
Electronic and Magnetic Properties of α -Keggin Anions: A DFT Study of $[\text{XM}_{12}\text{O}_{40}]^{n-}$, (M=W, Mo; X= Al^{III}, Si^{IV}, P^V, Fe^{III}, Co^{II}, Co^{III}) and $[\text{SiM}_{11}\text{VO}_{40}]^{m-}$ (M=Mo and W)

Joan Miquel Maestre, Xavier López, Carles Bo ; Josep M. Poblet and Nieves Casañ-Pastor

Departament de Química Física i Inorgànica and Institut d'Estudis Avançats, Universitat Rovira i Virgili, Pc. Imperial Tarraco 1, 43005-Tarragona, Spain, and Institut de Ciències de Materials de Barcelona, CSIC, Campus UAB, 08193 Bellaterra, Barcelona, Spain

J. Am. Chem. Soc.

2001 Volume 123, Number 16, Pages 3749-3758