



Comisión Interministerial de Ciencia y Tecnología

Curriculum vitae

Nombre: ALEJANDRO GAITA ARIÑO

Fecha: 30/10/2006

Número de registro: 02703

Fecha de cumplimentación: 30/10/2006

Apellidos: GAITA ARIÑO

Nombre: ALEJANDRO

DNI: 44852423

Fecha de nacimiento: 26/05/1976

Sexo: Hombre

Situación profesional actual**Organismo:** Universitat de València**Facultad, Escuela o Instituto:** INSTITUTO UNIVERSITARIO DE CIENCIA MOLECULAR**Dept./Secc./Unidad Estr.:** INSTITUTO UNIVERSITARIO DE CIENCIA MOLECULAR**Dirección Postal:** c/ Dr Moliner, 50 (Burjassot - 46100)**Teléfono (indicar número y extensión):** 963864859 ext. 44859**Fax:** 963864859**Correo electrónico:** Alejandro.Gaita@uv.es**Especialización (Códigos UNESCO):** 230307 - Compuestos de Coordinación / 221117 - Propiedades Magnéticas / 221023 - Teoría Cuántica (Ver 2212.12)**Categoría profesional y fecha de inicio:** TÉCNICO SUPERIOR DE INVESTIGACIÓN - 01/08/2004**Situación administrativa** **Plantilla** **Contratado** **Interino** **Becario** **Otras Situaciones****especificar:****Dedicación** **A tiempo completo** **A tiempo parcial****Formación Académica****Titulación Superior**

Licenciado en Química

Centro

Universitat de València

Fecha

23/08/1999

Doctorado

Doctor en Química

Centro

Universitat de València

Fecha

27/07/2004

Actividades anteriores de carácter científico o profesional**Actividad**

Becario de colaboración

Becario predoctoral

Becario de colaboración

Centro/Institución

Departamento de Química Inorgánica / UVEG

Departamento de Química Inorgánica e ICMol / UVEG

Instituto de Ciencia Molecular / UVEG

Fechas

01/09/1999 - 31/08/2000

01/01/2000 - 31/12/2003

01/01/2004 - 30/06/2004

IDIOMAS DE INTERÉS CIENTÍFICO**Idioma**

Castellano

Inglés

Catalán

Alemán

Francés

Esperanto

Habla

Correctamente

Correctamente

Correctamente

Bien

Bien

Bien

Lee

Correctamente

Correctamente

Correctamente

Correctamente

Correctamente

Bien

Escribe

Correctamente

Correctamente

Bien

Bien

Regular

Regular

Lineas de investigación

Breve descripción, por medio de palabras clave, de la especialización y líneas de investigación actuales

Línea: Estudios de polioxometalatos magnéticos por Dispersión Inelástica de Neutrones. Análisis del espectro por Hamiltonianos efectivos.**Centro:** Instituto de Ciencia Molecular **Fechas:** 01/08/1999 -**Palabras Clave:****Línea:** Cálculos espectroscópicos ab initio sobre polioxometalatos de valencia mixta.**Centro:** Instituto de Ciencia Molecular + Institut de Recherche sur les Systèmes Atomiques et Moléculaires Complexes **Fechas:** 01/01/2001 -**Palabras Clave:**

Participación en Proyectos de I+D financiados en Convocatorias Públicas

(nacionales y/o internacionales)

Título del proyecto/contrato: Red temática de magnetismo molecular

Tipo de contrato/Programa: NNMA - Programa Nacional de Materiales

Empresa/Administración financiadora: MCTE - Ministerio de Ciencia y Tecnología.

Entidades participantes: ---

Número de proyecto/contrato: MAT2001-5408-E **Importe:** --- **Duración, desde:** 2002 **hasta:** 2005

Investigador Principal: E. Coronado

Número de investigadores participantes: ---

Palabras Clave:

Código de proyecto/contrato: 002004 **Orden:** 001

Título del proyecto/contrato: Ayudas a Actividades de I + D Cooperativas molecular approach to Nanomagnetic-Multifuncional Materials

Tipo de contrato/Programa: FEDE - Proyectos Cofinanciados con fondos FEDER

Empresa/Administración financiadora: MCTE - Ministerio de Ciencia y Tecnología.

Entidades participantes: ---

Número de proyecto/contrato: CTGCA/2002/03/03 **Importe:** --- **Duración, desde:** 2002 **hasta:** 2002

Investigador Principal: E. Coronado

Número de investigadores participantes: ---

Palabras Clave:

Código de proyecto/contrato: 001993 **Orden:** 002

Título del proyecto/contrato: Clusters Magnéticos: Síntesis, propiedades y aplicaciones

Tipo de contrato/Programa: PIGV - Projectes d'Investigació (Generalitat Valenciana)

Empresa/Administración financiadora: GEVA - Generalitat Valenciana

Entidades participantes: ---

Número de proyecto/contrato: GV01-312 **Importe:** 18.000,00 **Duración, desde:** 2002 **hasta:** 2003

Investigador Principal: E. Coronado

Número de investigadores participantes: 06

Palabras Clave:

Código de proyecto/contrato: 001996 **Orden:** 003

Título del proyecto/contrato: Materiales magnéticos moleculares: Materiales magnéticos multifuncionales y moléculas biestables para electrónica molecular.

Tipo de contrato/Programa: NNMA - Programa Nacional de Materiales

Empresa/Administración financiadora: 0040 - Ministerio de Ciencia y Tecnología, Dirección General de Investigación

Entidades participantes: ---

Número de proyecto/contrato: MAT2001-3507 **Importe:** 291.731,00 **Duración, desde:** 2001 **hasta:** 2004

Investigador Principal: E. Coronado (coordinador: E. Coronado)

Número de investigadores participantes: 15

Palabras Clave:

Código de proyecto/contrato: 001998 **Orden:** 004

Título del proyecto/contrato: Low-dimensional conductors based on radical cation salts with photochromic and magnetic counter-ions: Synthesis, structure, optical, electrical and magnetic properties

Tipo de contrato/Programa: INTS - International association for the promotion of cooperation with scientists from the independent states of the former Soviet Union. INTAS.

Empresa/Administración financiadora: IAPC - International Association for the Promotion of Cooperation with scientists from the Independent States of the former Soviet Union (INTAS)

Entidades participantes: ---

Número de proyecto/contrato: 651 **Importe:** 5.400,00 **Duración, desde:** 2001 **hasta:** 2003

Investigador Principal: E. Coronado (coordinador: E. Coronado)

Número de investigadores participantes: 10

Palabras Clave:

Código de proyecto/contrato: 001997 **Orden:** 005

Título del proyecto/contrato: Molecular nanomagnets.

Tipo de contrato/Programa: INTS - International association for the promotion of cooperation with scientists from the independent states of the former Soviet Union. INTAS.

Empresa/Administración financiadora: INTS - INTAS

Entidades participantes: ---

Número de proyecto/contrato: --- **Importe:** --- **Duración, desde:** 2000 **hasta:** 2002

Investigador Principal: Dante Gatteschi

Número de investigadores participantes: ---

Palabras Clave:

Código de proyecto/contrato: 001991 **Orden:** 006

Título del proyecto/contrato: Molecular Magnetism: from Materials to Devices.

Tipo de contrato/Programa: TMRE - Human Capital and Mobility (HCM-Network)

Empresa/Administración financiadora: 0097 - UNIO EUROPEA

Entidades participantes: ---

Número de proyecto/contrato: --- **Importe:** 104.125,35 **Duración, desde:** 1998 **hasta:** 2002

Investigador Principal: Oliver Kahn

Número de investigadores participantes: ---

Palabras Clave:

Código de proyecto/contrato: 001992 **Orden:** 007

Publicaciones o Documentos Científico-Técnicos

(Publicaciones en revistas)

Autores (p.o. de firma): A. Forment-Aliaga, E. Coronado, M. Feliz, A. Gaita-Ariño, R. Llusar, F. M. Romero**Título:** Cationic Mn₁₂ Single-Molecule Magnets and their polyoxometalate Hybrid Salts.**Revista:** 900752 - Inorganic Chemistry Inorg. Chem.**Número de autores:** 06**Volumen:** 42 **Número:** --- **Páginas, inicial:** 8019 **final:** 8027 **Año:** 2003 **Lugar de publicación:** (ESTADOS UNIDOS DE AMÉRICA) **ISSN:** --- **Depósito legal:** ---**Clave:** Artículo **Código Artículo:** 006293 **Orden:** 001**Autores (p.o. de firma):** N. Suaud, A. Gaita-Arino, J.M. Clemente-Juan, J. Sanchez-Marin, E. Coronado**Título:** Ab initio calculations of the transfer parameters and coulombic repulsion and estimation of their effects on the electron delocalization and magnetic coupling in mixed-valence Keggin polyoxotungstates**Revista:** 900768 - Polyhedron Polyhedron**Número de autores:** 05**Volumen:** 22 **Número:** --- **Páginas, inicial:** 2331 **final:** 2337 **Año:** 2003 **Lugar de publicación:** (ESTADOS UNIDOS DE AMÉRICA) **ISSN:** --- **Depósito legal:** ---**Clave:** Artículo **Código Artículo:** 006308 **Orden:** 002**Autores (p.o. de firma):** N. Suaud, A. Gaita-Ariño, J.M. Clemente-Juan, J. Sánchez-Marín, E. Coronado**Título:** Electron delocalization in mixed-valence Keggin polyoxometalates. Ab initio calculation of the local effective transfer integrals and its consequences on the spin coupling**Revista:** 900665 - Journal of the American Chemical Society**Número de autores:** 05**Volumen:** 124 **Número:** --- **Páginas, inicial:** 15134 **final:** 15140 **Año:** 2002 **Lugar de publicación:** (ESTADOS UNIDOS DE AMÉRICA) **ISSN:** --- **Depósito legal:** ---**Clave:** Artículo **Código Artículo:** 009754 **Orden:** 003**Autores (p.o. de firma):** J.M. Clemente-Juan, E. Coronado, A. Gaita-Ariño, C. Giménez-Saiz, G. Chaboussant, H.-U. Güdel, R. Burriel, H. Mutka**Título:** Magnetic Polyoxometalates: Anisotropic Exchange Interactions in the Trimeric Coll Moiety [Co₃W(D₂O)₂(ZnW₉O₃₄)₂]¹²⁻. A Magnetic and Inelastic Neutron Scattering Study**Revista:** 908895 - Chemistry-A European Journal**Número de autores:** 08**Volumen:** 8 **Número:** --- **Páginas, inicial:** 5701 **final:** 5708 **Año:** 2002 **Lugar de publicación:** (ALEMANIA) **ISSN:** --- **Depósito legal:** ---**Clave:** Artículo **Código Artículo:** 009755 **Orden:** 004**Autores (p.o. de firma):** N. Suaud, A. Gaita-Ariño, J.M. Clemente-Juan, E. Coronado**Título:** Electron Delocalization and Electrostatic Repulsion at the Origin of the Strong Spin Coupling in Mixed-Valence Keggin Polyoxometalates: Ab Initio Calculations of the One- and Two-Electron Processes**Revista:** 908895 - Chemistry-A European Journal**Número de autores:** 04**Volumen:** 10 **Número:** 16 **Páginas, inicial:** 4041 **final:** 4053 **Año:** 2004 **Lugar de publicación:** Weinheim (ALEMANIA) **ISSN:** --- **Depósito legal:** ---**Clave:** Artículo **Código Artículo:** 010675 **Orden:** 005**Autores (p.o. de firma):** E. Coronado, A. Forment-Aliaga, A. Gaita-Ariño, C. Giménez-Saiz, F.M. Romero, W. Wernsdorfer**Título:** Polycationic Mn₁₂ Single-Molecule Magnets as Electron Reservoirs with S>10 Ground States.**Revista:** 900624 - Angewandte Chemie-International Edition**Número de autores:** 06**Volumen:** 43 **Número:** --- **Páginas, inicial:** 6152 **final:** 6156 **Año:** 2004 **Lugar de publicación:** (ALEMANIA) **ISSN:** --- **Depósito legal:** ---**Clave:** Artículo **Código Artículo:** 012069 **Orden:** 006

Autores (p.o. de firma): J.M. Clemente-Juan, E. Coronado, A. Gaita-Ariño, C. Giménez-Saiz, H.-U. Güdel, A. Sieber, R. Birchner, H. Mutka

Título: Magnetic Polyoxometalates: Anisotropic Exchange Interactions in the Co^{II}_3 Moiety of $[(\text{NaOH}_2)\text{Co}_3(\text{H}_2\text{O})(\text{P}_2\text{W}_{15}\text{O}_{56})_2]^{17-}$

Revista: 900752 - Inorganic Chemistry Anales de Química

Número de autores: 08

Volumen: 44 **Número:** --- **Páginas, inicial:** 3389 **final:** 3395 **Año:** 2005 **Lugar de publicación:** (ESTADOS UNIDOS DE AMÉRICA) **ISSN:** --- **Depósito legal:** ---

Clave: Artículo **Código Artículo:** 020616 **Orden:** 007

Publicaciones o Documentos Científico-Técnicos

(Publicaciones en libros)

Autores (p.o. de firma): J.M. Clemente-Juan, E. Coronado, A. Gaita-Ariño

Título: Magnetic Polyoxometalate

Libro: Polyoxometalate Molecular Science

Editorial: Kluwer Academic/Plenum Publishers

Número de autores: 03

Volumen: 98 **Número:** --- **Páginas, inicial:** 273 **final:** 296 **Año:** 2003 **Lugar de publicación:** (PAÍSES BAJOS) **ISBN:** 1-4020-1421-1 **Depósito legal:** ---

Clave: Capítulo de libro **Código Publicación:** 002377 **Orden:** 001

Autores (p.o. de firma): J. M. Clemente-Juan, M. Clemente-León, E. Coronado, A. Forment, A. Gaita, C.J. Gómez-García, E. Martínez-Ferrero

Título: Polyoxometalates: From magnetic models to multifunctional materials

Libro: Polyoxometalate chemistry for nano-composite design

Editorial: Kluwer Academic/Plenum Publishers

Número de autores: 03

Volumen: --- **Número:** --- **Páginas, inicial:** 157 **final:** 168 **Año:** 2002 **Lugar de publicación:** (ALEMANIA) **ISBN:** 0-306-47359-3 **Depósito legal:** ---

Clave: Capítulo de libro **Código Publicación:** 004481 **Orden:** 002

Autores (p.o. de firma): J.J. Borrás-Almenar, E. Coronado, A. Gaita-Ariño

Título: Clusters magnéticos de alta nuclearidad. Modelos en clusters de valencia mixta.

Libro: Los materiales moleculares en España en el umbral del siglo XXI

Editorial: Ediciones de la Universidad Autónoma de Madrid

Número de autores: 03

Volumen: --- **Número:** --- **Páginas, inicial:** 725 **final:** 727 **Año:** 2001 **Lugar de publicación:** Madrid (ESPAÑA) **ISBN:** 84-7477-787-9 **Depósito legal:** M-27297-2001

Clave: Capítulo de libro **Código Publicación:** 007553 **Orden:** 003

Estancias en Centros extranjeros

(estancias continuadas superiores a 30 días)

Centro:

Localidad: Toulouse **País:** FRANCIA **Año:** 2006 **Duración:** 03M

Tema: Ab-initio spectroscopic calculations on mixed-valence polyoxometalates. Electron transfer, coulombic repulsion magnetic exchange.

Clave: Otros (especificar) Proyecto europeo MagManet

Centro: Institut für Physik

Localidad: Basel **País:** SUIZA **Año:** 2006 **Duración:** 02M

Tema: Development of a scheme in the framework 'molecular approaches to quantum computing'

Clave: Otros (especificar) Proyecto europeo MagManet

Contribuciones a Congresos

Autores: Juan-José Borrás-Almenar, Juan-Modesto Clemente-Juan, Eugenio Coronado, Alejandro Gaita-Ariño
Título: Mixed-Valence Clusters $V_{18}O_{42}^{n-}$. Theoretical Models.
Tipo de participación: Poster
Congreso: Theoretical Aspects of Molecular Magnetism
Publicación:
Número de autores: 4
Lugar de celebración: Knokke-Zoute (BÉLGICA) **Año:** 1999
Código: 008843 **Orden:** 001

Autores: Eugenio Coronado, Alejandro Gaita-Ariño, Boris Tsukerblat
Título: Electronic Delocalization and Vibronic Coupling in Mixed-Valence Spin Clusters
Tipo de participación: Comunicación
Congreso: European Science Foundation Seminar 'Molecular Magnets II'
Publicación:
Número de autores: 3
Lugar de celebración: Lübeck (ALEMANIA) **Año:** 2000
Código: 008844 **Orden:** 002

Autores: Alejandro Gaita-Ariño, Boris Tsukerblat and Eugenio Coronado.
Título: Electron Delocalization, Vibronic Coupling and Magnetic Interactions in Molecular Mixed Valence Magnetic Systems
Tipo de participación: Comunicación
Congreso: European Science Foundation 'Molecular Magnets' Mid-Term conference
Publicación: Libro de resúmenes
Número de autores: 3
Lugar de celebración: Davos (SUIZA) **Año:** 2001
Código: 008845 **Orden:** 003

Autores: Eugenio Coronado, Juan-Modesto Clemente-Juan, Alejandro Gaita-Ariño, Hans-Ulrich Güdel
Título: Espectroscopía con neutrones: síntesis, caracterización y modelización de polioxometalatos magnéticos
Tipo de participación: Comunicación
Congreso: Universidad de Valencia - V Escuela Nacional de Materiales Moleculares
Publicación: Libro de resúmenes
Número de autores: 4
Lugar de celebración: Peñíscola (ESPAÑA) **Año:** 2001
Código: 008846 **Orden:** 004

Autores: Juan-Modesto Clemente-Juan, Eugenio Coronado, Alejandro Gaita-Ariño, Hans-Ulrich Güdel
Título: Neutron spectroscopy: synthesis, characterization and modelization of magnetic polyoxometalates
Tipo de participación: Comunicación
Congreso: TRM Network 'Molecules as Nanomagnets' Mid Term Review Meeting
Publicación:
Número de autores: 4
Lugar de celebración: Dourdan (FRANCIA) **Año:** 2001
Código: 008847 **Orden:** 005

Autores: Juan-Modesto Clemente-Juan, Eugenio Coronado, Alejandro Gaita-Ariño, Nicolas Suaud
Título: Ab initio calculations on electron transfer phenomena in mixed-valence polyoxometalates
Tipo de participación: Poster
Congreso: Universidad Autónoma de Madrid - IX International Summer School Nicolás Cabrera: 'Molecular Electronics'
Publicación:
Número de autores: 4
Lugar de celebración: Miraflores de la Sierra (ESPAÑA) **Año:** 2002
Código: 008848 **Orden:** 006

Autores: Juan-Modesto Clemente-Juan, Eugenio Coronado, Alejandro Gaita-Ariño, Nicolas Suaud
Título: Electron Delocalization in Mixed-Valence α -PW₁₂O₄₀ Keggin Polyoxometalate Reduced by Two Electrons
Tipo de participación: Poster
Congreso: Universitat de Valencia - VIIIth International Conference on Molecule-Based Magnets
Publicación:
Número de autores: 4
Lugar de celebración: Valencia (ESPAÑA) **Año:** 2002
Código: 008849 **Orden:** 007

Autores: A. Gaita-Ariño, N. Suaud, J.M. Clemente-Juan, E. Coronado, C. Calzado
Título: Magnetic Properties of High-Nuclearity Mixed-Valence Clusters. Theoretical Approaches.
Tipo de participación: Poster
Congreso: IXth International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2004)
Publicación:
Número de autores:
Lugar de celebración: Tsukuba (JAPÓN) **Año:** 2004
Código: 009178 **Orden:** 008

Otras Actividades Relevantes

Actividad:

BECA:

-Organismo: Ministerio de Educación y Ciencia.

-Finalidad: Beca de colaboración.

-Centro: Departamento de Química Inorgánica (UVEG).

Fechas: 01/09/1999 - 31/08/2000

Ámbito:

Clasificación: Becas

Actividad:

BECA

Organismo: Generalitat Valenciana

Finalidad: Tesis Doctoral.

Centro: Departamento de Química Inorgánica e Instituto de Ciencia Molecular (UVEG).

Fechas: 01/01/2000 - 31/12/2003

Ámbito:

Clasificación: Becas

Actividad:

BECA

Organismo: Universitat de València - Estudi General

Finalidad: Beca de colaboración.

Centro: Instituto de Ciencia Molecular (UVEG).

Fechas: 01/01/2004 - 30/06/2004

Ámbito:

Clasificación: Becas

Actividad:

IV Escuela Nacional de Materiales Moleculares

-Lugar: San Lorenzo del Escorial (Madrid)

-Organizan: Universidad Autónoma de Madrid-Universidad Complutense de Madrid.

Fechas: 06/06/1999 - 13/06/1999

Ámbito:

Clasificación: Asistencia a Reuniones Científicas (sin Presentación ni publicación)

Actividad:

Summerschool on computational quantum chemistry

-Lugar: Milán (Italia)

-Organiza: CILEA

Fechas: 24/07/2000 - 28/07/2000

Ámbito:

Clasificación: Asistencia a Reuniones Científicas (sin Presentación ni publicación)

Actividad:

First Conference on Functional Nanostructures

-Lugar: Karlsruhe (Alemania)

-Organiza: Centrum für Funktionelle Nanostrukturen - Universität Karlsruhe

Fechas: 29/09/2003 - 02/10/2003

Ámbito:

Clasificación: Asistencia a Reuniones Científicas (sin Presentación ni publicación)

Actividad:

La química a la frontera molecular: noves tecnologies i modelització

-Lugar: Gandía (España)

-Organiza: Universitat de València

Fechas: 17/07/2000 - 28/07/2000

Ámbito:

Clasificación: Asistencia a Reuniones Científicas (sin Presentación ni publicación)

Actividad:

Teoría Cuántica de la Información

-Lugar: Santiago de Compostela (España)

-Organiza: Universidad de Santiago de Compostela

Fechas: 03/09/2001 - 14/09/2001

Ámbito:

Clasificación: Asistencia a Reuniones Científicas (sin Presentación ni publicación)

Actividad:

Advanced Physics and Chemistry of Materials

-Lugar: Grenoble (Francia)

-Organiza: Université Joseph Fourier

Fechas: 03/09/2001 - 14/09/2001

Ámbito:

Clasificación: Asistencia a Reuniones Científicas (sin Presentación ni publicación)

Otros Méritos o aclaraciones que desee hacer constar

(utilice únicamente el espacio equivalente a una página)

Experiencia con diferentes programas y sistemas operativos:

Como usuario:

- MOLCAS, CASDI, Boys, NATU (cadenas de programas para cálculos espectroscópicos ab initio)
- gnuplot, IgorPro (gráficos científicos)
- awk (lenguaje de manipulación de datos)
- bash (lenguaje de scripts)
- herramientas unix/GNU (entre otras, |,>,<,&,cat,head,tail,find,grep,grub,ssh/scp)
- fortran77 (lenguaje de programación científico)
- Windows 98, Mac OS, Mac OS X, Irix, AIX (sistemas operativos)

Como usuario avanzado:

- magpack (cálculo de propiedades magnéticas de sistemas moleculares)
- Vim (editor de textos avanzado)
- LaTeX (lenguaje de maquetación de textos)
- CrystalMaker (representación de estructuras cristalográficas)

Como administrador:

- GNU/Linux (sistema operativo)

Otros títulos:

- Grau Mitjà de la Junta Qualificadora de Coneixements de València
- Curso de Aptitud Pedagógica
- Diploma de Estudios Avanzados

Experiencia Docente:

- 16 horas en el módulo “Química Inorgánica Avanzada
- 20 horas en el módulo “Operaciones Básicas de Laboratorio

Trabajo en proyectos colaborativos a través de Internet:

- Usuario activo de la es.wikipedia.org desde Junio de 2003 hasta Octubre de 2004
- Administrador/Bibliotecario activo de la es.wikipedia.org desde Abril de 2004 hasta Octubre de 2004