



UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI

Departament de Química Física i Inorgànica

**Propiedades electrónicas y magnéticas en
polioxometalatos de Lindqvist y de Keggin**

Joan Miquel Mestre Horcajo

2003



UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI

Departament de Química Física i Inorgànica

**Propiedades electrónicas y magnéticas en
polioxometalatos de Lindqvist y de Keggin**

Joan Miquel Mestre Horcajo

Memòria presentada per optar al títol de
Doctor en Química

Tarragona, 9 de Juliol de 2003

El Dr. Josep M^a Poblet Rius, catedràtic de Química Física del Departament de Química Física i Inorgànica de la Universitat Rovira i Virgili

FAIG CONSTAR:

Que la present memòria, que porta per títol **“Propiedades electrónicas y magnéticas en polioxometalatos de Lindqvist y de Keggin”**, ha estat realitzada sota la meva direcció, al Departament de Química Física i Inorgànica de la Universitat Rovira i Virgili pel llicenciat en Ciències Químiques Joan Miquel Mestre Horcajo per obtenir el grau de Doctor en Química.

Tarragona, 9 de Juliol de 2003

Dr. Josep M^a Poblet Rius

“Voy y vengo”, así podría resumir todos estos años. Por fin logré el objetivo de acabar la tesis antes que mi hija (ella ahora tiene 15 años).

En todo este tiempo, el contacto con multitud de personas te hace estar en deuda con ellas por muchos motivos:

En primer lugar, al Dr. Josep M^a Poblet y al Dr. Carles Bo, uno por haber dirigido la tesis con suma paciencia, “probablemente me quedo corto”, por haberme formado, o eso pretendía, en rigurosidad y por brindarme su amistad; del otro que voy a decir, pues otro tanto, coautor de las publicaciones, instalador de los programas Turbomole, Flopo, Proaim, ADF, etc., etc., ... y horas de discusiones. GRACIAS a los dos por la formación y el apoyo recibido.

A los miembros “seniors” del área de Química Física: a la Dra. Rosa Caballol, por las aclaraciones recibidas en varias ocasiones y la discusión de la tercera publicación. A los Drs. Josep Manel Ricart, Anna Clotet, Joan Igual, Sefa Miralles y Mar Reguero.

Al sector informático: Jose Ortiz (porque contagia entusiasmo y por atenderme a la primera) y Joan Iglesias.

Gracias a TODOS, porque desde el primer día nunca me sentí un extraño.

Al Profesor Marc Bénard, por la discusión y lectura de los manuscritos del primero, segundo y tercer artículo y coautor del cuarto, y a los Drs. Marie-Madeleine Rohmer y Jean Philippe Blateau, coautores del cuarto artículo, del Laboratoire de Chimie Quantique del CNRS y Universidad Louis Pasteur de Strasbourg.

Al Dr. José Pedro Sarasa, coautor del primer artículo, de la Universidad de Zaragoza.

A los Drs. Nieves Casañ, coautora del segundo y tercer artículo, y P. Gómez-Romero, coautor del tercero, del Institut de Ciències de Materials de Barcelona.

Al Profesor Claude Daul, por la cesión del programa STAGEN y coautor del quinto artículo, del Institut de Chimie Inorganique et Analytique de Fribourg.

Al Profesor R. F. W. Bader por la cesión del paquete de programas AIMPAC.

Al Profesor J. Cioslowski por la versión cray del programa PROAIM (VECAIM).

De Barcelona, a los Drs. Javier Luque, Silvia Zurita y Francesc Illas por la cesión del programa de potenciales electrostáticos.

A los "juniors" antiguos del área, Miquel Costas (preparación de la función HF para el estudio con PEM), Oscar Castell, antiguos compañeros del primer despacho y Joan Torras. A la segunda generación: Jesús Cabrero, Dani Curulla, Víctor García, Coen de Graaf, Jordi Muñoz (por su amistad), Cinta Pujol, Elena Rodríguez y a Fco. José Valencia por la modelización del campo cristalino. Oriol Lorenzo y Juan Carlos Guillén, compañeros del segundo despacho.

A los más jóvenes, Francisco Ample, Esther Bordas, Josep M^a Campanera, Jorge Fernández, Elies Daura, Alfred Gil, Isabel Gómez, Jose Gracia, Xavier López (coautor del segundo y quinto artículo), Nuria Queralt, Susanna Romo, Engelbert Sans y Ana Valcárcel.

A TODOS gracias por hacerme sentir uno más, a pesar de las canas.

A Avelina y Yolanda del equipo de Secretaria del Departament, siempre amables. A M^a José Romero un grato apoyo por el momento delicado que está pasando.

A Daniel, Sara y Esther, que voy a decir, faltan páginas en esta tesis para relatar el tiempo que les he robado robado y la paciencia que han tenido.

En fin , ya ve el lector que estoy en deuda con muchísima gente. Una vez más, gracias a todos.

A Daniel, Sara y Esther.