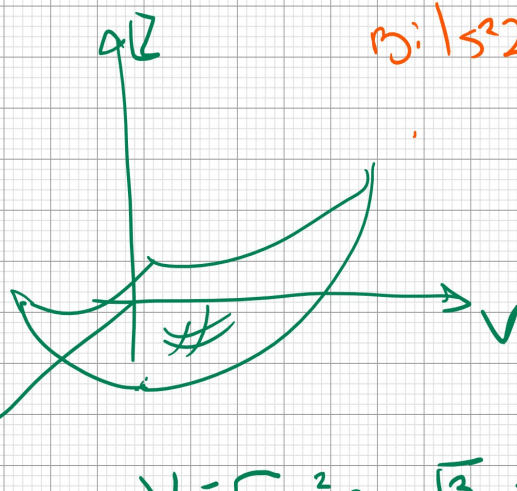
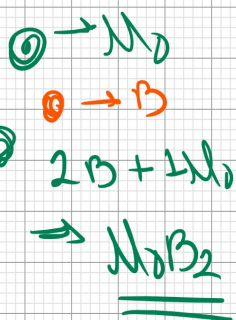
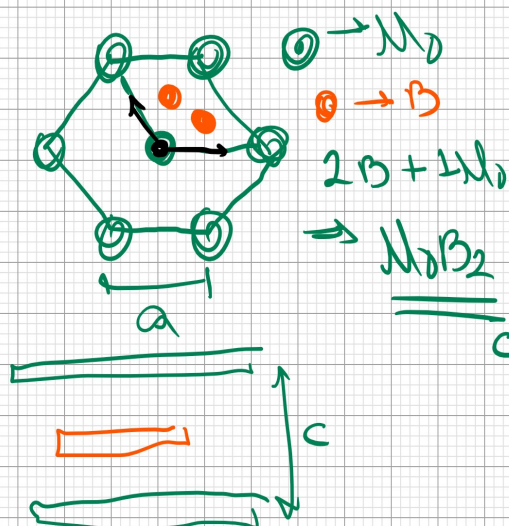


PROYECTO MoB_2



$$r_0: |s^2 s^2 p^1|$$

$$V = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c = \frac{\sqrt{3}}{2} a^3 (c/a)$$

i) Determinar $(a, c) \Rightarrow$ estado base i.e. mínima energía
 \Rightarrow proceso de optimización estructural

ACTIVIDADES

i) por de datos $(V, c/a) \Rightarrow \underline{(a, c)}$

$$V, c/a, Z$$

enviar: lista $(V, c/a)$; ejemplo elk.in; Xmgrace; species mod
lista files a conservar para cada caso.