (1996) 52.
- [5] A. GONZÁLEZ GONZÁLEZ, J. RUBAYO SO-NEIRA Y E. PORTUONDO CAMPA, Empleo de métodos numéricos en la resolución de problemas académicos de Mecánica Clásica, *Revista Española de Física* **15** (2001) 49.
- [6] J. MARRO, Física y computación, *Revista Española de Física* **14** (2000) 43.
- [7] R. P. FEYNMAN, R. B. LEIGHTON Y M. SANDS, *Física*, Vol. I (Addison-Wesley Iberoamericana, México, 1971) Seccs. 9.5-7.
- [8] R. GUARDIOLA, E. HIGÓN Y J. ROS, *Mètodes numèrics per a la física* (Universitat de València, Valencia, 1997).
- [9] W. H. PRESS, S. A. TEUKOLSKY, W. T. VETTERLING Y B. P. FLANNERY, *Numerical Recipes, in Fortran. The Art of Scientific Computing*, 2ª ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 1992).
- [10] R. W. STANLEY, Numerical methods in mechanics, *American Journal of Physics* **52** (1984) 499.
- [11] L. VERLET, Computer experiments on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules, *Physical Review* **159** (1967) 98.
- [12] P. M. MORSE, Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels, *Physical Review* **34** (1929) 57.
- [13] M. A. SHUM Y R. O. WATTS, Quantum Monte Carlo studies of vibrational states in molecules and clusters, *Physics Reports* **204** (1991) 293.
- [14] G. M. BARROW, *The structure of molecules* (Benjamin, New York, 1964) p. 79.
- [15] A. R. LACEY, A student introduction to molecular vibrations, *Journal of Chemical Education* **64** (1987) 756.
- [16] D. R. LIDE, *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 73ª ed. (CRC Press, Boca Raton, 1992) p. 9 -147.

Los autores dan las gracias a José Luis Sánchez Méndez por las discusiones mantenidas durante los inicios de este trabajo.

Santiago Heredia Avalos
y Rafael García Molina

están en el Dpto. de Física de la
Universidad de Murcia.