

CURRICULUM VITAE DR. OSCAR ENRIQUE PIRO

ÍNDICE

I DATOS PERSONALES.....	2
II FORMACIÓN ACADÉMICA.....	2
III ANTECEDENTES DOCENTES.....	2
IV BECAS Y CARGOS DE INVESTIGACION	3
IV.1 Becas.....	3
IV.2 Cargos de Investigación.....	3
V AREAS PRINCIPALES DE INVESTIGACION	4
VI ANTECEDENTES CIENTIFICOS	4
VI.1 Publicaciones	4
VI.2. Comunicaciones a Congresos	23
VI.3 Cursos de Especialización	23
VI.4 Conferencias, Seminarios y Cursos Breves Dictados	25
VI.5 Actuación en Universidades e Institutos de Investigación.....	26
VII SINTESIS DE APORTES ORIGINALES	29
VIII OTROS DATOS DE INTERES.....	34
VIII.1 Dirección de Tesistas, Investigadores, Becarios y Alumnos.....	34
VIII.2 Revisión de Revistas Científicas	36
VIII.3 Integración de Jurados de Tesis y Premios Doctorales	36
VIII.4 Integración de Jurados de Concursos y Promociones y de Coms. Evaluadoras.....	39
VIII.5 Actividades de Gestión Académica y Científica	40
VIII.6 Subsidios para Tareas de Investigación.....	40
VIII.7 Dirección y Organización de Grupos de Investigación	42
VIII.8 Actividad en Extensión Universitaria.....	42

CURRICULUM VITAE

Mayo 2014

I DATOS PERSONALES

Nombres y Apellido: Oscar Enrique Piro

Lugar y Fecha de Nacimiento: Necochea (BA), Argentina, 02/01/1944

Estado Civil: casado, una hija

Libreta de Enrolamiento/Pasaporte: 5.385.023

Cédula de Identidad: 8.947.210 (Policía Federal)

Laboratorio: Departamento de Física (DF), Facultad de Ciencias Exactas (FCE), Universidad Nacional de La Plata (UNLP). C.C. 67, 1900 La Plata, Argentina

Tel.: 54-(0)221-4230122/4247201/4246062, Interno 236

Fax: 54-(0)221-252006

E-mail: piro@fisica.unlp.edu.ar

Particular: Calle 121-Nº 1578, 1900 La Plata, Argentina

Tel: 54-(0)221-4225770

II FORMACIÓN ACADÉMICA

II.1 Licenciado en Física (29-4-70). Facultad de Ciencias Exactas (FCE), Universidad Nacional de La Plata (UNLP).

II.2 Doctor en Física (6-10-77). FCE, UNLP. Tesis: "Estudios Estructurales y Espectroscópicos de Algunos Nitroprusiados".

II.3 Post-doctorado (Diciembre 1977-diciembre 1979). Departamento de Biofísica y Biología Teórica de la Universidad de Chicago, Chicago, Illinois, USA. Proyecto de investigación en cristalografía de proteínas: "Estructura Cristalina y Molecular de la Δ^5 -3-Ketosteroide Isomerasa".

III ANTECEDENTES DOCENTES

Todos los cargos de la lista siguiente donde no se ha especificado la institución, corresponden al Departamento de Física (DF), FCE, UNLP.

Ayudante Alumno en Física I, 1969.

Ayudante Alumno en Física II, del 13-5-70 al 28-2-71.

Ayudante Diplomado en Física II, del 1-4-71 al 1-12-77.

Ayudante Diplomado semidedicación en Física I, del 1-3-74 al 31-7-74.

Jefe de Trabajos Prácticos semidedicación en Mecánica I y II, del 1-5-77 al 30-6-77.

Jefe de Trabajos Prácticos en Análisis III, del 19-5-75 al 1-12-77. Universidad Tecnológica Nacional, Regional La Plata.

Jefe de Trabajos Prácticos semidedicación, desde el 1-2-80 al 8-8-83, con desempeño en Física I-V (1980), Electromagnetismo (primer semestre de 1981), Mecánica Cuántica I (segundo semestre de 1981) y Mecánica Cuántica II (primer semestre de 1982/1983).

Profesor Adjunto dedicación simple en Física I, a cargo del dictado de Matemáticas Especiales II, del 1-11-83 al 1-10-84.

Dictado de los cursos de post-grado: Física del Estado Sólido A (segundo semestre de 1984) y Física del Estado Sólido B (primer semestre de 1985).

Profesor Adjunto semidedicación en Física II, a cargo del dictado de Matemáticas Especiales II, desde el 1-10-84 hasta el 31-3-86.

Profesor Adjunto Ordinario dedicación simple, desde el 1-4-1986 al 1-4-89. Dictado de Matemáticas Especiales II, Seminario de Física Moderna: Física del Estado Sólido, Física I para las carreras de Química, Bioquímica y Farmacia, Física General para Ciencias Naturales y Museo y de cursos de post-grado sobre Cristalografía Estructural.

Profesor Adjunto Ordinario dedicación exclusiva, desde el 1-4-89 hasta el 1-4-2009.

Profesor Titular Ordinario dedicación simple, designado por el Consejo Superior de la UNLP el 16 de diciembre de 2008 (Disposición N° 406 del 17-12-2008).

IV BECAS Y CARGOS DE INVESTIGACIÓN

IV.1 Becas

De Iniciación a la Actividad Creadora, FCE, UNLP, 1969.

De Estudio de la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires (CICPBA), Argentina, del 1-6-70 al 1-6-72.

De Perfeccionamiento de la CICPBA, del 1-6-72 al 1-3-74.

De Perfeccionamiento del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Argentina, del 15-7-74 al 31-3-76.

Externa del CONICET con lugar de trabajo en la Universidad de Chicago, Departamento de Biofísica y Biología Teórica, Chicago, Illinois, USA, del 30-11-77 al 30-11-79.

IV.2 Cargos de Investigación

Miembro de la Carrera del Investigador Científico del CONICET:

Investigador Asistente, del 1-9-80 al 1-6-83.

Investigador Adjunto, desde el 1-6-83 hasta el 31-1-88.

Investigador Independiente desde el 1-2-88 al 25-2-1999.

Investigador Principal del CONICET desde el 25-2-1999 al 1-6-2010.

Investigador Superior del CONICET desde el 1-6-2010 hasta la actualidad

Docente-Investigador Categoría A de la UNLP, desde marzo de 1996 hasta septiembre 1998. Categoría I, desde septiembre de 1998 hasta la actualidad.

V AREAS PRINCIPALES DE INVESTIGACION

Física del Estado Sólido. Cristalografía Estructural por Difracción de Rayos-X. Estructura Cristalina, Molecular y Supramolecular, Electrónica, Vibracional y Comportamiento Magnético y Propiedades Ópticas de Sólidos.

VI ANTECEDENTES CIENTIFICOS

VI.1 Publicaciones

- 1) "The Crystal and Molecular Structure of Strontium Nitroprusside Tetrahydrate", E.E. Castellano, O.E. Piro & B.E. Rivero, Acta Cryst. B33, 1725-1728 (1977).
- 2) "The Crystal and Molecular Structure of Bis(Tetraphenyl Arsonium) Nitroprusside". E.E. Castellano, O.E. Piro & B.E. Rivero, Acta Cryst. B33, 1728-1732 (1977).
- 3) "The Crystal and Molecular Structure of Strontium Nitroprusside Dihydrate". E.E. Castellano, O.E. Piro, A.D. Podjarny, B.E. Rivero, P.J. Aymonino, J.H. Lesk & E.L. Varetti, Acta Cryst. B34, 2673-2676 (1978).
- 4) "The Structure of Dihydrated Strontium Nitroprusside and Thallium Nitroprusside. Correlation with IR, TGA and DTA Data" (Abstract). B.E. Rivero, O.E. Piro, E.E. Castellano, A.D. Podjarny, P.J. Aymonino, E.L. Varetti, G. Rigotti & G. Punte, Acta Cryst. A34, S147-S148 (1978).
- 5) "TGA-DTA, Infrared and X-Ray Powder Diffraction Studies on Strontium Nitroprusside and its Hydrates". C.O. Della Vedova, J.H. Lesk, E.L. Varetti, P.J. Aymonino, O.E. Piro, B.E. Rivero & E.E. Castellano, J. Mol. Struct. 70, 241-245 (1981).
- 6) "The Crystal Structure of Calcium Oxalate Monohydrate (Whewellite)". S. Deganello & O.E. Piro, Monatshefte Mineralogie H.2, 81-88 (1981).
- 7) "X-Ray Diffraction Studies on Cadmium Substituted Fluorapatites". O.E. Piro, M.C. Apella, E. Baran & B.E. Rivero, Rev. Chim. Miner. 19, 11-18 (1982).
- 8) "The Crystal and Molecular Structure of Potassium Azidopentacyanocobaltate(III) Dihydrate: $K_3[Co(CN)_5N_3] \cdot 2H_2O$ ". E.E. Castellano, O.E. Piro, G. Punte, J.I. Amalvy, E.L. Varetti & P.J. Aymonino, Acta Cryst. B38, 2239-2242 (1982).
- 9) "Semiempirical Calculation of the Rotational Barrier and Valence Force Constants in Fluorocarbonylsulfonyl Chloride". A.H. Jubert, C.O. Della Vedova, E.L. Varetti, O.E. Piro & P.J. Aymonino, Z. Naturforsch. 38a, 61-63 (1982).

- 10) "Vibrational and Thermodynamic Properties of Fluorocarbonylsulphenylchloride (FCOSCI)". C. O. DellaVédova, A. Juvert, O. E. Piro, L. E. Varetti & P. J. Aymonino, *Journal of Fluorine Chemistry* 21, 90-90 (1982).
- 11) "Information Theory and the 'Phase Problem' in Crystallography". O.E. Piro, *Acta Cryst.* A39, 61-68 (1983).
- 12) "The Infrared and Raman Spectra of Potassium Azidopentacyanocobaltate(III) Dihydrate: $K_3[Co(CN)_5N_3] \cdot 2H_2O$ ", J.I. Amalvy, E.L. Varetti, P.J. Aymonino, E.E. Castellano, O.E. Piro & G. Punte, *J.Cryst.Spectrosc.Res.* 13, 107-125 (1983).
- 13) "Synthesis, Crystal and Molecular Structure, and Spectroscopic Properties of Tris(2,2'-bipyridyl)iron(II) Nitroprusside Tetrahydrate $[Fe(bipy)_3][Fe(CN)_5NO] \cdot 4H_2O$ ". M.E. Garcia Posse, M.A. Juri, P.J. Aymonino, O.E. Piro, H. Negri & E.E. Castellano, *Inorg.Chem.* 23, 948-952 (1984).
- 14) "Spectroscopic Evidence of Vibrational Dipole-Dipole Coupling Between Nitrosyl Groups in Some Nitroprussides". S.R. González, P.J. Aymonino & O.E. Piro, *J.Chem.Phys.* 81, 625-628 (1984).
- 15) "The 6-Å Crystal Structure of Δ^5 -3-Ketosteroid Isomerase. Architecture and Location of the Active Center". E.M. Westbrook, O.E. Piro & P.B. Sigler, *J.Biol.Chem.* 259, 9096-9103 (1984).
- 16) "Intermolecular Transition Dipole-Dipole Coupling Between the Non-cyanide Ligands in Some Pentacyano-L-metallates" (Abstract). O.E. Piro y, en parte, S.R. González & P.J. Aymonino, *Acta Cryst.* 40A, C-110 (1984).
- 17) "Transition Dipole-Dipole Coupling Between the Antisymmetric Stretching Mode of Azido Ligands in $K_3[Co(CN)_5N_3] \cdot 2H_2O$ ". O.E. Piro, *Phys.Rev.* B15, 31, 1122-1127 (1985).
- 18) "DTA-TGD, Crystal and Molecular Structure Determination and Vibrational Studies in Potassium Nitroprusside Sesquiquarterhydrate: $K_3[Fe(CN)_5NO] \cdot 1.25H_2O$ ", J.I. Amalvy, E.L. Varetti, P.J. Aymonino, E.E. Castellano, O.E. Piro & G. Punte, *J.Cryst.Spectrosc. Res.* 16, 537-555 (1986).
- 19) "Infrared Spectra of Nitroprusside Ion and of its Decomposition Products Isolated in $K_3[M(CN)_6]$, $M=Fe, Co$ Matrices". S.R. González, P.J. Aymonino, R. Mercader & O.E. Piro, *J.Phys.Chem.Sol.* 47, 239-244 (1986).
- 20) "Polarized Infrared Absorption Spectra of $Na_2[Fe(CN)_5NO] \cdot 2H_2O$ with Part of the Anions in the Electronically Excited Metastable State". J.A. Güida, O.E. Piro & P.J. Aymonino, *Solid State Commun.* 57, 175-178 (1986).
- 21) "Transition Dipole-Dipole Coupling Between the NO Stretching Vibrations of Nitroprusside Ions in $Sr[Fe(CN)_5N(^{16}O, ^{18}O)] \cdot 4H_2O$ and $Ba[Fe(CN)_5N(^{16}O, ^{18}O)] \cdot 3H_2O$ Isotopic Mixtures". S.R. González, O.E. Piro, P.J. Aymonino & E.E. Castellano, *Phys.Rev.* B15, 33, 5818-5824 (1986).
- 22) "Crystal and Molecular Structure and Spectroscopic Properties of Tris(o-phenanthroline)iron(II) Nitroprusside Dihydrate: $[Fe(o-phen)_3][Fe(CN)_5NO] \cdot 2H_2O$ ". S.E. Ronco, M.E. Garcia Posse, P.J. Aymonino, E.E. Castellano, O.E. Piro, B.E. Rivero & R. Mercader, *J.Cryst.Spectrosc.Res.* 16, 585-595 (1986).
- 23) "Crystal and Molecular Structure of 8-Acetamido-2,4,4,8-tetramethyl-3-aza-bicyclo | 3.3.1 | non-2-ene Perchlorate". H.R. Viturro, B.E. Rivero, O.E. Piro, J. Caram, M.E. Martins & C.M. Marschoff, *Can. J.Chem.* 65, 2000-2003 (1987).
- 24) "Optical Properties, Reflectance, and Transmittance of Anisotropic Absorbing Crystal Plates". O.E. Piro, *Phys.Rev.B* 36, 3427-3435 (1987).

- 25) "Infrared Optical Properties and Vibrational Behavior of Anisotropic Crystals: Orthorhombic $\text{Ba}[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ". O.E. Piro, S.R. González, P.J. Aymonino & E.E. Castellano, *Phys.Rev.*B36, 3125-3134 (1987).
- 26) "Crystallographic Phases and Transport Properties in the Superconducting Tm-Ba-Cu-O Compound System". J.P. Andreeta, H.C. Basso, E.E. Castellano, J.N.H. Gallo, A.A. Martin & O.E. Piro, *Phys.Rev.* B36, 5588-5591 (1987). Trabajo incluido en "High-Temperature Superconductivity", volumen donde se colectan artículos sobre el tema publicados en *Physical Review Letters* y *Physical Review B* durante la segunda mitad de 1987.
- 27) "Low Temperature Polarized Infrared Spectra of the Nitroprusside Anion in the Electronic Ground and Metastable States in (001) Plates of $\text{Ba}[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ". J.A. Güida, O.E. Piro & P.J. Aymonino, *Solid State Commun.* 66, 1007-1010 (1988).
- 28) "Attenuated Total Reflectance Spectra of Strongly Absorbing Anisotropic Single Crystals: Trigonal α -Quartz", O.E. Piro, E.E. Castellano & S.R. González, *Phys.Rev.*B38, 8437-8443 (1988).
- 29) "Infrared and Raman Spectra of Superconducting $\text{Bi}_4(\text{Ca},\text{Sr})_6\text{Cu}_4\text{O}_{16+x}$ ". N.E. Massa, J.A. Güida, O.E. Piro, P.J. Aymonino, E.E. Castellano, H.C. Basso, J.N.H. Gallo, A.A. Martin & J.P. Andreeta, *Proceedings of the 1st Latin-American Conference on High Temperature Superconductors*, Rio de Janeiro, Mayo de 1988, editado por R. Nicolsky et al. (World Scientific. Vol.9 Octubre de 1988), pags. 390-392.
- 30) "Kramers-Kronig Dispersive Analysis and Optical Properties in the Infrared, and Revised Vibrational Behavior of Orthorhombic $\text{Na}_2[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ". O.E. Piro, E.E. Castellano, J.A. Güida & P.J. Aymonino, *Phys.Rev.* B39, 1919-1926 (1989).
- 31) "Infrared Reflectivity and Vibrational Structure of Superconducting $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ ". O.E. Piro, J.A. Güida, N.E. Massa, P.J. Aymonino, E.E. Castellano, H.C. Basso, J.N.H. Gallo & A.A. Martin, *Phys.Rev.* B39, 7255-7258 (1989).
- 32) "Molecular Structure of Bis(L-leucinato)zinc(II) and Single Crystal EPR Spectra of the Substitutionally $^{63}\text{Cu}(\text{II})$ -Doped Complex". C.A. Steren, R. Calvo, O.E. Piro & B.E. Rivero, *Inorg.Chem.* 28, 1933-1938 (1989).
- 33) "The Crystal Structures of the Potassium Nitroprusside 2.5 and 0.8 Hydrates". E.E. Castellano, B.E. Rivero, O.E. Piro & J.I. Amalvy, *Acta Cryst.* C45, 1207-1210 (1989).
- 34) "Attenuated Total Reflectance Infrared Spectra of Strongly Absorbing Anisotropic Crystals: Orthorhombic $\text{Na}_2[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ". J.A. Güida, O.E. Piro, E.E. Castellano & P.J. Aymonino, *J.Chem.Phys.* 91, 4265-4272 (1989).
- 35) "On the Unusual Hydrolysis Reaction of 8-Acetamido-2,4,4,8-tetramethyl-3-azabicyclo [3.3.1] non-2-ene Perchlorate". J.A. Caram, B.E. Rivero, O.E. Piro, B.G. Gros & C.M. Marschoff, *Can.J.Chem.* 68, 334-338 (1990).
- 36) "Molecular Structure and Exchange Interactions in Trans-bis (L-2-aminobutyrate) copper(II) and Trans-bis(D,L-2-aminobutyrate)copper(II)". P.R. Levstein, R. Calvo, E.E. Castellano, S.M. Fabiane, O.E. Piro & B.E. Rivero, *Inorg.Chem.* 29, 3918-3922 (1990).
- 37) "On the Electronic Structure of Metastable Nitroprusside Ion in $\text{Na}_2[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$. A Comparative Single Crystal ESR Study". C. Terrile, O.R. Nascimento, I.J. Moraes, E.E. Castellano, O.E. Piro, J.A. Güida & P.J. Aymonino, *Solid State Commun.* 73, 481-486 (1990).
- 38) "Molecular Structure and Single Crystal EPR Spectra of Bis (L-valinato)copper(II) Monohydrate, $\text{Cu}[\text{H}_2\text{NCHCO}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2]\cdot \text{H}_2\text{O}$ ". C.A. Steren, R. Calvo, E.E. Castellano, S.M. Fabiane & O.E. Piro, *Physica B* 164, 323-330 (1990).

- 39) "Polarized Raman Spectra of Barium Nitroprusside Trihydrate, $\text{Ba}[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ " (Abstract). J.A. Güida, O.E. Piro & P.J. Aymonino, *Acta Cryst.* A46, C-366 (1990).
- 40) "Crystal Structure and Magnetic Interactions in Bis(D,L-alaninato)copper(II) Monohydrate". R. Calvo, P.R. Levstein, E.E. Castellano, S.M. Fabiane, O.E. Piro & S.B. Oseroff, *Inorg.Chem.* 30, 216-220 (1991).
- 41) "Magnetic and Structural Properties of Bis(D,L-isoleucinato)copper(II)". D.M. Martino, C.A. Steren, R. Calvo & O.E. Piro, *J.Solid State Chemistry* 90, 211-215 (1991).
- 42) "Low Temperature DTA and IR Studies of Barium Nitroprusside Trihydrate, $\text{Ba}[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ". M.J. Zuriaga, G.A. Monti, C.A. Martin, J.A. Güida, O.E. Piro & P.J. Aymonino, *J.Thermal Analysis* 37, 1523-1531 (1991).
- 43) "Crystal Dichroism and the Orientation of Molecular Transition Dipole Moments". O.E. Piro, E.E. Castellano, J.A. Güida & P.J. Aymonino, *Infrared Physics* 31, 605 (1991).
- 44) "Polarized Raman Spectra of Single Crystal Barium Nitroprusside Trihydrate, $\text{Ba}[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ". J.A. Güida, O.E. Piro, P.J. Aymonino & O. Sala, *Journal of Raman Spectroscopy* 23, 131-136 (1992).
- 45) "Infrared Spectra and Molecular Structure of Excited Electronic Metastables States of the Nitroprusside Anion, $[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]^{2-}$ ". J.A. Güida, P.J. Aymonino, O.E. Piro & E.E. Castellano, *Spectrochimica Acta* 49A, 535-542 (1993).
- 46) "Crystal Structure and Magnetic Properties of Diaqua(L-aspartato)copper(II)". R. Calvo, C.A. Steren, O.E. Piro, T. Rojo, F.J. Zúñiga & E.E. Castellano, *Inorg.Chem.* 32, 6016-6022 (1993).
- 47) "Oxygen-water Disorder in Strontium Nitroprusside Tetrahydrate Crystals". A. Navaza & O.E. Piro, *Journal of Solid State Chemistry* 120, 1-6 (1995).
- 48) "Infrared Absorption Spectra of Sodium Pentacyanonitrosylsulfate(II) in Two Excited Electronic Metastable States". J.A. Güida, O.E. Piro & P.J. Aymonino, *Inorg.Chem.* 34, 4113-4116 (1995).
- 49) "Crystal and Molecular Structure Determination, TGA-DTA and Infrared and Raman Spectra of Rubidium Nitroprusside, $\text{Rb}_2[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]$ ". D.B. Soria, J.I. Amalvy, O.E. Piro, E.E. Castellano & P.J. Aymonino, *J. Chemical Crystallography* 26, 325-330 (1996).
- 50) "On the Expansion of Karle-Hauptman Determinants into Multiplets" (Abstract). O.E. Piro, C. De Rango, G. Tsoucaris & G. Navaza. *Supplement to Acta Cryst.* A52, C-52 (1996).
- 51) "Molecular and electronic structure of 1,2,5-thiadiazole 1,1-dioxide derivatives" (Abstract). E.E. Castellano, O.E. Piro, J.A. Caram, M.V. Mirífico, S.L. Aimone & M.D. Glossman. *Supplement to Acta Cryst.* A52, C-267 (1996).
- 52) "Crystal Structure and EPR data of a dinuclear Cu(II) complex, $[\text{Cu}(\text{N}_3)(\text{NCO})\text{diEten}]_2$ " (Abstract). J. Zukerman-Schpector, O.E. Piro, E.E. Castellano, C.A. De Simone, D.M. Martino and C.A. Steren. *Supplement to Acta Cryst.* A52, C-305 (1996).
- 53) "Infrared Absorption Spectra of Electronically Excited Long-lived Metastable States in $\text{Na}_2[\text{Ru}(\text{CN})_5\text{NO}]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ". J.A. Güida, O.E. Piro, P.S. Schaiquevich & P.J. Aymonino, *Solid State Communications* 101, 471-475 (1997).
- 54) "Crystal Structure, Vibrational Spectra and Thermal Analysis of Bis(saccharinate) bis(pyridine)zinc(II)". O.V. Quinzani, S. Tarulli, O.E. Piro, E.J. Baran & E.E. Castellano, *Z. Naturforsch.* 52b, 183-197 (1997).
- 55) "Crystal Structure and EPR Spectrum of Dimeric Di- μ -azide-bis[cyanide(N,N-diethylethylenediamine)]copper(II)". O.E. Piro, E.E. Castellano, J. Zukerman-Schpector,

- C.A. De Simone, D.M. Martino and C.A. Steren, J. Chemical Crystallography 27, 129-135 (1997).
- 56) "Crystal and anion structure, TGA, DTA and infrared and Raman spectra of manganese(II) nitroprusside dihydrate, $\text{Mn}[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ". A. Benavente, J.A. de Morán, O.E. Piro, E.E. Castellano & P.J. Aymonino, J. Chemical Crystallography, Vol. 27, No. 6, 343-352 (1997).
 - 57) "Synthesis, characterization, and crystal structure of hexakis(thiourea-s)rhenium(III) trichloride tetrahydrate: a potential precursor for low valence rhenium complexes". D. Gambino, L. Otero, E. Kremer, O.E. Piro & E.E. Castellano, Polyhedron, Vol. 16, No. 13, 2263-2270 (1997).
 - 58) "The Crystal and Molecular Structure of Ammonium-Bis(Malonato) Oxovanadium(IV) Dihydrate". O.E. Piro & E.J. Baran, J. Chemical Crystallography 27, 475-479 (1997).
 - 59) "Crystal Structure and Spectroscopic and Electrochemical Behavior of $\text{Cu}(\text{creatine})_2\cdot \text{Cl}_2$ ". B.S. Parajón Costa, E.J. Baran & O.E. Piro, Polyhedron, Vol. 16, No. 19, 3379-3383 (1997).
 - 60) "Crystallographic Study and Molecular Orbital Calculations of 1,2,5-thiadiazole 1,1-dioxide Derivatives". E.E. Castellano, O.E. Piro, J.A. Caram, M.V. Mirífico, S.L. Aimone, E.J. Vasini & M.D. Glossman, J. Physical Organic Chemistry 11, 91-100 (1998).
 - 61) "Molecular structure of $\text{trans}[\text{Co}(\text{NH}_3)_4(\text{NH}_2\text{CH}_3)\text{Cl}](\text{ClO}_4)_2$ ". F. Benzo, B. Sienra & O.E. Piro, J. Chem. Crystallogr. 28, 69-72 (1998).
 - 62) "Crystal Structure and EPR Spectra of Glycylglycylglycinocopper(II) Bromide Sesquihydrate". E.E. Castellano, O.E. Piro, N.M. Casado, C.D. Brondino & R. Calvo, J. Chem. Crystallogr. 28, 61-68 (1998).
 - 63) "Crystal Structure and IR-Spectrum of Lithium Citrate Monohydrate, $\text{Li}(\text{C}_6\text{H}_7\text{O}_7)\cdot \text{H}_2\text{O}$ ". G. E. Tobón-Zapata, O. E. Piro, S. B. Etcheverry & E. J. Baran. Z. Anorg. Allg. Chem. 624, 721-724 (1998).
 - 64) "Crystal Structure and Spectroscopic Behavior of Oxoetoxo-bis(5,7-dichloro-8-hydroxyquinolinato)vanadium(V)". A.C. González-Baró, O.E. Piro, B.S. Parajón-Costa, E.J. Baran & E.E. Castellano, Monatsh. Chem. 129, 31-39 (1998).
 - 65) "Monosodium 3(N,N-dimethyl)-1-hydroxy-1,1'-bisphosphonate hydrate (Monosodium Olpadronate)". D. Vega, R. Baggio & O.E. Piro, Acta Cryst. C54, 324-327 (1998).
 - 66) "X-ray Diffraction Studies and Solution Thermodynamics of 5,7,17,23-p-tert-Butyl-25,26,27,28-Tetra-(diethylamine)-Etohoxy Calix(4)arene". A.F. Danil de Namor, F.J. Sueros Velarde, R.G. Hutcherson, O.E. Piro & E.E. Castellano, J. Chem. Soc., Faraday Transactions 94, 1257-1261 (1998).
 - 67) "Solution Thermodynamics of Geometrical Isomers of Pyridino Calix(4)arenes and Their Interaction with the Silver Cation. The X-ray Structure of a 1:1 Complex of Silver Perchlorate and Acetonitrile with 5,11,17,23-tetra-tert-butyl-[25,26,27-28-tetrakis(2-Pyridylmethyl)oxy] Calix(4)arene". A.F. Danil de Namor, O.E. Piro, L.E. Pulcha Salazar, A.F. Aguilar-Cornejo, N. Al-Rawi, E.E. Castellano & F.J. Sueros Velarde, J. Chem. Soc., Faraday Transactions 94, 3097-3104 (1998).
 - 68) "Crystal structure and spectroscopic behavior of a binuclear copper(II) complex of flufenamic acid and dimethylformamide". G. Fachin, M.H. Torre, E. Kremer, O.E. Piro & E.J. Baran, Z. Anorg. Allg. Chem. 624, 2025-2028 (1998).

- 69) "Crystal structure and spectroscopic behavior of a binuclear copper(II) complex of mefenamic acid and dimethylsulfoxide". G. Fachin, M.H. Torre, E. Kremer, O.E. Piro & E.J. Baran, *Z. Naturforsch.* 53b, 871-874 (1998).
- 70) "Disproportionation, internal redox and comproportionation in the reaction of Hg-2(2+) with WS42-: synthesis and structure of a novel mixed crystal, (PPh4)(2)[{Hg-2(S)(2)}(0.333)(W2S6)(0.666)]". R. Pradhan, O.E. Piro, E.E. Castellano and R. Bhattacharyya. *Inorg. Chem. Comm.* 2, 173-175 (1999).
- 71) "The First Crystal Structure of a Complex from a Lower Rim Calix(4)arene alicyclic amino derivative: {tetrakis[1-(ethyl)piperidinium]oxyl}p-tert-butylcalix[4]arene bis[tetra chloro aurate(III)] dichloro dihydrate". A.F. Danil de Namor, O.E. Piro, E.E. Castellano, A.F. Aguilar-Cornejo & F.J. Sueros Velarde, *Inorganica Chimica Acta* 285(1), 142-144 (1999).
- 72) "Thermodynamics of Cation (Alkali-Metal) Complexation by 5,11,17,23-Tetra-Tert-Butyl-[25,26,27-28-Tetrakis(2-Pyridylmethyl)Oxy] Calix(4)arene and the Crystal Structure-Superstructure of its 1:1 Complex with Sodium and Acetonitrile". A.F. Danil de Namor, E.E. Castellano, L.E. Pulcha Salazar, O.E. Piro & O. Jafou, *Physical Chemistry Chemical Physics* 1, 285-293 (1999).
- 73) "Crystal and molecular structure determination, TGA-DTA and infrared and Raman spectra of rubidium nitroprusside monohydrate, $\text{Rb}_2[\text{Ru}(\text{CN})_5\text{NO}]\cdot\text{H}_2\text{O}$ ". D.B. Soria, O.E. Piro, E.E. Castellano & P.J. Aymonino, *J. Chem. Crystallogr.* 29, 75-80 (1999).
- 74) "Structure of Bis(L-Alaninato) Zinc(II) and Single Crystal EPR Spectra of Cu(II) Impurities". S.D. Dalosto, R. Calvo, O.E. Piro & E.E. Castellano, *J. Inorganic Biochemistry* 73, 151-155 (1999).
- 75) "New Re(III) complexes with alkylthioureas as precursor to other Re(III) compounds. Crystal structures of $[\text{Re}(\text{N-ethylthiourea})_6](\text{PF}_6)_3$ and $[\text{Re}(\text{N-N'-dimethyl thiourea})_6](\text{PF}_6)_3$ ". D. Gambino, J. Benitez, L. Otero, E. Kremer, E.J. Baran & O.E. Piro, *Polyhedron*, 18, 2099-2107 (1999).
- 76) "Solid-State Coordination Chemistry of Pyridinecarboxylic Acid Isomers. Crystal and Molecular Structure of Sodium Bis(2,4-pyridine-2,4-dicarboxylato)cuprate(II) trihydrate". E.S. Sileo, G. Rigotti & O.E. Piro, *Acta Chemica Scandinavica* 53(8), 535-541 (1999).
- 77) "Characterization of bis(isoorotato)diaquamagnesium(II) dihydrate: a potentially useful drug for magnesium supplementation". C.C. Wagner, E.J. Baran & O.E. Piro, *J. Inorg. Biochem.* 73, 259-263 (1999).
- 78) "A New Potentially Useful Complex for Lithium Therapies: Dimeric Monoaqua Lithium Isoorotate". C.C. Wagner, E.J. Baran, O.E. Piro & E.E. Castellano, *J. Inorg. Biochem.* 77, 209-213 (1999).
- 79) "Structure, Single Crystal EPR Spectra and Exchange Interactions in $[\text{Cu}(\text{L-proline})_2]_2\cdot 5\text{H}_2\text{O}$ and $\text{Cu}(\text{D,L-proline})_2\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ". R.P. Sartoris, L. Ortigoza, N.M.C. Casado, R. Calvo, E.E. Castellano & O.E. Piro, *Inorg. Chem.* 38, 3598-3604 (1999).
- 80) "Structures of a p-tert-butyl calix(4)arene derivative and its sodium complex"(Abstract). O.E. Piro, N.J. Al Rawi, A.F. Danil De Namor & E.E. Castellano, *A supplement to Acta Cryst.* A55, 394 (1999).
- 81) "Crystal structure and MO calculations of condensed benzenic 1,2,5-thiadiazole derivatives"(Abstract). E.E. Castellano, O.E. Piro, J.A. Caram, M.V. Mirífico, E.J. Vasini & M.D. Glossman, *A supplement to Acta Cryst.* A55, 390 (1999).
- 82) "An unusual [4+4+4] bishelical complex, $\text{Cu}_3(\text{H}_2\text{L})(\text{L})\cdot 2\text{H}_2\text{O}[\text{H}_4\text{L}'=\text{N,N'-bis(3-hydroxy-salicylidene)-1,4-diaminobutane}]$: synthesis and crystal structure". J. Sanmartín, M.R.

- Bermejo, A.M. García-Deibe, O.E. Piro and E.E. Castellano. *Chemical Communications* 19, 1953-1954 (1999).
- 83) "Structure and single crystal EPR study of $\text{Cu(II)(L-threonine)}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ". A.C. Rizzi, O.E. Piro, E.E. Castellano, O.R. Nascimento and C.D. Brondino. *Inorg. Chim. Acta* 305, 19-25 (2000).
 - 84) "Synthesis, structure and magnetic properties of tetrakis- μ -carboxylato-bis(dodecylnicotinato)-dicopper (II) complexes. Crystal and molecular structure of the decyl carboxylate derivative". M. Rusjan, Z.D. Chaia, O.E. Piro, D. Guillon & F.D. Cukiernik, *Acta Cryst.* B56, 666-672 (2000).
 - 85) "N-nitrosomelatonin". A. Turjanski, Z.D. Chaia, F. Doctorovich, D. Strin, R. Rosenstein & O.E. Piro, *Acta Cryst.* C56, 682-683 (2000).
 - 86) "Unexpected production of 2,4,6-triphenyl-1,3,5-triazine in the electroreduction of 3,4-diphenyl-1,2,5-thiadiazole 1-oxide. Theoretical estimation of reactive sites for 1-oxide and 1,1-dioxide 1,2,5-thiadiazoles". S.L. Aimone, M.V. Mirifico, J.A. Caram, D.M. Glossman, O.E. Piro, E.E. Castellano and E.J. Vasini. *Tetrahedron Letters* 41, 3531-3535, (2000).
 - 87) "Addition of aromatic nucleophiles to a C=N double bond of 1,2,5-thiadiazole 1,2-oxide". M.F. Rozas, O.E. Piro, E.E. Castellano, M.V. Mirifico & E.J. Vasini, *Molecules* 5, 503-504 (2000).
 - 88) "X-ray diffraction study of copper(I)-thiourea complexes formed in sulphate-containing acid solutions". O. E. Piro, R. C. V. Piatti, A. E. Bolzán, R. C. Salvarezza & A. J. Arvia, *Acta Cryst.* B56, 993-997 (2000).
 - 89) "Characterization of two new copper(II) complexes with saccharinate and benzoimidazole as ligands". P.A.M. Williams, E.G. Ferrer, K.A. Pasquevich, E.J. Baran, Z.D. Chaia, E.E. Castellano and O.E. Piro, *Z. Anorg. Allg. Chem.* 626, 2509-2514 (2000).
 - 90) "Structural and spectroscopic characterization of two new Cu(II)-L-dipeptide complexes". G. Facchin, M.H. Torre, E. Kremer, O.E. Piro, E.E. Castellano & E.J. Baran, *Zeitschrift für Naturforschung*, 55b, 1157-1162 (2000).
 - 91) "Structural and spectroscopic characterization of tris(o-phenanthroline)iron(II) disaccharinate monosaccharin hexahydrate". P.A.M. Williams, E.G. Ferrer, K.A. Pasquevich, E.J. Baran, E.E. Castellano and O. E. Piro. *J. Chem. Crystallography*, 30, 539-544 (2000).
 - 92) "Reversible S-S Bond Breaking and Formation in Disulfide-containing Dinuclear Complexes of Mn(I)". J. Ruiz, M. Ceroni, O.V. Quinzani, V. Riera & O.E. Piro, *Angewandte Chemie International Edition* 40(1), 220-222 (2001).
 - 93) "Crystallographic study and molecular orbital calculations of thiadiazole derivatives 1. phenantro [9,10-c]-1,2,5-thiadiazole 1,1-dioxide and acetonafto[1,2-c]-1,2,5-thiadiazole 1,1-dioxide". E.E. Castellano, O.E. Piro, S.L. Aimone, M.V. Mirifico, J.A. Caram, E.J. Vasini & D. Glossman Mitnik, *Journal of Molecular Structure* 562, 157-166 (2001).
 - 94) "The crystal and molecular structure of sodium pentacyanoammineferrate(II) heptahydrate. Role of intermolecular hydrogen-bond interactions". A.R. Parise, O.E. Piro, E.E. Castellano and J.A. Olabe, *Inorg. Chim. Acta*, 319 (1-2), 199-202 (2001).
 - 95) "Photochemical and Photophysical Reactions of fac-Rhenium(I) Tricarbonyl Complexes. Effect from Nucleating Spectator Ligands on Excited and Ground State Processes". J. Guerrero, O.E. Piro, E. Wolcan, M. Feliz, G. Ferraudi & S.A. Moya, *Organometallics* 20, 2842-2853 (2001).

- 96) "Structural, spectroscopic, and thermal behaviour of bis-(thiosaccharinate)-aqua-cadmium(II)". S.H. Tarulli, O.V. Quinzani, O.E. Piro, E.J. Baran & E.E. Castellano. *Monatsh. Chem.* 132, 779-787 (2001).
- 97) "Crystallographic study and molecular orbital calculations of thiadiazole derivatives. 3: 3,4-diphenyl-1,2,5-thiadiazoline 1,1-dioxide, 3,4-diphenyl-1,2,5-thiadiazolidine 1,1-dioxide and 4-ethoxy-5-methyl-3,4-diphenyl-1,2,5-thiadiazoline 1,1-dioxide". E.E. Castellano, O.E. Piro, J.A. Caram, M.V. Mirífico, S.L. Aimone, E.J. Vasini, A. Marquez Lucero and D. Glossman Mitnik. *J. Mol. Struct.* 597, 163-175 (2001).
- 98) "Lower Rim Calix(4)arene Ketone Derivatives and their Interactions with Alkali Metal Cations. Structural and Thermodynamic (Solution and Complexation) Characterization of the Tetraphenyl Ketone Derivative and its Sodium Complex". A.F. Danil de Namor, D. Kowalska, E.E. Castellano, O.E. Piro, F.J. Sueros Velarde & J. Villanueva Salas, *Physical Chemistry Chemical Physics* 3:(18) 4010-4021 (2001).
- 99) "1,2,5-Oxidiazole N-oxide derivatives as potential anti-cancer agents: synthesis and biological evaluation. Part IV". M. Boiani, H. Cerecetto, M. González, M. Risso, C. Olea-Azar, O.E. Piro, E.E. Castellano. A. López de Ceráin, O. Ezpeleta & A. Monge-Vega, *European Journal of Medicinal Chemistry* 36, 771-782 (2001).
- 100) "Crystal Structure of Tetrabutylammonium Nitroprusside Dihydrate, $[C_4H_9)_4N]_2[Fe(CN)_5NO] \cdot 2H_2O$, and Vibrational Spectra of Ground and Metastable Excited States of the Dihydrate and the Anhydrate". M.E. Chacon Villalba, J.A. Guida, O.E. Piro, E.E. Castellano & P.J. Aymonino, *J. Chemical Crystallography* 31(3), 155-166 (2001).
- 101) "X-ray Diffraction and DFT Structures of the Pentacyanocarbonylferrate(3-) Ion". D.B. Soria, O.E. Piro, E.L. Varetti & P.J. Aymonino, *J. Chemical Crystallography* 31, 471-477 (2001).
- 102) "New Lower Rim Calix(4)arene Derivatives with Mixed Pendent Arms and their Complexation Properties: Structural, Electrochemical and Thermodynamic Characterization". A. F. Danil de Namor, N. Al Rawi, O. E. Piro, E. E. Castellano & E. Gil, *Journal of Physical Chemistry B* 106, 779-787 (2002).
- 103) "Crystallographic study and molecular orbital calculations of thiadiazole derivatives. 2. 3,4-diphenyl-1,2,5-thiadiazole 1-monoxide. E.E. Castellano, O.E. Piro, J.A. Caram, M.V. Mirífico, S.L. Aimone, E.J. Vasini, A. Marquez-Lucero and D. Glossman-Mitnik. *J. Mol. Struct.* 604, 195-203 (2002).
- 104) "A liquid crystal derived from ruthenium(II,III), and a long-chain carboxylate". A. Zelcer, Z.D. Chaia, F.D. Cukiernik, E.E. Castellano & O.E. Piro, *Acta Cryst. C* 58, m144-m146 (2002).
- 105) "A complex containing three different kinds of Ru-N bonds: ethoxybis(nitrito)nitrosyl (N,N'-tetramethylethylenediamine)ruthenium(II) complex". P. Albores, L.M. Baraldo, E.E. Castellano, O.E. Piro & Z.D. Chaia, *Acta Cryst. C* 58, Part 04, pags. 235-236 (2002).
- 106) "Two thiourea-containing gold(I) complexes". O.E. Piro, E.E. Castellano, R.C.V. Piatti, A.E. Bolzán & A.J. Arvía, *Acta Cryst. C* 58, Part 04, 252-255 (2002).
- 107) "Infrared spectra of $K_2[RuCl_5NO]$ in two excited metastable states and the evidence for the NO linkage photoisomerization of metastable state I (MSI) in $[RuX_5NO]^{2-}$ (X=Cl,CN)". J.A. Guida, M.A. Ramos, O.E. Piro & P.J. Aymonino, *J. Molecular Structure* 609, 39-46 (2002).
- 108) "Crystal Structure and Vibrational Behaviour of Aqua di(saccharinato) di(nicotinamide)

- copper(II)". B.S. Parajón-Costa, E.J. Baran, O.E. Piro & E.E. Castellano, Z. Naturforschung, part B, 57, 43-46 (2002).
- 109) "Crystal chemistry of the saccharinato complexes of trivalent lanthanides and Yttrium". O.E. Piro, E.E. Castellano & E.J. Baran, Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie 628, 612-619 (2002).
 - 110) "Structural and Spectroscopic Characterization of Bis(thiosaccharinato)-trispyridine-cadmium(II)". S.H.Tarulli, O.V.Quinzani, E.J.Baran y O.E.Piro, Z.Anor.Allg.Chem. 628, 751-754 (2002).
 - 111) "Photoinduced Charge Separation in Arene-CO₂-Re(CO)₃2,2'-bipyridine Complexes. Two Emitting Charge Transfer Excited States". G. Torchia, J. Tocho, O.E. Piro, P. Juliarena, G. Ruiz, E. Wolcan & M.R. Félix, J. Chem. Soc., Dalton Trans. 2194-2202 (2002).
 - 112) "Synthesis and Characterization of Three New Cu(II)-Dipeptide Complexes". G. Facchin, M.H.Torre, E. Kremer, O.E. Piro, E.E. Castellano & E.J. Baran, J.Inorg.Biochem. 89, 174-180 (2002).
 - 113) "Crystal and Molecular Structure and Photoisomerization of Nitropentaammine cobalt(III) Nitroprusside Sesquihydrate, [Co(NH₃)₅NO₂][Fe(CN)₅NO]·1.5 H₂O". D.B. Soria, M.E. Chacón Villalba, O.E. Piro & P.J. Aymonino, Polyhedron 21, 1767-1774 (2002).
 - 114) "On a Novel Synthesis of 2-Sulfonatobenzoic Acid by Oxidation of Thiosalicylic Acid Catalyzed by Copper(II): a Structural Study". E.G. Ferrer, E.E. Castellano, O.E. Piro & P.A.M. Williams, Z. Anorg. Allg. Chem. 628, 1979-1984 (2002).
 - 115) "Low Temperature Crystal Structure of Natural Diosgenone". O.E. Piro, E.E. Castellano, G.E. Tobón-Zapata, S. Blair-Trujillo & E.J. Baran, Z. Naturforsch. Section 57c, 947-950 (2002).
 - 116) "A pyrazine bis-adduct of a binuclear rhodium(II) carboxylate containing 3,4,5-triethoxybenzoate as equatorial ligand.". M. A. Castro, Z. D. Chaia, O. E. Piro, F. D. Cukiernik, E. E. Castellano & M. Rusjan, Acta Cryst. C58, m393-m395 (2002).
 - 117) "Characterization of a Novel CuII/4,4'-Bipyridine Coordination Polymer Containing Square Grids". P. A. M. Williams, O. E. Piro, E. E. Castellano & E. J. Baran, Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie 628, 2044-2048 (2002).
 - 118) "Structural and Single Crystal EPR Studies of the Complex Copper L-glutamine: a Weakly Exchange Coupled System with *syn-anti* Carboxylate Bridges". J.M. Schweigkardt, A. C. Rizzi, O. E. Piro, E. E. Castellano, R. Costa de Santana, R. Calvo & C. D. Brondino, European Journal of Inorganic Chemistry 2002, 2913-2919.
 - 119) "Synthesis and characterization of a new iron(II)/4,4' bipyridine complex". P.A.M. Williams, E.G. Ferrer, E.J. Baran, O.E. Piro, J.A. Ellena & E.E. Castellano, Journal of the Argentine Chemical Society 90, No 1-3, pp. 109-115 (2002).
 - 120) "Selective Interaction of Lower Rim Calix(4)arene Derivatives and Bivalent Cations in Solution. Crystallographic Evidence of the Versatile Behaviour of Acetonitrile in Lead(II) and Cadmium(II) Complexes". A. F. Danil de Namor, S. Chahine, D. Kowalska, E. E. Castellano & O. E. Piro, Journal American Chemical Society 124, 12824-12836 (2002).
 - 121) "Crystal Structure and Vibrational Behaviour of Tetraaqua di(nicotinamide)M(II)-Saccharinates, with M(II) = Co, Ni, Zn". E.E. Castellano, O.E. Piro, B.S. Parajón-Costa & E.J. Baran, Z.Naturforsch. 57b, 657-660 (2002).
 - 122) "Crystal structure of *trans*-[ReCl₂(dppp)₂]Cl.1/2H₂O (dppp=1,3-bis(diphenylphosphino)propane)". O. E. Piro, D. Gambino, J. Benítez, E. Kremer & E. J. Baran, Zeitschrift für

- Naturforschung, Sect. 57b, 1189-1190 (2002).
- 123) "Pre-organization and allostereism in complexes of Cd(II) and Pb(II) with calix[4]arene derivatives". E.E. Castellano, O.E. Piro & A.F. Danil de Namor, Acta Cryst. A58 (Supplement), C313 (2002).
 - 124) "Calix[4]arene lower rim ionic interaction and the formation of intra-molecular complexes". O.E. Piro, E.E. Castellano & A.F. Danil de Namor, Acta Cryst. A58 (Supplement), C311 (2002).
 - 125) "Novel Synthesis of 3,4,4-Trisubstituted Thiadiazolines from 3,4-Diphenyl-1,2,5-Thiadiazole 1,1-Dioxide. Competition with the Intra-Molecular Aryl-Aryl Cyclization of 3,4-Diphenyl-1,2,5-Thiadiazole 1,1-Dioxide". M.F. Rozas, M.V. Mirífico, E.J. Vasini, O.E. Piro & E.E. Castellano, Synthesis 16, 2399-2403 (2002).
 - 126) "Solid state coordination chemistry of pyridinedicarboxylic acid isomers. III Synthesis and crystal structures of complexes of Zn and Ni with lutidinic acid (lutidinic = 2,4-pyridinedicarboxylic)". E. E. Sileo, A. S. de Araujo, G. Rigotti, O. E. Piro & E. E. Castellano, J. Molecular Structure 644/1-3 pp 67 - 76 (2003).
 - 127) "Synthesis, structure and properties of zinc(II) complex with the lapacholate anion and ethanol as ligands". M. A. Martínez, M. C. L. de Jiménez, E. E. Castellano, O. E. Piro & P. J. Aymonino, J. Coordination Chemistry 56, Number 9, pages 803-816 (2003).
 - 128) "A Crystallographic and Vibrational Study of $\text{Cs}_4[\text{Na}_2(\text{H}_2\text{O})_{10}](\text{V}_{10}\text{O}_{28})$ ". O.E. Piro, L.E. Varetti, S.A. Brandán & A. Ben Altabef, J.Chemical Cryst. 33, 57-63 (2003).
 - 129) "Synthesis and characterization of new ruthenium complexes with active ligands against Chagas' disease". L. Otero, P. Noblia, D. Gambino, H. Cerecetto, R. Di Maio, M. González, J. A. Ellena & O. E. Piro, Inorg. Chim. Acta. 344, 85-94 (2003).
 - 130) "Characterization of a Cu(II) complex of sulfadimethoxine". M. H. Torre, G. Facchin, E. Kremer, E. E. Castellano, O. E. Piro, E.J. Baran, J. Inorg. Biochem., Short Commun. 94, 200-204 (2003).
 - 131) "Structural and spectroscopic characterization of two new Cd(II) complexes: bis(thiosaccharinato) bis(imidazole) cadmium(II) and imidazolium tris(thiosaccharinato) aquacadmiate(II)". S. H. Tarulli, O. V. Quinzani, E. J. Baran, O. E. Piro & E.E. Castellano, J. Molecular Structure 656, 161-168 (2003).
 - 132) "New Rhenium(V) Nitrofuryl Semicarbazone Complexes. Crystal Structure of $[\text{ReOCl}_2(\text{PPh}_3)(3-(5\text{-Nitrofuryl})\text{acroleine semicarbazone})]$ ". L. Otero, P. Noblia, D. Gambino, H. Cerecetto, M. González, R. Sánchez-Delgado, E. E. Castellano & O. E. Piro, Zeitschrift fur Anorganische und Allgemeine Chemie 629, 1033-1038 (2003).
 - 133) "Structural and Spectroscopic Characterization of Two New Thallium(I)/Thiosaccharinate Complexes". S. H. Tarulli, O. V. Quinzani, O. E. Piro, E. E. Castellano, & E. J. Baran, Z. Anorg. Allg. Chem. 629, 1975-1979 (2003).
 - 134) "Characterization of two new zinc(II) complexes with saccharinate and imidazole or benzimidazole as ligands". P. A. M. Williams, E. G. Ferrer, M. J. Correa, E. J. Baran, E. E. Castellano & O. E. Piro, J. Chemical Crystallography 34, 285-290 (2004).
 - 135) "New Vanadium(V) Complexes with Salicylaldehyde Semicarbazone Derivatives: Synthesis, Characterization and *In Vitro* Insulin Mimetic Activity. Crystal Structure of $[\text{V}^{\text{V}}\text{O}_2(\text{salicylaldehyde semicarbazone})]$ ". P. Noblia, D. Gambino, L. Otero, E. J. Baran, P. Draper, H. Cerecetto, M. González, O. E. Piro, E. E. Castellano, T. Inohara, Y. Adachi, and H. Sakurai, European Journal of Inorganic Chemistry 2004, 322-328.
 - 136) "Model complexes with naturally occurring ligands (salicylglycine and imidazol) and the biometals copper and cobalt". E. G. Ferrer, A. C. González-Baró, E. E. Castellano, O. E.

- Piro & P. A. M. Williams, *Journal of Inorganic Biochemistry* 98, 413-421 (2004).
- 137) "Metal-assisted Regio- and Stereospecific Insertion of Alkynes into a C-H Bond Leading to Functionalized Diphosphane Ligands", J. Ruiz, R. Quesada, V. Riera, E. E. Castellano and O. E. Piro, *Organometallics* 23, 175-177 (2004).
 - 138) "Mass Spectrometry of 1,2,5-Oxadiazole N-Oxide Derivatives. Use of Deuterated Analogues in the Fragmentation Pattern Studies". H. Cerecetto, M. González, G. Seoane, O.E. Piro, E.E. Castellano & C. Stanko, *J. Brazilian Chemistry Society* 15(2), 232-240 (2004).
 - 139) "Thermodynamics of Host-Guest Interactions in Lower Rim Functionalized Calix[4]arenes and Metal Cations: The Medium Effect". A. F. Danil de Namor, S. Chahine, E.E. Castellano & O. E. Piro, *J. Phys. Chem. B*, 108, 11384-11392 (2004).
 - 140) "Ethyl p-tert-butyl calix(4)arene ethanoate: the Role of Acetonitrile in the Extraction of Alkali-Metal Picrates and on the X-ray Structures of the Sodium Complexes". A. F. Danil de Namor, M. A. Pugliese, A. R. Casal, W. B. Aparicio-Aragon, O. E. Piro & E. E. Castellano, *Physical Chemistry Chemical Physics* 6, 3286-3291 (2004).
 - 141) "The addition reaction of diamides to 1,2,5-thiadiazole 1,1-dioxide derivatives". J. A. Caram, M. V. Mirifico, S. L. Aimone, O. E. Piro, E. E. Castellano and E. J. Vasini, *J. Physical Organic Chemistry* 17, 1091-1098 (2004).
 - 142) "New Synthetic Approach for Imidazole N³-Oxide". H. Cerecetto, A. Gerpe, M. González, Y. Fernández Sainz, O. E. Piro & E. E. Castellano, *Synthesis* 16, 2678-2684 (2004).
 - 143) "Tautomerism and reactivity in heterocycles N-oxides: a spectroscopic and theoretical study of benzimidazoles N-oxide derivatives (N-hydroxybenzimidazoles)". M. Boiani, H. Cerecetto, M. González, O. E. Piro & E. E. Castellano, *J. Phys. Chem. A*, 108, 11241-11248 (2004).
 - 144) "Vanadium(V) Complexes with Salicylaldehyde Semicarbazone Derivatives bearing in vitro Anti-tumor Activity toward Kidney Tumor Cells (TK-10). Crystal Structure of [V^VO₂(5-bromosalicylaldehyde semicarbazone)]". P. Noblía, M. Vieites, B. Parajón-Costa, E. J. Baran, H. Cerecetto, P. Draper, M. González, O. E. Piro, E. E. Castellano, A. Azqueta, A. López de Ceráin, A. Monge-Vega & D. Gambino, *Journal of Inorganic Biochemistry* 99, 443-451 (2005).
 - 145) "Synthesis, crystal structure and spectroscopic characterization of a novel bis(oxo-bridged) dinuclear vanadium(V)-dipicolinic acid complex", A. C. González-Baró, E.E. Castellano, O. E. Piro & B. S. Parajón-Costa, *Polyhedron* 24, 49-55 (2005).
 - 146) "Palladium(II) complexes of 2-benzoylpyridine-derived thiosemicarbazones: spectral characterization, structural studies and cytotoxic activity". A. P. Rebolledo, M. Vieites, D. Gambino, O. E. Piro, E. E. Castellano, C. L. Zani, E. S. Fagundes, L. R. S. Teixeira, A. A. Batista & H. Beraldo, *J. Inorganic Biochemistry* 99, 698-706 (2005).
 - 147) "Solid state ¹¹¹Cd NMR studies on cadmium(II)-2,x-pyridindicarboxylates. Crystal structure of triaqua (pyridine-2,4-dicarboxylato)cadmium(II) hemihydrate: [Cd(II)(2,4-pydc)(H₂O)₃].1/2H₂O". G. Mendoza-Díaz, G. Rigotti, O.E. Piro & E.E. Sileo, *Polyhedron* 24, (7), 777-783 (2005).
 - 148) "Transition Metal Promoted Addition of Methanol to Cyanoguanidine. Molecular Structure and Properties of the Generated Copper(II) and Nickel(II) Complexes". P. A. M. Williams, E. G. Ferrer, N. Baeza, O. E. Piro, E. E. Castellano & E. J. Baran, *Z. Anorg. Allg. Chem.* 631, 1502-1506 (2005).
 - 149) "Structural and spectroscopic characterization of aqua-diargininate-copper(II)-carbonate

- monohydrate". I. Viera, M. H. Torre, O. E. Piro, E. E. Castellano & E. J. Baran, J. Inorganic Biochemistry 99, 1250–1254 (2005).
- 150) "Synthesis and Biological Properties of New 5-Nitroindazole Derivatives". V. J. Arán, C. Ochoa, L. Boiani, P. Buccino, H. Cerecetto, A. Gerpe, M. González, D. Montero, J. J. Nogal, A. Gómez-Barrio, A. Azqueta, A. López de Ceráin, O. E. Piro & E. E. Castellano, Bioorganic & Medicinal Chemistry 13, 3197–3207 (2005).
 - 151) "2-Imidazolone Derivatives Obtained as Unexpected Products Throughout Imidazole N^3 -oxide Rearrangement". H. Cerecetto, A. Gerpe, M. González, O. E. Piro & E. E. Castellano, Letter in Organic Chemistry of Bentham 2 (6): 501-506, (2005).
 - 152) "Step Wise Formation of s-Alkynyl, Vinylidene, and Vinylphosphonium Complexes of Manganese(I)". J. Ruiz, R. Quesada, M. Vivanco, E. E. Castellano & O. E. Piro, Organometallics 24, 2542-2545 (2005).
 - 153) "Chemoselective hydrolysis of the iminic moiety in salicylaldehyde semicarbazone promoted by ruthenium". M. Vieites, P. Buccino, L. Otero, M. González, O. E. Piro, R. Sánchez Delgado, M. Sant'Anna, E. Barreiro, H. Cerecetto & D. Gambino, Inorganica Chimica Acta 358(11) 3065-3074 (2005).
 - 154) "Solvent Control on the Selective, Non-selective and Absent Response of a Partially Substituted Lower Rim Calix(4)arene Derivative for Soft Metal Cations (Hg(II) and Ag(I)). Structural and Thermodynamic Studies". A. F. Danil de Namor, S. Chahine, E. E. Castellano & O. E. Piro, Journal of Physical Chemistry A 109, 6743-6751 (2005).
 - 155) "A Preliminary Observation of Additive Thermodynamic Contribution of Pendant Arms to the Complexation of Calixarene Derivatives with Mercury (II)". A. F. Danil de Namor, S. Chahine, E. E. Castellano, O. E. Piro & H. D. B. Jenkins, J. Chem. Soc., Chem. Comm. 3844–3846 (2005).
 - 156) "New Potent 5-Substituted Benzofuroxans as Inhibitors of Trypanosoma cruzi Growth. Quantitative Structure-Activity Relationship Studies". G. Aguirre, L. Boiani, M. Boiani, H. Cerecetto, R. Di Maio, M. González, W. Porcal, A. Denicola, O. E. Piro, E. E. Castellano, M. Sant'Anna & E. J. Barreiro, Bioorganic & Medicinal Chemistry 13, 6336–6346 (2005).
 - 157) "Two isostructural complexes of Co(II) and Zn(II) with lapacholate, dimethylformamide and water, $[M(Lap)_2(DMF)(H_2O)]$. M. A. Martínez, M. C. L. de Jiménez, E. E. Castellano, O. E. Piro & P. J. Aymonino, Journal of the Argentine Chemical Society, Vol. 93, Nº 4/6, 183-193 (2005).
 - 158) "A lower rim tert-butyl calix[4]arene derivative that binds Ag(I)" (Abstract). E. E. Castellano, O. E. Piro, W. B. Aparicio-Aragon & A. F. Danil de Namor, Acta Cryst. A61, 305 (2005).
 - 159) "Two isomeric calix(4)arene complexes with mercury(II)" (Abstract). O. E. Piro, E. E. Castellano, S. Chahine & A. F. Danil de Namor, Acta Cryst. A61, 305 (2005).
 - 160) "Metal Complexes of 2-Benzoylpyridine Semicarbazone: Spectral, Electrochemical and Structural Studies". A. Pérez-Rebolledo, O. E. Piro, E. E. Castellano, L. R. S. Teixeira, A. A. Batista & H. Beraldo, J. Mol. Struct. 794, 18–23 (2006).
 - 161) "Structural study of a series of new Cu-dipeptide complexes in solid state and in solution". G. Facchin, M. H. Torre, E. Kremer, E. J. Baran, E. E. Castellano, O. E. Piro, J. A. Ellena & A. J. Costa-Filho, Polyhedron 25, 2597–2604 (2006).
 - 162) "A resorcurene based receptor: versatile behaviour in its interaction with heavy and soft metal cations". A. F. Danil de Namor, J. K. Chaaban, O. E. Piro & E. E. Castellano, J.

- Phys. Chem. B 110, 2442-2450 (2006).
- 163) "Layered crystal structure and vibrational spectra of $\text{NaCCl}_3\text{SO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$. An experimental and theoretical study". M. E. Tuttolomondo, O. E. Piro, A. Ben Altabef and E. L. Varetti, *Z. Anorg. Allg. Chem.* 632 (8-9), 1501- 1507 (2006).
 - 164) "Indazole N-oxide derivatives as antiprotozoa agents: Synthesis, biological evaluation and mechanism of action studies". A. Gerpe, G. Aguirre, L. Boiani, H. Cerecetto, M. González, C. Olea-Azar, C. Rigol, J. D. Maya, A. Morello, O. E. Piro, C. Ochoa, A. Azqueta, A. López de Ceráin, A. Monge & G. Yaluff, *Bioorganic & Medicinal Chemistry* 14, 3467–3480 (2006).
 - 165) "Crystal structures, spectroscopic characterization and theoretical calculations of the guanidinium and ammonium salts of the insulin-enhancing anion $[\text{VO}_2(\text{dipic})]^-$ ". B. S. Parajón-Costa, O. E. Piro, R. Pis-Diez, E. E. Castellano & A. C. González-Baró, *Polyhedron* 25, 2920–2928 (2006).
 - 166) "Structural and Spectroscopic Characterization of Ammonium Thiosaccharinate Monohydrate". E. J. Baran, O. E. Piro & J. Zinzuk, *Z. Anorg. Allg. Chem.* 632, 437-440 (2006).
 - 167) "New Saccharinato/Ammonia Complexes of Nickel(II) and Zinc(II). A Structural and Spectroscopic Study". P. A. M. Williams, E. G. Ferrer, N. Baeza, O. E. Piro & E. J. Baran, *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie* 632, 619-623 (2006). Fe de erratas en *Z. Anorg. Allg. Chem.* 632, 1614 (2006).
 - 168) "Reactions of the activated, rigid, alfa-diazometine group of 1,2,5-thiadiazoles 1,1 dioxide with nitrogenated nucleophiles. Part III: Aliphatic monoamines and phenylhydrazine". J. A. Caram, O. E. Piro, E. E. Castellano, M. V. Mirífico & E. J. Vasini, *J. Physical Organic Chemistry* 19 (4), 229-237 (2006).
 - 169) "Novel antitrypanosomal agents based on palladium nitrofurylthiosemicarbazone complexes: DNA and redox metabolism as potential therapeutic targets". L. Otero, M. Vieites, L. Boiani, A. Denicola, C. Rigol, L. Opazo, C. Olea-Azar, J. D. Maya, A. Morello, R. L. Krauth-Siegel, O. E. Piro, E. E. Castellano, M. González, D. Gambino & H. Cerecetto, *J. Med. Chem.* 49, 3322-3331 (2006).
 - 170) "Structural and spectroscopic characterization of bis(thiosaccharinato) bis(benzimidazole) cadmium(II)". S. H. Tarulli, O.V. Quinzani, O. E. Piro, E. E. Castellano & E. J. Baran, *J. Molecular Structure* 797, 56-60 (2006).
 - 171) "Tin(IV) complexes obtained by reacting 2-benzoylpyridine-derived thiosemi-carbazones with SnCl_4 and diphenyltin dichloride". A. Pérez-Rebolledo, G. M. de Lima, N. L. Speziali, O. E. Piro, E. E. Castellano, J. D. Ardisson & H. Beraldo, *Journal Organometallic Chemistry* 691, 3919–3930 (2006).
 - 172) "Efficient Formation of Polycyclical Aromatic Systems Fused to a Thiadiazole Ring Using Strong Lewis or Brönsted Acids". E. L. Svartman, M. F. Rozas, O. E. Piro, E. E. Castellano, M. V. Mirífico, *Synthesis (Stuttgart Germany)* 14, 2313-2318 (2006).
 - 173) "One pot synthesis of benzyltriphenylphosphonium acetates from the corresponding activated benzylic alcohols". P. Hernández, A. Merlino, A. Gerpe, W. Porcal, O. E. Piro, M. González, H. Cerecetto, *ARKIVOC* 2006 (xi) 128-136.
 - 174) "Development of new Cd^{2+} and Pb^{2+} Lennard-Jones parameters for liquid simulations". A. S. de Araujo, M. T. Sonoda, O. E. Piro & E. E. Castellano, *J. Physical Chemistry B* 111, 2219-2224 (2007).
 - 175) "Molecular structure, bioavailability and bioactivity of $[\text{Cu}(\text{o-phen})_2(\text{cnge})](\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ and $\text{Cu}(\text{o-phen})(\text{cnge})(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2$ complexes". E. Ferrer, L. López Tévez, N. Baeza, J.

- Correa, N. Okulik, L. Lezama, T. Rojo, E. E. Castellano, O. E. Piro & P. A. M. Williams, *Journal Inorganic Biochemistry* 101, 741-749 (2007).
- 176) "Synthetic Chalcones, Flavanones and Flavones as Antitumoral Agents: Biological Evaluation and Structure Activity Relationships". M. Cabrera, M. Simoens, G. Falchi, M. L. Lavaggi, O. E. Piro, E. E. Castellano, A. Vidal, A. Azqueta, A. Monge, A. López de Ceráin, G. Seoane, H. Cerecetto, G. Sagrera & M. González, *Bioorganic and Medicinal Chemistry* 15, 3356-3367 (2007).
 - 177) "The Formation of N,N,N',N', Tetramethylformamidinium Disulphide from the Chemical and Electrochemical Oxidation of Tetramethylthiourea. The Vibrational Spectra and Crystal Structure of the Chloride Dihydrate Salt". A. E. Bolzán, J. A. Güida, R. C. V. Piatti, A. J. Arvia, O. E. Piro, J. R. Sabino & E. E. Castellano, *Journal of Molecular Structure* 871, 131-139 (2007).
 - 178) "Synthesis and spectroscopic characterization of two new thiosaccharinate salts. Molecular structure of bis(triphenylphosphine)iminium thiosaccharinate, PNP(tsac)". M. Dennehy, O. V. Quinzani, S. D. Mandolesi, J. Guida, G. A. Echeverría & O. E. Piro, *Monatshefte fur Chemie* 138, 669-675 (2007).
 - 179) "Conformational and vibrational analysis of S-(2-methoxyphenyl) 4-substituted-benzenecarbothioate, using X-ray, infrared and Raman spectroscopy and theoretical calculations". I. C. Henao Castañeda, J. L. Jios, O. E. Piro, G. E. Tobón & C. O. Della Védova, *J. Molecular Structure* 842, 46-54 (2007).
 - 180) "Structure of indazole N¹-oxide derivatives studied by X-ray, theoretical methods, ¹H-, ¹³C-, ¹⁵N NMR and EI/MS". A. Gerpe, O. E. Piro, H. Cerecetto & M. González, *J. Molecular Structure* 871, 98-107 (2007).
 - 181) "Synthesis and Structural Characterization of Two New Polynuclear Metal Thiosaccharinates: Hexakis(thiosaccharinato) Hexasilver(I) and Tetrakis(thiosaccharinato) Tetracopper(I)". M. Dennehy, G. P. Tellería, S. H. Tarulli, O. V. Quinzani, S. D. Mandolesi, J. A. Guida, G. A. Echeverría, O. E. Piro & E. E. Castellano, *Inorganica Chimica Acta* 360, 3169-3181 (2007).
 - 182) "A New Polymeric [Cu(SO₃(CH₂)₃S-S(CH₂)₃SO₃)(H₂O)₄]_n Complex Molecule Produced from Constituents of a Superconformational Copper Plating Solution: Crystal Structure, Infrared and Raman Spectra and Thermal Behaviour". M. A. Pasquale, A. E. Bolzán, J. A. Guida, R. C. V. Piatti, A. J. Arvia, O. E. Piro & E. E. Castellano, *Solid State Sciences* 9, 862-868 (2007).
 - 183) "A New Supramolecular Assembly Obtained by Reaction Between Thiosaccharin and Hexamethylenediamine". E. J. Baran, O. E. Piro & J. Zinzuk, *Zeitschrift fur Naturforschung, Section 62b*, 1530 - 1534 (2007).
 - 184) "Synthesis of an -amino nitrile and a bis -amino nitrile derivative of thiadiazole: reaction mechanism". M.V. Mirífico, J. A. Caram, O. E. Piro, E. J. Vasini, *Journal of Physical Organic Chemistry* 20, 1081-1087 (2007).
 - 185) "Second generation of α-tocopherol analogs-nitric oxide donors: Synthesis, physicochemical and biological characterization". G. V. López, F. Blanco, P. Hernández, A. Ferreira, O. E. Piro, C. Batthyány, M. González, H. Rubbo, & H. Cerecetto, *Bioorganic and Medicinal Chemistry* 15, 6262-6272 (2007).
 - 186) "Characterization and crystal structure of 2R-(-)-6-hydroxytremetone from *Xenophyllum poposum* (Phil.) V.A. Funk". E. Romano, A. Raschi, A. Benavente, A. González & O. E. Piro, *Natural Product Research*, Vol. 22, No. 2, 124-135 (2008).

- 187) "Reactivity and spectroscopy of the {Ru(DMAP)₅} fragment: an {Ru(NH₃)₅} analogue". M. B. Rossi, O.E. Piro, E. E. Castellano, P. Alborés & L. M. Baraldo, *Inorganic Chemistry* 47(7), 2416-2427 (2008).
- 188) "Crystal structures, theoretical calculations, spectroscopic and electrochemical properties of Cr(III) complexes with dipicolinic acid and 1,10-phenantroline". A. C. González-Baró, R. Pis-Diez, O. E. Piro & B. S. Parajón-Costa, *Polyhedron* 27, 502–512 (2008).
- 189) "Potential antitumoral properties of a new copper complex with Santonic acid". P. A. M. Williams, J. Zinczuk, D. A. Barrio, O. E. Piro, O. R. Nascimento & S. B. Etcheverry, *Bioorganic & Medicinal Chemistry* 16, 4313–4322 (2008).
- 190) "A New Supramolecular Assembly Obtained by Reaction Between Thiosaccharin and Pyridine". O.E. Piro, J. Zinczuk & E. J. Baran, *Zeitschrift für Naturforschung* 63b, 877–879 (2008).
- 191) "Structure and thermal reactivity of Zn(II) salts of isocinchomeric acid (2,5-pyridinedicarboxylic acid)". E. E. Sileo, O. E. Piro, G. Rigotti, M. A. Blesa, A. S. de Araujo & E. E. Castellano, *Structural Chemistry* 19, 651-657 (2008).
- 192) "Combined Crystallographic and Solution Molecular Dynamics Study of Allosteric Effects in Ester and Ketone *p*-*tert*-butyl Calix[4]arene Derivatives and their Complexes with Acetonitrile, Cd(II) and Pb(II)". A. S. de Araujo, O. E. Piro, E. E. Castellano & A. F. Danil de Namor, *J. Physical Chemistry A*, 112 (46), 11885-11894 (2008).
- 193) "Structural and spectroscopic characterization of 2,2'-methylenedi-8-quinolinol dihydrochloride dehydrate". J. Zinczuk, O. E. Piro, E. E. Castellano, E. J. Baran, *J. Molecular Structure* 892, 216–219 (2008).
- 194) "Structural and Vibrational Study of 2-(2'-furyl)-1H-imidazole". A. E. Ledesma, S. A. Brandan, J. Zinczuk, O. E. Piro, J. J. López González & A. Ben Altabef, *Journal Physical Organic Chemistry* 21, 1086–1097 (2008).
- 195) "Structural effects and hydrogen bonds on N,N'-di(methoxycarbonylsulfonyl)urea, [CH₃OC(O)SNH]₂CO, studied by experimental and theoretical methods". S. Torrico Vallejos, M. F. Erben, H. Wilner, O. E. Piro, E. E. Castellano, C. O. Della Védova, *J. Molecular Structure* 918, 146–153 (2009).
- 196) "Study of 5-nitroindazoles' anti-*Trypanosoma cruzi* mode of action: Electrochemical behaviour and ESR spectroscopic studies". J. Rodríguez, A. Gerpe, G. Aguirre, U. Kemmerling, O. E. Piro, V. J. Arán, J. D. Maya, C. Olea-Azar, M. González & H. Cerecetto, *European Journal of Medicinal Chemistry* 44, 1545–1553 (2009).
- 197) "Reactions of 1,2,5-thiadiazole 1,1-dioxide derivatives with nitrogen nucleophiles. Part IV. Addition of α -diamines". M. V. Mirífico, J. A. Caram, E. J. Vasini, O. E. Piro & E. E. Castellano, *J. Physical Organic Chemistry* 22, 63-169 (2009).
- 198) "Structural studies on zinc(II) complexes with 2-benzoylpyridine-derived hydrazones". A. A. Recio Despaigne, J. G. da Silva, A. C. M. do Carmo, O. E. Piro, E. E. Castellano & H. Beraldo, *Inorg. Chim. Acta* 362, 2117-2122 (2009).
- 199) "Copper(II) and Zinc(II) complexes with 2-benzoylpyridine-methyl hydrazone". A. A. Recio Despaigne, J. G. da Silva, A. C. M. do Carmo, O. E. Piro, E. E. Castellano & H. Beraldo, *J. Molecular Structure* 920, 97-102 (2009).
- 200) "Four novel mononuclear and polynuclear Cu(I) thiosaccharinates with triphenyl phosphane and bis(diphenylphosphino)methane. Synthesis and structural study". G. P. Tellería, M. Dennehy, O. V. Quinzani, G. A. Echeverría, O. E. Piro & E. E. Castellano, *Inorg. Chim. Acta* 362, 2900–2908 (2009).

- 201) "N-H...S=C Hydrogen Bond in O-alkyl N-methoxycarbonyl thiocarbamates, ROC(S)N(H)C(O)OCH₃ (R = CH₃-, CH₃CH₂-)". S. Torrico Vallejos, M. F. Erben, O. E. Piro, E. E. Castellano & C. O. Della Védova, *Polyhedron* 28, 937–946 (2009).
- 202) "Ionic Recognition by 7 Nitro 1,3,5 Triaza Adamantane: First Thermodynamic Study". A. F. Danil de Namor, N. A. Nwogu, J. A. Zvietcovich-Guerra, O. E. Piro & E. E. Castellano, *Journal of Physical Chemistry B* 113, 4775-4780 (2009).
- 203) "Synthesis and structural analysis of new palladium(II) thiosaccharinates with triphenylphosphane or diphosphanes". S. H. Tarulli, O. V. Quinzani, S. D. Mandolesi, J. A. Guida, G. A. Echeverría, O. E. Piro & E. E. Castellano, *Z. Anorg. Allg. Chem.* 635, 1604–1612 (2009).
- 204) "Spectroscopic and structural studies of bis[isopropoxy(thiocarbonyl)]sulfide, [(CH₃)₂CHOC(S)]₂S". Y. A. Tobón, E. E. Castellano, O. E. Piro, C. O. Della Védova & R. M. Romano, *J. Molecular Structure* 930, 43–48 (2009).
- 205) "Synthesis and crystal structure of a new lapacholate complex with nickel(II), [Ni(Lap)₂(DMF)(H₂O)]". R. A. Farfán, J. A. Espíndola, M. A. Martínez, O. E. Piro & P. J. Aymonino, *J. Coord. Chem.* 62, 3738 - 3744 (2009).
- 206) "Two New Supramolecular Assemblies Obtained by Reaction Between Saccharin and Long Chain Diamines". E. E. Castellano, O. E. Piro, B. S. Parajón-Costa & E. J. Baran, *Zeitschrift fur Naturforschung* 64b, 1041-1045 (2009).
- 207) "Structural and vibrational study of 2-(2'- furyl)-4, 5- 1H-dihydroimidazole". J. Zinczuk, S. A. Brandán, O. E. Piro, A. E. Ledesma, J. J. López González & A. Ben Altabef, *J. Phys. Org. Chem.* 22, 1166-1177 (2009).
- 208) "Copper(II) and zinc(II) complexes with 2-formylpyridine-1 derived hydrazones". A. A. Recio Despaigne, J. G. da Silva, A. C. M. do Carmo, F. Sives, O. E. Piro, E. E. Castellano & H. Beraldo, *Polyhedron* 28, 3797–3803 (2009).
- 209) "Superoxidedismutase-mimetic Copper(II) complexes containing saccharinate and 4-aminopyridine/4-cyanopyridine". E. G. Ferrer, L. G. Naso, N. Baeza, E. E. Castellano, O. E. Piro & P. A. M. Williams, *Journal of Trace Elements in Medicine and Biology* 24, 20–26 (2010). DOI: 10.1016/j.jtemb.2009.09.002.
- 210) "Synthesis of two new thioesters bearing ferrocene: vibrational characterization and ab initio calculations. X-ray crystal structure of S-(2-methoxyphenyl) ferrocenecarbo thioate". I. C. Henao Castañeda, C. O. Della Védova, O. E. Piro, Nils Metzler-Nolte & J. L. Jios, *Polyhedron* 29, 827–832 (2010).
- 211) "Synthesis, molecular structure and physicochemical properties of bis(3'-azido-3'-deoxythymidin-5'-yl) carbonate". M. A. Ravioloa, P. A. M. Williams, S. B. Etcheverry, O. E. Piro, E. E. Castellano, M. S. Gualdesia & M. C. Briñón, *Journal Molecular Structure* 970, 59–65 (2010). Accesible por DOI (Digital Object Identifier) en <http://dx.doi.org/10.1016/j.molstruc.2010.02.032>
- 212) "On the synthesis and structure of the [RuCl(L)(dppb)(N-N)]PF₆ (L=CO, py or 4-NH₂py; dppb=1,4-bis(diphenylphosphino)butane; N-N=2,2'-bipyridine or 1,10-phenanthroline) and [(dppb)(CO)Cl₂-Ru-pz-RuCl₂(CO)(dppb)] (pz=pyrazine) complexes". M. I. Frazão Barbosa, E. M. Agostini Valle, S. L. Queiroz, J. Ellena, E. E. Castellano, V. R. S. Malta, L. G. L. Lopes, O. E. Piro, M. P. de Araújo & A. A. Batista, *Polyhedron* 29, 2297–2303 (2010).
- 213) "Cyclocreatine, an anti-cancer and neuroprotective agent. Spectroscopic, structural and theoretical study". R. Pis-Diez, B. S. Parajón-Costa, C. A. Franca, O. E. Piro, E. E.

- Castellano & A. C. González-Baró, J. Mol. Struct. 975, 303–309 (2010). Accesible por DOI (Digital Object Identifier) en <http://dx.doi.org/10.1016/j.molstruc.2010.04.042>.
- 214) “Vibrational properties, crystal X-ray diffraction structure and quantum chemical calculations on a divalent sulfur substituted phthalimide: 1H-Isoindole-1,3(2H)-dione, 2-[(methoxycarbonyl)thio]”. S. Torrico-Vallejos, M. F. Erben, O. E. Piro, E. E. Castellano & C. O. Della Védova, J. Mol. Struct. 975, 227–233 (2010).
 - 215) “Identification of chalcones as *in vivo* liver monofunctional phase II enzymes inducers”. M. Cabrera, M. L. Lavaggi, F. Croce, L. Celano, L. Thomson, M. Fernández, C. Pintos, S. Raymondo, M. Bollati, A. Monge, A. López de Ceráin, O. E. Piro, H. Cerecetto & M. González, Bioorganic Medicinal Chemistry 18, 5391–5399 (2010).
 - 216) “Calixarene and Resorcarene Based Receptors: Selective versus Enhanced Hosting Capacity for Mercury (II). Structural and Thermodynamics Studies”. A. F. Danil de Namor, W. Aparicio-Aragon, N. Nwogu, A. El Gamouz, O. E. Piro & E. E. Castellano, Journal of Physical Chemistry 115, 6922–6934 (2011). Accesible en el sitio de red: <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/jp110195f>.
 - 217) “Crystal structure, spectroscopic properties and antimicrobial activity of 4H-1-Benzopyran-4-one, 5-hydroxy-2-(4-hydroxyphenyl)-7-methoxy-6,8-dimethyl from *Miconia ioneura* (M.i.) *Melastomataceae*”. M. I. Tracana, S. M. Amani, E. Romano, A. B. Raschi, L. R. Hernández Molina, O. E. Piro, E. E. Castellano & A. M. Benavente, Molecular Medicinal Chemistry 21, 94-104 (2010).
 - 218) “Searching for novel gallium bioactive compounds: gallium(III) complexes of tridentate salicylaldehyde semicarbazone derivatives”. M. Fernández, D. Santos, G. A. Etcheverría, O. E. Piro, F. Pavan, C. Queico, I. Tomaz, F. Marques & D. Gambino, Polyhedron 30, 1360–1366 (2011).
 - 219) “Analgesic and anti-inflammatory activities of acylhydrazone H₂LASSBio-466, its regioisomer H₂LASSBio-1064, and their zinc(II) complexes”. W. Bispo Júnior, M. S. Alexandre-Moreira, M. A. Alves, A. Perez-Rebolledo, G. L. Parrilha, E. E. Castellano, O. E. Piro, E. J. Barreiro, L. Moreira Lima, H. Beraldo, Molecules 16(8), 6902-6915 (2011). doi:10.3390/molecules16086902.
 - 220) “Binuclear zinc(II) complexes with the anti-inflammatory compounds salicylaldehyde semicarbazone and salicylaldehyde-4-chlorobenzoylhydrazone (Lassbio-1064)”. G. L. Parrilha, R. P. Vieira, A. Pérez- Rebolledo, I. C. Mendes, L. M. Lima, E. J. Barreiro, O. E. Piro, E. E. Castellano & H. Beraldo, Polyhedron 30, 1891–1898 (2011).
 - 221) “Structural and spectroscopic characterization of N,N’-bis(2-pyridylmethyl)-ethylenediamine tetrahydrochloride dehydrate”. J. Zinczuk, G. A. Echeverría, O. E. Piro, B. S. Parajón-Costa & E. J. Baran, J. Molecular Structure 994, 302–305 (2011).
 - 222) “Synthesis and crystal structure of ammonium, strontium hexacyanoferrate(II) dehydrate”. L. Medina Córdoba, J. A. Morán, S. Santos Jr, O. E. Piro & M. I. Gómez, J. Chemical Crystallography 41(9), 1280-1284 (2011). DOI: 10.1007/s10870-011-0088-5.
 - 223) “Crystal and Molecular Structure of a new Hydroxylamido/Amino Acid Oxovanadium(V) Complex, [VO(NH₂O)₂(DL-methioninato)]·H₂O”. O. E. Piro, G. A. Echeverría, G. Arrambide, D. Gambino & E. J. Baran, Zeitschrift fur Naturforschung 66b, 752–754 (2011).
 - 224) “Antibacterial activity assays of a new cadmium complex with o-phenanthroline and cyanoguanidine. Crystal structure, fluorescence properties and chemical speciation studies”. L. L. López Tévez, J. J. Martínez Medina, M. S. Islas, O. E. Piro, E. E.

- Castellano, L. Bruzzzone, E. G. Ferrer & P. A. M. Williams, *J. Coord. Chem.* 64(20), 3560–3574 (2011). DOI: <http://dx.doi.org/10.1080/00958972.2011.626854>.
- 225) “Structural and spectroscopic properties of two new isostructural complexes of lapacholate with cobalt and copper”. R. A. Farfán, J. A. Espíndola, M. I. Gomez, M. C. L. De Jiménez, M. A. Martínez, O. E. Piro & E. E. Castellano, *International Journal of Inorganic Chemistry* (2012), en prensa. DOI:10.1155/2012/973238.
- 226) “2-Acetyl- and 2-benzoylpyridine-derived hydrazones and their gallium(III) complexes are highly cytotoxic to glioma cells”. A. A. R. Despaigne, G. L. Parrilha, J. B. Izidoro, R. G. dos Santos, O. E. Piro, E. E. Castellano, W. R. Rocha, H. Beraldo, *Eur. J. Med. Chem.* 50, 163-172 (2012).
- 227) “Spectroscopic, Structural and Conformational Properties of (Z)-4,4,4-trifluoro-3-(2-hydroxyethylamino)-1-(2-hydroxyphenyl)-2-Buten-1-One, C₁₂H₁₂F₃NO₃: A Trifluoro methyl Substituted β-Aminoenone”. A. Hidalgo, L. Avendaño Jiménez, L. Ramos, M. Mroginski, J. Jios, S. Ulic, G. Echeverría, O. E. Piro & E. E. Castellano, *J. Phys. Chem. A* 116, 1110-1118 (2012).
- 228) “New Polymeric adducts of tetra-μ-haloaspirinate-dicopper(II). Crystal structure and spectroscopic properties of bis(acetonitrile)tetrakis(μ-chloroaspirinate) dicopper(II) and poly-[μ-pyrazine{tetrakis(μ-fluoroaspirinate)dicopper(II)}]”. E. M. Rustoy, M. Agotegaray, O. E. Piro & E. E. Castellano, *J. Coord. Chem.* 65, 2341-2352 (2012). Accesible en: <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00958972.2012.691477>.
- 229) “Complexation of 2-acetylpyridine- and 2-benzoylpyridine-derived hydrazones to copper(II) as an effective strategy for antimicrobial activity improvement”. A. A. Recio Despaigne, F. B. Da Costa, O. E. Piro, E. E. Castellano, S. R. W. Louro & H. Beraldo, *Polyhedron* 38, 285-290 (2012). Accesible en el sitio Internet: <http://dx.doi.org/10.1016/j.poly.2012.03.017>
- 230) “Structural, spectral and potentiometric characterization and antimicrobial activity studies of the new Zn(II) complex: [Zn(phen)₂(cngc)(H₂O)](NO₃)₂·H₂O”. L. L. López Tévez, M. S. Islas, J. J. Martínez Medina, M. Diez, O. E. Piro, E. E. Castellano, E. G. Ferrer & P. A. M. Williams, *J. Coord. Chem.* 65, 2304-2318 (2012). DOI: 10.1080/00958972.2012.693175.
- 231) “Thiosaccharine disulfide: Synthesis, crystal structure, spectroscopic characterization and theoretical study”. R. M. Ferullo, A. Granados, A. Lanterna, J. A. Güida, O. E. Piro, E. E. Castellano & M. Dennehy, *J. Mol. Struct.* 1032, 48–55 (2013). Accesible en: DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.molstruc.2012.07.043>
- 232) “Rhenium(I)-Pterin water-soluble complex: Synthesis, chemical and structure characterization. Two reversible protonation-deprotonation behavior in aqueous solutions”. F. Ragone, G. T. Ruiz, O. E. Piro, G. A. Echeverría, F. Cabrerizo, G. Petroselli, R. Erra-Balsells, F. García Einschlag & E. Wolcan, *Eur. J. Inorg. Chem.* 2012, 4801–4810. Accesible en DOI: 10.1002/ejic.201200681.
- 233) “1,3-Dipolar Cycloaddition Reactions of Azomethine Ylides with a Biomass-Derived Chiral Enone. A Novel Route for Organocatalysts Development”. A. M. Sarotti, R. A. Spanevello, A. G. Suárez, G. A. Echeverría & O. E. Piro, *Organic Letters* 14, 2556-2559 (2012). Accesible en la web en <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ol3008588>
- 234) “Molecular structure of 4-hidroxy-3-(3-methyl-2-butenyl) acetophenone, a plant antifungal, by X-ray diffraction, DFT calculation, and NMR and FTIR spectroscopy”. O. E. Piro, G. A. Echeverría, E. Lizarraga, E. Romano, C. A. N. Catalán & S. A. Brandán, *Spectrochim. Acta A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* 101, 196–203 (2013).

- 235) "Crystal structure and spectroscopic properties of N'-methoxycarbonylsulphenyl-substituted ureas, $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{H})\text{C}(\text{O})\text{NRR}'$ [$\text{R}, \text{R}' = \text{H}, -\text{C}(\text{CH}_3)_3$ and $\text{R} = \text{R}' = -\text{CH}_2\text{CH}_3$]. S. Torrico-Vallejos, M. F. Erben, S. Gómez Ruiz, E. Hey-Hawkins, G. A. Echeverría, O. E. Piro & C. O. Della Védova, *J. Molecular Structure* **1037**, 116–121 (2013).
- 236) "Vibrational, electronic and structural properties of 6-nitro- and 6-amino-2-trifluoromethylchromone: An experimental and theoretical study". L. P. Avendaño Jiménez, G. A. Echeverría, O. E. Piro, S. E. Ulic & J. L. Jios, *J. Phys. Chem. A* (2013), en prensa.
- 237) "Synthesis and characterization of a zinc(II) complex of bispicen", B. S. Parajón-Costa, G. A. Echeverría, O. E. Piro & E. J. Baran, *Zeitschrift für Naturforschung* **68b**, 1327-1332 (2013).
- 238) "Oxidovanadium(IV) and dioxidovanadium(V) complexes of tridentate salicylaldehyde semicarbazones: searching for prospective anti-trypanosomal agents". M. Fernández, L. Becco, I. Correia, J. Benítez, O. E. Piro, G. A. Echeverría, A. Mederos, M. Comini, M. L. Lavaggi, M. González, H. Cerecetto, J. Costa Pessoa, B. Garat & D. Gambino, *Journal of Inorg. Biochem.* (2013), en prensa. Accesible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2013.02.010>
- 239) "Vibrational, electronic and structural properties of 6-nitro- and 6-amino-2-trifluoromethylchromone: An experimental and theoretical study". L. P. Avendaño Jiménez, G. A. Echeverría, O. E. Piro, S. E. Ulic & J. L. Jios, *J. Phys. Chem. A* (2013), en prensa.
- 240) "An experimental and DFT study of a disulfide-linked Schiff base: synthesis, characterization and crystal structure of bis (3-methoxy-salicylidene-2-aminophenyl) disulfide in its anhydrous and monohydrate forms". V. Ferraresi-Curotto, G. A. Echeverría, O. E. Piro, R. Pis-Diez & A. C. González-Baró, *Spectrochim. Acta A* **118**, 279-286 (2014).
- 241) "Layered crystal structure, conformation and vibrational properties of 2,2,2-trichloroethoxysulfonamide: an experimental and theoretical study". D. M. Gil, O. E. Piro, G. A. Echeverría, M. E. Tuttolomondo & A. Ben Altabef, *Spectrochim. Acta A* **116**, 122–131 (2013).
- 242) "Conformational Transferability of the Sulphenyl Carbonyl Group $-\text{SC}(\text{O})-$ in Cyclic Thioesters". N. Y. Dugarte, M. F. Erben, E. Hey-Hawkins, P. Lönnecke, S. Stadlbauer, M. F. Ge, Y. Li, O. E. Piro, G. A. Echeverría & C. O. Della Védova, *J. Phys. Chem. A* **117**, 5706–5714 (2013). Accesible en <http://dx.doi.org/10.1021/jp4045308>.
- 243) "Three New Thiosaccharin Derivatives Generated in a Complex Reaction System". G. A. Echeverría, O. E. Piro, J. Zinczuk & E. J. Baran, *Journal Argentine Chemical Society* (2013), en prensa.
- 244) "A serendipitous conversion in one step of 3*H*-1,2-dithiole-3-thione to (*E*)-3-[1-(alkylthio)alkylidene]-3*H*-1,2-dithiole: an experimental and theoretical study". M. Couto, M. Cabrera, G. A. Echeverría, O. E. Piro, M. González & H. Cerecetto, *Molecular Diversity* (2013), en prensa.
- 245) "Theoretical and experimental study of a novel psolaren derivate: (*E*)-9-(3,4-dimethylpent-2-enyloxy)-7*H*-furo[3,2-*g*]chromen-7-one". S. Turbay, O. E. Piro, G. A. Echeverría, A. Navarro, M. P. Fernández-Lienres, M. E. Tuttolomondo & M. Fortuna, *Spectrochim. Acta A* **123**, 71-77 (2014).
- 246) "Vibrational and structural behavior of L- cysteine ethyl ester.HCl in the solid state and

- in aqueous solution”. M. E. Defonsi Lestard, S. B. Díaz, M. Puiatti, G. A. Echeverría, O. E. Piro, A. Pierini, A. Ben Altabef & M. E. Tuttolomondo, J. Phys. Chem. A. (2013), en prensa.
- 247) “Desarrollo y estudio de nuevos compuestos heterocíclicos no-tóxicos de bajo impacto ambiental y de sus aplicaciones tecnológicas”. M. J. Banera, J. A. Caram, A. M. Gennaro, C.A. Grillo, O. E. Piro & M. V. Mirífico, J. Argent. Chem. Soc. 100, 53-60 (2013).
- 248) “Optimization of Anti-trypanosomatid Agents: Identification of Non-Mutagenic Drug Candidates with *in vivo* Activity”. G. Álvarez, J. Varela, P. Márquez, M. Gabay, C. E. Arias Rivas, K. Cuchilla, G. A. Echeverría, O. E. Piro, M. Chorilli, S. M. Leal, P. Escobar, E. Serna, S. Torre, G. Yaluff, N. Vera de Bilbao, M. González & H. Cerecetto, Journal of Medicinal Chemistry (2014), en prensa.
- 249) “Asymmetric construction of substituted pyrrolidines via 1,3-dipolar cycloaddition of azomethine ylides and chiral acrylates derived from biomass”. D. F. Llompарт, A. M. Sarotti, V. Corne, A. G. Suárez, R. A. Spanevello, G. A. Echeverría, O. E. Piro & E. E. Castellano, Tetrahedron Letters (2014), en prensa.
- 250) “Synthesis, crystal structure, conformational and vibrational properties of 6-acetyl-2,2-dimethyl-chromane”. E. Lizarraga, D. M. Gil, G. A. Echeverría, O. E. Piro, C. A. N. Catalán & A. Ben Altabef, Spectrochim. Acta A 127, 74–84 (2014).
- 251) “Crystal structure, vibrational and thermal behavior of $\text{Ba}(\text{NH}_4)[\text{Co}(\text{CN})_6] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$: a new precursor for the synthesis of hexagonal BaCoO_3 ”. D. M. Gil, A. Di Santo, F. Pomiro, G. E. Echeverría, O. E. Piro, R. E. Carbonio & A. Ben Altabef, Polyhedron (2014), en prensa
- 252) “Structural, spectroscopic and theoretical studies on dixanthogens: $(\text{ROC}(\text{S})\text{S})_2$, with R = n-propyl and isopropyl”. L. C. Juncal. Y. A. Tobón, O. E. Piro, C. O. Della Védova & R. M. Romano, New Journal of Chemistry (2014), en prensa.
- 253) “Antitumoral, antihypertensive, antimicrobial and antioxidant effects of a new octanuclear copper(II)-telmisartan complex with an hydrophobic nanometer hole”. M. S. Islas, J. J. Martínez Medina, L. L. López Tévez, T. Rojo, L. Lezama, M. Griera Merino, L. Callero, M. A. Cortes, M. Rodríguez Puyol, G. A. Echeverría, O. E. Piro, E. G. Ferrer & P. A.M. Williams, Inorganic Chemistry (2014), en prensa (DOI: 10.1021/ic500483p).

VI.2 Comunicaciones a Congresos

Unas 203 comunicaciones en 104 congresos científicos nacionales e internacionales, 7 invitadas, dos conferencias plenarias, una internacional la otra nacional y una conferencia invitada.

VI.3 Cursos de Especialización

Curso sobre "Semiconductors", dictado por el Dr. A. Stradling del Clarendon Laboratory de Oxford, Inglaterra, del 3-7-70 al 14-8-70.

Curso sobre "Resonancia de Spin", dictado por el Profesor Dr. B. Bleaney del Clarendon Laboratory de la Universidad de Oxford, Inglaterra, desde el 1-3-71 al 31-5-71.

Curso sobre "Magnetic Exchange and Superexchange in Insulators", dictado por el Dr. E. Belorizki del Laboratorio de Spectrometric Physique de la Universidad de Grenoble, Francia, del 1-4-72 al 31-5-72.

Cursos de la Segunda Reunión Nacional de Física del Sólido, "Sólido 82", realizada en Bariloche, Rio Negro, del 5 al 9 de julio de 1982:

- i) "Algunas Manifestaciones del Desorden en Vidrios Metálicos", dictado por el Dr. F. de la Cruz del Centro Atómico Bariloche.
- ii) "Estructuras Moduladas, Transiciones de Fase Conmensuradas-Inconmensuradas", dictado por el Dr. P. Lederer de Universidad de Paris Sud, Orsay, Francia.
- iii) "Transiciones de Fase y Magnetismo Aleatorio (Grupo de Renormalización)", dictado por el Dr. C. Tsallis del Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF).

Curso sobre "Química y Bioquímica de Aductos de Dioxígeno y Ligandos Relacionados", dictado por el Profesor Visitante Dr. K. Nakamoto de la Marquette University, Milwaukee, Wisconsin, USA, durante el mes de marzo de 1983.

Asistencia al International School on Teaching Crystallography for Material Science. Organizado por la International Union of Crystallography Teaching Commission. 18-22 de julio de 1983. Departamento de Física, Universidad Estadual de Campinas, Campinas (SP), Brasil.

Asistencia a la Reunión "Técnicas y Aplicaciones de la Radiación Sincrotrónica". 1-3 de agosto de 1983. CBPF, Rio de Janeiro (RJ), Brasil.

Participación del 10th Course: Direct Methods of Solving Crystal Structures, organizado por la International School of Crystallography. 7-19 de abril de 1984. Erice, Trapani, Sicilia (Italia). Beca otorgada por el Gobierno Italiano a través del Instituto Italo Latinoamericano (IILA).

Participante invitado al 'workshop' sobre "Métodos de Máxima Entropía y el Problema de las Fases en Rayos X", organizado por el Centro Europeo de Cálculos Atómicos y Moleculares (CECAM) en la Universidad de Paris Sud, Orsay, Francia, desde el 24 al 28 de abril de 1984.

Asistencia al "3rd Symposium on Pan-American Collaboration in Experimental Physics". 19-23 de octubre de 1987, Rio de Janeiro (RJ), Brasil.

Brazilian School of Superconductivity "Jorge André Swieca". 2-6 de mayo de 1988, Rio de Janeiro (RJ), Brasil.

Asistencia al "IV Symposium on Pan-American Collaboration in Experimental Physics", 6-10 de noviembre de 1989, Bariloche (RN).

Asistencia a la "Crystallographic Computing School". Del 29 de julio al 5 de agosto de 1990, Bischensberg, Strasbourg, Francia.

Asistencia al 'Workshop' sobre "Optical Properties of Solids". 9-13 de noviembre de 1992, Laboratorio de Luz Sincrotrón, Campinas (SP), Brasil.

"International School and Workshop on Charge Density Analysis". 18-25 de mayo de 1995, La Plata.

Asistencia al "VII Workshop Anual de Usuarios del Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón (LNLS)". 13 y 14 de noviembre de 1996, Campinas (SP), Brasil.

VI.4 Conferencias, Seminarios y Cursos Breves Dictados

Seminario: "Teoría de la Información y Cristalografía Estructural". DF, FCE, UNLP. 9 de setiembre de 1982.

Seminario: "Determinación de Estructuras Moleculares por Métodos de Difracción de Rayos X y EXAFS", en el marco del curso "Química y Bioquímica de Aductos de Dioxígeno y Ligandos Relacionados", auspiciado por el Consejo de Rectores de Universidades Nacionales (CRUN) y dirigido por el Profesor Visitante Dr. K. Nakamoto de la Marquette University, Milwaukee, Wisconsin, USA. Marzo de 1983.

Conferencia plenaria invitada: "Aspectos Estructurales de la Fisicoquímica por Métodos de Difracción de Rayos X" en el 3er Congreso Argentino de Fisicoquímica, llevado a cabo en el Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), La Plata (BA), entre el 19 y el 23 de setiembre de 1983.

Seminario: "Espectroscopía EXAFS: Fundamentos Físicos y Aplicaciones". Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), Buenos Aires, 25 de noviembre de 1983.

Dictado del tema: "Electrones en Sólidos", preparatorio al curso "Teoría de Reacciones de Transferencia de Carga". INIFTA, La Plata, febrero de 1984.

Seminario: "Estructura Cristalina de Óxidos y Oxohidróxidos de Hierro", en el marco de la reunión científica sobre "Fisicoquímica del Hierro y sus Óxidos", llevada a cabo en INIFTA, La Plata, los días 5 y 6 de agosto de 1986.

Seminarios: "Superconductores Cerámicos" y "Optica en el Infrarrojo y Estructura Vibracional de Sólidos". Escuela Latinoamericana de Física (ELAF'87). La Plata, julio de 1987.

Seminario: "Infrared Optical Properties and Vibrational Structure of Some Nitroprussides". Centre d'Etudes Nucleaires de Saclay, Francia. 21 de junio de 1990.

Profesor del minicurso "Espectroscopía Vibracional de Sólidos" dictado en la Escola Latino-Americana de Cristaloquímica, llevada a cabo entre el 5 al 10 de setiembre de 1994 en el Instituto "Gleb Wataghin", Universidad Estadual de Campinas (SP), Brasil.

Profesor de la III Escuela Iberoamericana de Cristalografía. 12-16 de diciembre de 1994, Montevideo, Uruguay.

Director del Primer Curso Intensivo sobre Cristalografía de Monocristales. 8-12 de mayo de 1995, La Plata, Argentina.

Conferencia plenaria invitada: "Algunas Aplicaciones de la Cristalografía Estructural" en el Workshop sobre Difracción de Rayos X y Aplicaciones de Radiación Sincrotrón, llevado a cabo en Córdoba entre el 3 y 4 de noviembre de 1997.

Profesor del curso "Introducción a la Espectroscopía Vibracional", dictado en la XXV Escuela de Verano, Universidad Federal de Sao Carlos (UFSCar), Estado de Sao Paulo, Brasil. 10-14 de febrero de 2003.

Profesor del curso "Introducción a la Física del Estado Sólido", dictado en el Primer Taller-Escuela Latinoamericano sobre Materia Condensada, Universidad Nacional del Nordeste, Corrientes, entre el 11 y el 22 de junio de 2007.

Profesor del minicurso "Cristalografía Estructural", en el marco de la Primera Escuela de la Asociación Argentina de Cristalografía (AACr), I ESAACRIS, satélite de la 5º reunión de la asociación (V AACr). Dictado de la Conferencia invitada "Resolución de Estructuras Cristalinas Orgánicas: Relación Estructura-Función de Calizarenos". Posadas, 10 y 11 de agosto de 2009.

Profesor del curso de post-grado "Cristalografía Estructural", en el marco de la Segunda Escuela de la Asociación Argentina de Cristalografía (AACr), II ESAACRIS, satélite de la 6º Reunión de la Asociación (VI AACr). CNEA (Sede Constituyentes), Buenos Aires, del 18 al 22 de octubre de 2010.

Profesor del curso de post-grado "Cristalografía Estructural". Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Comahue. Neuquén, del 1 al 5 de marzo de 2011.

Profesor Visitante del Instituto de Física de San Carlos, Univ. de San Pablo, Brasil. Dictado del curso de post-grado: "Introducción a la Espectroscopía Vibracional". 18-28 de febrero de 2013.

Profesor curso intensivo internacional llamado OpenLab, auspiciado por la UNESCO, la Internacional Union of Crystallography (IUCr) y Agilent Technologies y que tuvo por objeto la enseñanza de la Cristalografía Estructural en el marco de las celebraciones del Año Internacional de la Cristalografía, una iniciativa de la UNESCO. Del 5 al 10 de Mayo 2014.

VI.5 Actuación en Universidades e Institutos de Investigación

Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires, Olavarría (BA). Dictado del curso "Difracción de Rayos X: Determinación de Estructuras Cristalinas", en el marco del Curso de Actualización en Ciencias Químicas, auspiciado por la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires (CICPBA). 1980.

Instituto de Física y Química de San Carlos (IFQSC), Universidad de San Pablo, Brasil.

i) Invitado por el IFQSC en el marco de la colaboración científica existente entre los Laboratorios de Cristalografía de Rayos X de dicha institución y del Departamento de Física, FCE, UNLP.

Dictado de seminarios de la especialidad en el IFQSC y en la Facultad de Física y Química de Minas Gerais, Belo Horizonte (MG), Brasil. Abril de 1981.

ii) Dictado en el IFQSC de los seminarios:

iiia) "Método de Máxima Entropía en Cristalografía de Rayos X".

iiib) "Acoplamiento Vibracional Dipolo-Dipolo en Complejos de Coordinación Sólidos". 5-12 de mayo de 1984.

iiic) Proyecto de colaboración "Química y Física Estructural de Compuestos Orgánicos e Inorgánicos", entre los laboratorios mencionados en i) en el marco del convenio de intercambio científico CONICET-CNPq (Brasil).

Dictado del seminario "Interacción Dipolo-Dipolo de Transición Entre el Modo de Estiramiento NO en las Mezclas Isotópicas $\text{Sr}[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{N}(^{16}\text{O}/^{18}\text{O})].4\text{H}_2\text{O}$ y $\text{Ba}[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{N}(^{16}\text{O}/^{18}\text{O})].3\text{H}_2\text{O}$ ". 11 de febrero al 15 de marzo de 1985.

iv) Estadías 1/4/86-15/5/86, 23/3/87-3/7/87 y 22/4/88-22/6/88 para trabajar en el proyecto de colaboración mencionado en iii).

Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia de la Universidad Nacional de San Luis, San Luis (SL). Profesor Visitante del curso de posgrado "Los Rayos X y su Aplicación en la Determinación de Estructuras Cristalinas". 4-9 de noviembre de 1985.

Facultad de Ciencias Naturales e Instituto Miguel Lillo, Universidad Nacional de Tucumán, S.M. de Tucumán (T). Profesor Visitante del curso de posgrado "Difracción de Rayos X". 21-26 de setiembre de 1987.

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química, INTEC(CONICET), Santa Fe (SF), 8-12 de agosto de 1988. Dictado del curso de post-grado "Cristalografía de Rayos X" y de los seminarios:

"Reflectancia Infrarroja y Estructura Vibracional del Superconductor $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ " y "Determinación Estructural en Macromoléculas".

Centro Atómico Bariloche (CNEA)-Instituto Balseiro-Universidad Nacional de Cuyo, Bariloche (RN). Profesor Visitante, dictado del curso "Cristalografía de Rayos X", 30 de octubre-3 de noviembre de 1989. Dictado del seminario "Cristalografía Estructural a Partir de Difractogramas de Polvos", 9 de noviembre de 1989.

Laboratoire de Physique, Centre de Chatenay-Malabry, Université de Paris-Sud, Francia. 'Maitre de Conference Associé'. 29 de noviembre de 1989-30 de setiembre de 1990. Dictado de los seminarios:

"Vibrational Dipole-Dipole Coupling in Some Pentacyano-L-metallatos". 15 de febrero de 1990.

"Spectroscopic Studies of Excited Electronic Metastable States of the Nitroprusside Anion, $[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]^{2-}$ ". 22 de febrero de 1990.

"Optical Properties in the Infrared and Vibrational Structure of Crystals". 1ero de marzo de 1990.

"Crystal Structure and Magnetic Interactions in Copper-amino Acid Complexes". 8 de marzo de 1990.

Instituto de Física y Química de San Carlos (IFQSC), Universidad de San Pablo, Brasil. Profesor Asociado Visitante. Subsidio de la Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo

(FAPESP) para realizar tareas de investigación en Física del Sólido durante el período febrero 1991-febrero 1992.

Instituto de Física y Química de San Carlos (IFQSC), Universidad de San Pablo, Brasil. 10-18 de setiembre de 1994. Dictado del seminario: "Electronically Excited Metastable States in Coordination Compounds"

Instituto de Física de San Carlos, Universidad de San Pablo, Brasil. Responsable por la parte de Argentina del Proyecto "Estructura y Espectroscopía de Sólidos de Coordinación", seleccionado en el concurso 1994/1995 por la Fundación Vitae de Brasil (Antorchas en Argentina, Andes en Chile) en el marco del Programa de Cooperación Científico-Académica entre Argentina, Brasil y Chile. 11 de diciembre 1995-31 de enero de 1996.

Instituto Balseiro, Comisión Nacional de Energía Atómica, Universidad Nacional de Cuyo. 12 de febrero al 8 de marzo de 1996. Profesor Asociado Invitado para dictar el curso de post-grado "Cristalografía de Rayos-X".

Department of Chemistry, University at Buffalo, State University of New York, Buffalo (NY), USA. 17-24 de agosto de 1996. Dictado de los seminarios:

"Electronically Excited Metastable States in M-NO (M:Fe, Ru, Os) Complexes". 19 de agosto de 1996.

"Crystallography and Magnetic Properties in Complexes of Cu(II) with Aminoacid and Related Ligands". 23 de agosto de 1996.

Instituto de Física de San Carlos, Universidad de San Pablo, Brasil. Responsable por la parte de Argentina del Proyecto "Estructura y Espectroscopía de Sólidos de Coordinación", seleccionado en el concurso 1995/1996 por la Fundación Vitae de Brasil (Antorchas en Argentina, Andes en Chile) en el marco del Programa de Cooperación Científico-Académica entre Argentina, Brasil y Chile. 31 de enero 1997-1 de marzo de 1997.

Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de Tucumán. Del 23 al 27 de junio de 1997. Profesor Invitado para dictar el curso de post-grado "Cristalografía Estructural por Difracción de Rayos-X".

Instituto Balseiro, Comisión Nacional de Energía Atómica, Universidad Nacional de Cuyo. 2 al 24 de febrero de 1998. Profesor Titular Invitado para dictar temas de mi especialidad en el marco del curso intensivo de post-grado sobre "Cristalografía estructural, microscopía electrónica de barrido y microanálisis con sonda de electrones".

Departamento de Química-Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Salta. Del 30 de noviembre al 4 de diciembre de 1998. Profesor Invitado para dictar el curso de post-grado "Cristalografía de Monocristal", auspiciado por el Proyecto N° 056 del FOMECE.

Departamento de Físico Química, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba. Del 29 de noviembre al 3 de diciembre de 1999. Profesor Invitado para dictar el curso de post-grado "Cristalografía de Monocristal", en el marco del Programa FOMECE

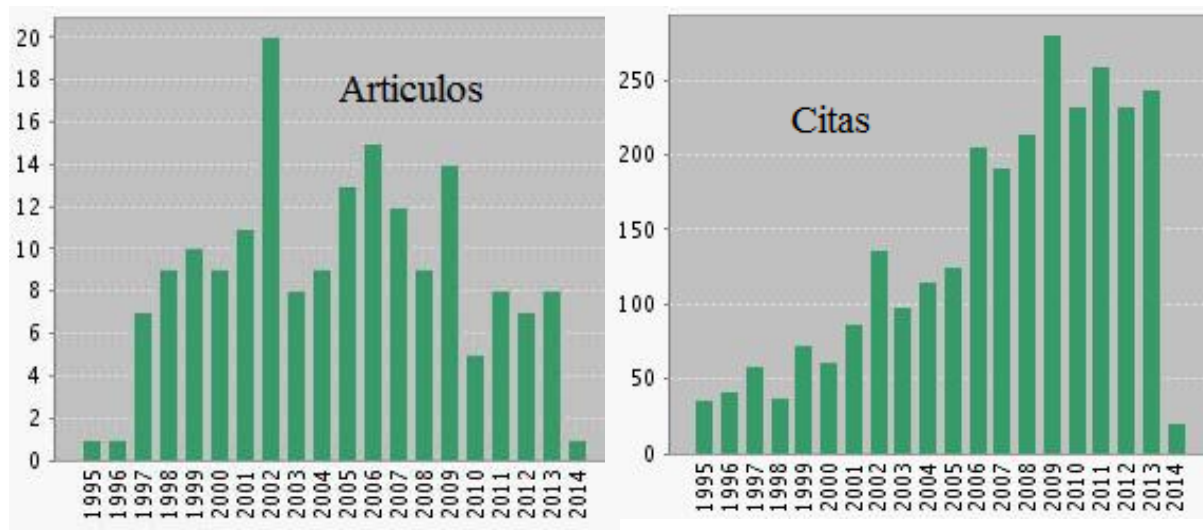
Departamento de Química de la Universidad Federal de San Carlos (UFSCar) e Instituto de Física y Química de San Carlos (IFQSC), Universidad de San Pablo, Brasil. Profesor Visitante financiado por la Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) para realizar tareas de investigación en cristalografía y espectroscopía de complejos de coordinación, durante el período 6 de enero al 6 de febrero de 2004.

Instituto de Física de San Carlos (IFSC), Universidad de San Pablo (USP), Brasil. Profesor Visitante financiado por FAPESP para realizar tareas de investigación en el marco del Proyecto Temático FAPESP tetra-anual (2004-2007) titulado “Crystallographic, electronic and molecular dynamics studies of some calixarene supramolecular compounds and its complexes with heavy atoms”, durante el período desde el 6 de enero al 6 de febrero de 2005.

Instituto de Física de San Carlos, Universidad de San Pablo, Brasil. Investigador del Proyecto trianual “Development of viable technologies and monitoring systems for the remediation/detection of mercury in South American waters. Design of chelators with therapeutical properties (Mercury)”, subvencionado por la CEE (Contrato No. ICA4-CT-2002-2005). Períodos del 3 al 13 de enero y desde el 16 al 23 de setiembre de 2006, del 26 de enero al 9 de febrero, del 18 al 26 de mayo y del 14 al 22 de setiembre de 2007 y del 5 al 21 de febrero y del 28 de noviembre y el 5 diciembre de 2008.

VII SÍNTESIS DE APORTES ORIGINALES

El suscrito trabaja en Física del Estado Sólido, orientada principalmente hacia temas de Cristalografía Estructural (por métodos de difracción de rayos X) y hacia el estudio de la estructura vibracional (por espectroscopías infrarroja y Raman), electrónica (espectroscopías UV y Mössbauer) y magnética (por Resonancia Paramagnética Electrónica y susceptibilidades en función de la temperatura) de sólidos. Esta actividad ha dado lugar a unos 253 artículos científicos publicados en revistas indexadas, 222 de los cuales han recibido (de acuerdo a la base de datos del Institute for Scientific Information de Febrero 2014) 3063 citas (13.80 citas/ítem, trabajo mas citado: 106 citas), 2689 sin auto-citas, índice-h=28 (ver histograma ISI con datos de los últimos 20 años):



En la temática de Cristalografía Estructural, se ha realizado un aporte teórico original a la solución del llamado 'problema de las fases', mediante la utilización de un método de inferencia estadística basada en el principio de Máxima Entropía de la Teoría de la Información (Pubs. 11 y 50 del ítem V.1). En los últimos años, este tipo de enfoque al problema ha constituido un activo campo de investigación, en particular, por su potencial utilidad en la resolución 'ab-initio' de la estructura de macromoléculas de interés biológico a partir de datos de difracción.

Con referencia a sistemas de interés biológico, debemos señalar la contribución realizada al entendimiento de la interacción entre proteínas y hormonas esteroides, tema este de considerable importancia en Medicina Clínica y Biología Molecular (Pub. 15).

En la problemática de los sólidos inorgánicos, se ha incrementado considerablemente el conocimiento de la estructura cristalina y molecular de complejos de coordinación empleando métodos de difracción de rayos X y se ha aportado al entendimiento, sobre la base de los resultados cristalográficos, de aspectos que hacen a la estructura electrónica y vibracional y a los procesos de termodescomposición, fotolíticos y de deshidratación en estos sistemas (ver, por ejemplo, Pubs 1-5, 8, 12, 13, 18, 19, 22, 34, 47, 49, 54, 56-59, 61, 73, 91, 92, 94-96, 101, 110-113, 117, 131, 133, 163 y 188).

Con referencia a la estructura vibracional de cristales inorgánicos, debemos enfatizar el aporte realizado al poner en evidencia, por primera vez en complejos de coordinación sólidos, la existencia de acoplamiento intermolecular dipolo-dipolo de transición entre las vibraciones fuertemente polares del ligante no-cianuro en algunos pentaciano-L-metalatos (Pubs. 14, 16, 17, 21, 39 y 44).

Dentro de la temática de la estructura electrónica y vibracional de sólidos de coordinación, debemos señalar que se ha reportado por primera vez el espectro de absorción infrarrojo a bajas temperaturas en monocristales de $\text{Na}_2[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (SNP) y $\text{Ba}[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (BNP) con parte de los aniones en dos estados electrónicos metaestables (MSI y MSII). Nuestros datos incluyen a los obtenidos previamente por espectroscopía Raman en SNP y aportan información experimental nueva acerca de la geometría y estructura vibracional del ion nitroprusiato en sus estados electrónicos excitados metaestables (Pubs. 20, 27, 37, 45 y 100). Posteriormente, descubrimos la existencia de estados similares en las sales $\text{Na}_2[\text{M}(\text{CN})_5\text{NO}]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (M:Os, Ru), isomorfas a SNP, que exhiben novedosos comportamientos espectroscópicos no detectados previamente en la serie de compuestos relacionados (Pubs. 48 y 53). De esta manera mostramos, por primera vez, que el fenómeno hasta ese entonces conocido en compuestos metal(*nd*)NO with $n=3,4$, también ocurre en complejos presentando el enlace metal(*5d*)NO. Los compuestos de osmio y de rutenio, además, presentan dos comportamientos que lo vuelven único dentro de la serie de complejos relacionados que exhiben metaestabilidad: (1) Las temperaturas de decaimiento de los estados MSI y MSII se observan con $T_I < T_{II}$, un orden inverso al reportado en los sistemas relacionados; (2) Ha sido detectada una transferencia MSI $\rightarrow$ MSII entre los estados electrónicos excitados, activada térmicamente. Estos sistemas son considerados en la literatura como potencialmente útiles para actuar como 'llave óptica' rápida en computadoras, en el procesamiento de señales ópticas y como material de almacenamiento óptico de información.

También se ha realizado un aporte relevante al tema de las propiedades ópticas de láminas plano-paralelas de sólidos anisotrópicos absorbentes. Para ello se ha llenado una carencia en la

literatura científica mediante la derivación de expresiones nuevas para la reflectancia y transmitancia de placas de cristales de simetría ortorrómbica o superior que presenten cualquier grado de absorción (Pubs. 24 y 43). Este tema es relevante en espectroscopía de sólidos, particularmente en el estudio de películas delgadas y de sistemas de multicapas. Los resultados teóricos reportados en las Pubs. 24 y 43 han sido empleados en el estudio de la estructura vibracional de algunos sólidos inorgánicos, obteniéndose un buen acuerdo con los resultados espectroscópicos experimentales (Pubs. 25, 30 y 45).

En el campo de la espectroscopía de sólidos se han realizado contribuciones teórico-experimentales originales al tema de reflectancia total atenuada (ATR) en cristales anisotrópicos fuertemente absorbentes (Pubs. 28 y 34).

Se ha aportado también al tema de la estructura cristalina y molecular y propiedades electrónicas e interacciones magnéticas de superintercambio en complejos de Cu(II) con aminoácidos y ligandos relacionados. Estos compuestos son de interés general en Materia Condensada, en particular por exhibir comportamiento físico de baja dimensionalidad, en Magnetismo Molecular, en Química de Coordinación y también en Biología Molecular en razón de proveer sistemas modelo del comportamiento de iones de transición en metaloproteínas de interés biológico (Pubs. 32, 36, 38, 40, 41, 46, 52, 55, 62, 74, 79, 83, 118, 130, 148, 149, 161 y 175).

También debemos señalar la contribución realizada al conocimiento de la estructura de cerámicos superconductores de altas temperaturas críticas (Pub. 26), como así también en el tema de la estructura vibracional de dichos superconductores (Pubs. 29 y 31).

Recientemente, hemos publicado la estructura molecular por difracción de rayos-X en estado sólido y las propiedades termodinámicas, espectroscópicas (UV, RMN de ^1H y ^{13}C), cinéticas y electroquímicas en solución de una serie de nuevos derivados de calix(4)arenos recientemente sintetizados y cristalizados y de complejos de inclusión de estos macrociclos tanto con moléculas de solvente en su cavidad hidrofóbica como con cationes y aniones en su cavidad hidrofílica (Pubs. 66, 67, 71, 72, 139 y 140). Estas versátiles moléculas presentan gran interés en Fisicoquímica orgánica básica y también en tecnología por sus posibles aplicaciones como verdaderos reservorios moleculares para el reconocimiento y transporte de especies químicas más pequeñas. Esta propiedad de los calixa[4]renos los hacen potencialmente útiles en procesos de extracción de metales preciosos (tales como la plata) y de compuestos estratégica y tecnológicamente relevantes (como UO_2^{2+}) y también en la preservación del medio ambiente (eliminando contaminantes acuíferos, tales como Cd^{2+} , Hg^{2+} y Pb^{2+}). Relacionado con este último tema, recientemente hemos sintetizado y resuelto la estructura molecular de complejos de Cd^{2+} y Pb^{2+} con un derivado estérico y otro cetónico del *p*-tert-butil calix[4]areno (Pub. 120) y también de sendos complejos de Ag(I) y Hg(II) con un derivado parcial sulfurado de este calixareno (Pubs. 154, 155, 158 y 159).

Los numerosos resultados estructurales obtenidos por nuestro grupo nos han permitido realizar avances sustanciales en cuatro aspectos claves del proceso de formación de complejos supramoleculares, esto es, *complementaridad*, *preorganización*, *alosterismo* y *aditividad termodinámica* en calix[4]arenos.

- 1) **Complementaridad:** dilucidamos la estructura molecular adecuada que debe poseer la cavidad hidrofílica del calixareno para realizar eficientemente el proceso de captura de iones [Pubs. 80, 98 y 102].

- 2) **Preorganización:** esto es, la conformación molecular inicial del calixareno libre para que, por movimientos libracionales coordinados de los grupos colgantes que conforman la cavidad hidrofílica, no impedidos por repulsiones estéricas, pueda alcanzar el estado final actuando como ligante de un ión hospedado en dicha cavidad. Hemos aportado a esta importante temática dilucidando la estructura de un nuevo calix(4)areno libre y de su complejo con Na^+ hospedado en la cavidad hidrofílica y una molécula del solvente acetonitrilo en el cáliz hidrofóbico [Pub. 98]. Así, los resultados estructurales por difracción de rayos-X en el sólido proveen una suerte de “fotografías estáticas” de los estados inicial y final del proceso de complejación que ocurre en solución.
- 3) **Alosterismo:** estos efectos ocurren en moléculas de gran porte: modificaciones conformacionales en una dada región molecular promueven cambios en otra región molecular separada. No es sorprendente que moléculas tan flexibles como derivados de calixarenos exhiban también alosterismo. En efecto, hemos demostrado la presencia de efectos alostéricos en algunos derivados del *p-tert-butylcalix(4)areno* en la conformación cónica. En estos sistemas, cuatro anillos bencénicos limitan una cavidad hidrofóbica capaz de interactuar con pequeñas moléculas orgánicas neutras (usualmente, solvente) dando lugar a complejos moleculares. Mediante el reemplazo de los hidrógenos fenólicos con residuos apropiados se puede crear otra cavidad, ahora de carácter hidrofílica, donde pueden tener lugar interacciones iónicas y/o de puentes de hidrógeno. Hemos probado que estas interacciones determinan el grado de apertura del cáliz y así la capacidad de éste para hospedar una molécula de solvente formando un complejo molecular. Así, estos derivados de *p-tert-butyl calix(4)arenos* pueden actuar como receptores bifuncionales de pequeñas moléculas orgánicas neutras en el cáliz y de especies cargadas dentro o en la periferia en la cavidad hidrofílica. Nuestros estudios estructurales muestran que estos efectos alostéricos pueden ser tanto *positivos* como *negativos* [Pub. 124].
- 4) **Aditividad termodinámica:** los resultados cristalográficos jugaron un papel clave en la racionalización de nuestra observación, por primera vez, de un comportamiento termodinámico aditivo (entalpía, energía libre de Gibbs, entropía) con el número de grupos quelantes del calixareno durante el proceso de acomplejación con mercurio(II) en una solución de acetonitrilo (Ref. 155).

Relacionado con la temática del empleo de calixarenos en la remoción de contaminantes acuíferos, hemos cubierto una carencia en la literatura relacionada con simulaciones de Dinámica Molecular (DM) en estos sistemas potencialmente relevantes en la preservación del medio ambiente. En efecto, motivados por esta carencia hemos determinado nuevos parámetros de Lennard-Jones para los iones contaminantes Cd^{2+} and Pb^{2+} que describen la interacción ion-agua. Para ello desarrollamos una estrategia de cálculo de DM basada en el ajuste de dichos parámetros de manera de reproducir, simultáneamente, tanto los valores observados de energías libres absolutas de hidratación como propiedades estructurales experimentales, esto es la función de distribución de pares $g(r)$ y los números de coordinación alrededor del ion, obtenidos por dispersión de rayos-X en solución [Pub. 174]. Basado en dichos parámetros, hemos simulado con éxito la sinérgica y conformación de equilibrio en soluciones de acetonitrilo de complejos de Cd^{2+} and Pb^{2+} con un derivado estérico y otro cetónico del *p-tert-butyl calix(4)areno*, macrociclos potencialmente útiles para actuar como secuestrantes de estos iones peligrosos para el medio ambiente [Pub. 192].

Más recientemente, hemos sintetizado y estudiado por difracción de rayos-X en el sólido y por diversos métodos fisicoquímicos en solución dos complejos de Ag(I) y Hg(II) con un derivado

parcialmente sulfurado del *p-tert*-butil calix(4)areno. Hemos señalado la potencial aplicación de este macrociclo en la remoción de mercurio de aguas contaminadas, mediante su anclaje a un soporte de sílica y demostrado su funcionamiento como un verdadero filtro molecular reciclable [Ref 216].

También hemos aportado a la síntesis y caracterización estructural de complejos de iones metálicos que juegan roles fundamentales en los procesos biológicos, tema de interés de la Bioinorgánica. En particular, el magnesio(II) es uno de los iones metálicos mas abundantes de la corteza terrestre. Es el segundo electrolito intracelular más común y el cuarto más abundante en el cuerpo humano. Recientemente se han reconocido un número de desórdenes y enfermedades claramente relacionadas a deficiencia en Mg(II) (hipomagnesemia). En ciertas regiones geográficas, un bajo nivel de Mg(II) genera una serie de enfermedades en rumiantes y otros animales. Esta situación ha impulsado investigación básica en sistemas adecuados para la suplementación de Mg(II) tanto en medicina humana como en veterinaria y la magnesio terapia es actualmente un área importante en medicina y farmacología. Nuestros resultados cristalográficos en este tema mostraron que el ácido isoorótico actúa como un eficiente ligante bidentado del Mg(II), formando el complejo neutro $[Mg(isoor)_2(H_2O)_2]$. Experimentos realizados en jugos gástricos simulados muestran tiempos adecuados de disolución del sólido, sugiriendo la potencial utilidad del complejo en el tratamiento de la hipomagnesemia [Pub. 77]. También se realizaron estudios similares en el complejo del ácido isoorótico con Li(I) [Pub. 78] y en el citrato de Li(I) [Pub. 63], potencialmente útiles como fármacos para el tratamiento de desórdenes afectivos.

También en el área de la Bioinorgánica hemos explorado la estructura de complejos del conocido agente edulcorante artificial sacarina (o-sulfobenzomide) con los iones trivalentes de todos los elementos de tierras raras e itrio. Nuestro completo estudio estructural llena una carencia en la literatura, constituyéndose en un trabajo de referencia tanto para la química de coordinación de complejos sacarinato como para la cristalografía de los lantánidos [Pub. 109]. Otros aportes realizados en la relación estructura-propiedades de materiales bioinorgánicos, se encuentran reportados en las Pubs. 110, 121, 126, 127, 131, 133, 134, 136, 145-148, 157, 160, 165, 170, 171 y 189.

Hemos realizado también estudios de difracción de rayos X para identificar productos formados en la interacción de superficies metálicas con compuestos orgánicos utilizados como aditivos tanto en electro-cristalización como en electro-disolución (corrosión y pasividad de metales). Esta información estructural es básica para comprender a nivel molecular la cinética y el mecanismo de las reacciones electroquímicas mencionadas y así dar una fundamentación científica al uso de aquellos materiales, hasta ahora manejados principalmente en forma empírica. Estos estudios ofrecen la posibilidad de llegar a proponer sustancias con propiedades óptimas para sistemas de importancia técnica relacionados con la obtención de diferentes tipos de depósitos metálicos y también de su protección frente a posibles deterioros en medios agresivos. Trabajo estructural del grupo en complejos que resultan de la interacción de soluciones electrolíticas de tiourea con electrodos de cobre se encuentra en la Pub. 88, en tanto que estudios con electrodos de oro se encuentran reportados en la Pub. 106. Estudios estructurales de los productos resultantes en la oxidación química y electroquímica del solvente electrolítico tetrametilthiourea se encuentran reportados en la Pub. 177, en tanto que la identificación estructural y caracterización fisicoquímica preliminar de un nuevo complejo polimérico de cobre obtenido en la deposición electrolítica de este metal se encuentra en la Pub. 182.

También hemos aportado al conocimiento de la estructura molecular de materiales que presentan fases de cristal líquido (mesofases), con interesantes propiedades físicas derivadas de su estructura electrónica y de potencial interés tecnológico por su empleo en pantallas monitoras ('displays'). Dichos compuestos son normalmente sometidos a un exhaustivo estudio estructural en su fase de cristal líquido. Sin embargo, la información que es posible extraer de estos sistemas altamente desordenados es limitada, sobre todo a nivel intramolecular. Con el objetivo de proveer información detallada a nivel atómico sobre la estructura interna de dichos compuestos, se realizaron estudios por difracción de rayos-X en las fases cristalinas de complejos de iones metálicos con ligantes alifáticos que dan origen a dichas mesofases y los resultados se reportan en las Pubs. 84, 104 y 116.

Como un aporte al entendimiento de la relación estructura molecular-propiedades de materiales medicinales, hemos determinado la estructura cristalina de fármacos naturales, tales como la Diogenona, empleado en el tratamiento de la malaria (Pub. 115), de 2R-(-)-6-hydroxytremetone, sustancia bioactiva obtenida a partir de extractos de la planta *Xenophyllum poposum* (Phil) V.A. Funk empleada en el tratamiento popular de hipertensión arterial, reuma y otras afecciones (Pub. 186) y de 4H-1-Benzopyran-4-one, 5-hydroxy-2-(4-hydroxyphenyl)-7-methoxy-6,8-dimethyl que se extrae de *Miconia ioneura* (M.i.) *Melastomataceae* y que presenta actividad antimicrobiana (Pub 219) y también de complejos sintéticos de rutenio(II) con ligantes que presentan propiedades anti-chagásicas (Pub. 129). Este último trabajo ha sido destacado en una nota editorial de Platinum Metals Review, Vol. 47, N° 2, pag. 87. Debe enfatizarse que la 'enfermedad de Chagas' o 'trypanosomiasis americana' representa un serio problema de salud pública en los países y regiones donde es endémica (21 países de América Central y del Sur) debido a que no existen métodos efectivos de inmunoprofilaxis o de quimioterapia. La enfermedad es causada por el *Trypanosoma cruzi* y afecta a 16-18 millones de personas infectadas, constituyendo, además, en una amenaza para una población estimada en unos 100 millones de personas. Otros estudios recientes sobre la relación estructura-función biológica de materiales farmacológicos con actividad anti-chagásica (y, en algunos casos, también anti-tumoral) se encuentran reportados en las Pubs. 99, 138, 142-144, 150, 151, 153, 156, 165, 169, 173, 176, 185, 189, 196, 213 y 218.

También hemos explorado las propiedades estructurales de materiales bio-inorgánicos útiles para propósitos radioterapéuticos y los resultados se reportan en las Pubs. 57, 75, 122 y 132.

Finalmente, deseamos enfatizar el aporte realizado a la relación estructura-propiedades de materiales de interés en Fisicoquímica Orgánica. Los resultados de estos estudios se encuentran reportados en las Pubs. 86, 87, 93, 97, 103, 125, 141, 168, 172, 184, 197 y 234

VIII OTROS DATOS DE INTERES

VIII.1 Dirección de Tesistas, Investigadores, Becarios y Alumnos.

Colaborador principal en la dirección del trabajo de tesis "Espectroscopía Vibracional de Sólidos Inorgánicos" presentado y aprobado con la máxima calificación por el Lic. Javier I. Amalvy para optar al título de Doctor en Ciencias Químicas. Mayo de 1984, Departamento de Química (DQ), FCE, UNLP.

Dirección del trabajo de tesis de la Lic. Silvia R. González titulado "Estudios Espectroscópicos en Complejos de Coordinación Sólidos", presentado y aprobado con la máxima calificación en mayo de 1986 para obtener el título de Doctor en Ciencias Químicas en la FCE, UNLP. Este trabajo ha sido distinguido con la Primera Mención del Premio Hans. J. Schumacher, correspondiente al bienio 1984-1986, otorgado por la Asociación Argentina de Investigación Fisicoquímica.

Dirección del trabajo de tesis doctoral del Lic. Jorge A. Güida en el tema: "Estudios Espectroscópicos Vibracionales y Electrónicos de Cristales Inorgánicos". Tesis presentada y aprobada con la máxima calificación el 5 de octubre de 1992 para obtener el título de Doctor en Ciencias Químicas en la FCE, UNLP. Este trabajo ha sido distinguido con el Premio Dr. Luis Federico Leloir, correspondiente al bienio 1991-1992, otorgado por la Universidad de Buenos Aires y también con una Mención Especial del Premio Hans J. Schumacher, correspondiente al bienio 1992-1993, otorgado por la Asociación Argentina de Investigación Fisicoquímica.

Dirección del trabajo de tesis doctoral de Alexandre Suman de Araujo, alumno del Doctorado del Instituto de Física de San Carlos (IFSC), Universidad de San Pablo (USP), Brasil, a partir de julio de 2004. Tesis "Estudios de procesos de complejación de calixarenos con iones metálicos y especies neutras por simulaciones de Dinámica Molecular", aprobada el 20 de septiembre de 2006.

Dirección del Dr. Güida en el cargo de Investigador Adjunto del CONICET (1995-1996).

Director de la Beca de Perfeccionamiento otorgada por la CICPBA al Lic. H.R. Viturro para trabajar en el tema: "Cristalografía Teórica y Experimental". Abril de 1982 a abril de 1984.

Dirección de las Becas de Iniciación a la Investigación (abril 1984-marzo 1986), de Perfeccionamiento (abril 1986-marzo 1988) y de Formación Superior (abril 1988-marzo 1990) otorgadas por CONICET al Lic J. A. Güida.

Director Beca de Iniciación otorgada por CONICET a la Lic. F. Quinteros Rivero por 21 meses a partir del 01/07/90 en el tema: "Determinación de la Estructura Cristalina y Molecular de Sólidos".

Director beca de Iniciación otorgada por CONICET al Lic. A. Goeta (abril 1991-abril 1992).

Director de Gustavo Echeverría en el Trabajo de Diploma de la Licenciatura en Física, Depto de Física, FCE, UNLP. Período 1989-91. Trabajo titulado "Propiedades Ópticas y Estructura Vibracional de Sólidos".

Director de Alejandro V. Silhanek en el Trabajo de Diploma de la Licenciatura en Física, Depto de Física, FCE, UNLP. Período agosto 1996-junio 1997. Trabajo titulado "Estructura Cristalina y Molecular y Propiedades Espectroscópicas de $\text{Rb}[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]\cdot\text{H}_2\text{O}$ " (rendido con la máxima calificación el 13 de junio de 1997).

Co-director de Lorena Baum en el tema “Magnetismo en sistemas de baja dimensionalidad”, beca Techint para estudiantes avanzados, desde el mayo 2002 a agosto 2003.

VIII.2 Revisión de Revistas Científicas

Acta Crystallographica A y C
Journal of Crystallographic and Spectroscopic Research
Spectrochimica Acta
Vibrational Spectroscopy
Inorganic Chemistry
Journal of Solid State Chemistry
Journal of the Argentine Chemical Society
Materials Research Bulletin
Biochimica et Biophysica Acta-Proteins and Proteomics
Supramolecular Chemistry

VIII.3 Integración de Jurados de Tesis y Premios Doctorales

Tesis "Estudios Espectroscópicos de Infrarrojo y Raman en Compuestos Moleculares", presentada por el Lic. Carlos Della Vedova para optar al título de Doctor en Ciencias Químicas. FCE, UNLP, 15 de diciembre de 1983.

Tesis "Espectroscopía Vibracional de Sólidos Inorgánicos", presentada por el Lic. Javier I. Amalvy para optar al título de Doctor en Ciencias Químicas. FCE, UNLP, mayo de 1984.

Tesis "Estructura Electrónica de Defectos con Niveles Profundos en Semiconductores Mediante Cálculos de 'Clusters' por Técnicas Semiempíricas", presentada por el Lic. Silvano J. Sferco para optar al título de Doctor en Física. FCE, UNLP, 29 de noviembre de 1984.

Tesis "Laser de Monóxido de Carbono. Estudio Espectroscópico del Sistema Angstrom", presentada por el Lic. Daniel C. Schinca para optar al título de Dr. en Física. FCE, UNLP, 8 de febrero de 1985.

Tesis "Fricción Interna de Alta Temperatura en Metales y Aleaciones de Interés Nuclear", presentada por el Lic. Bernardo J. Molinas para optar al título de Dr. en Física. FCE, UNLP, febrero de 1985.

Tesis "Deformación en Caliente de Aleaciones de Fe. Influencia de los Microaleantes", presentada por el Lic. Jose E. Ruzzante para optar al título de Dr. en Física. FCE, UNLP, setiembre de 1986.

Tesis "Análisis de Señales e Inferencia Estadística", presentada por la Lic. Laura E. Rebollo Neira para optar al título de Dr. en Física. FCE, UNLP, 10 de octubre de 1986.

Tesis "Fenómenos Elásticos y Anelásticos en Metales y Aleaciones Bajo Deformaciones Multiaxiales. Módulo de Poisson Dinámico", presentada por el Lic. Raul E. Bolmaro para optar al título de Dr. en Física. FCE, UNLP, 12 de marzo de 1987.

Tesis "Interacciones Magnéticas en la Fase Monoclínica del Pirofosfato de Sodio e Hierro", presentada por el Lic. Luis Terminiello para optar al título de Dr. en Física. FCE, UNLP, 26 de agosto de 1988.

Tesis "Estudio Experimental y Modelado de la Deshidratación Topotáctica del Acido Aminoundecanoico Dihidratado en Estado Sólido", presentada por el Lic. Mario A. Bianchet para optar al título de Dr. en Física. FCE, UNLP, 2 de septiembre de 1988.

Tesis "Propiedades Electrónicas, Estructurales Estáticas y Dinámicas de Semiconductores Bajo Presión", presentada por el Lic. Ricardo A. Cazali para optar al título de Dr. en Física. FCE, UNLP, 22 de febrero de 1989.

Tesis "Tratamiento de Problemas de Autovalores a Través de Relaciones de Recurrencia", presentada por el Lic. Dario Ariel Estrin para optar al título de Dr. en Ciencias Químicas. FCE, UNLP, 28 de julio de 1989.

Tesis "Fenómeno de Resonancia por Estructuras Periódicas y Cuasi-periódicas con Diferentes Estados de Coherencia", presentada por la Lic. Cecilia. M.V. Colautti para optar al título de Dr. en Física. FCE. UNLP, 1 de septiembre de 1989.

Tesis "Estructura Electrónica y Configuracional de Componentes del RNA de Transferencia para la Alanina", presentada por la Lic. Ana M. Tejo para optar al título de Dr. en Física. FCE, UNLP, diciembre de 1990.

Tesis "Propiedades Electrónicas e Interacciones Magnéticas del Complejo Cobre Bis(L-leucinato)", presentada por el Lic. Carlos A. Steren para optar al título de Dr. en Física. Ftad de Ciencias Exactas e Ingeniería de la Univ. Nacional de Rosario, Rosario (SF), 19 de diciembre de 1990.

Tesis "Gradiente de Campo Eléctrico en Oxidos Binarios", presentada por el Lic. Mario Rentería para optar al título de Dr. en Física. FCE. UNLP, 9 de diciembre de 1992.

Tesis "Aplicación del Formalismo Superespacial a la Descripción de Estructuras Conmensuradas. Estudio del Sistema $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-SrO}$ ", presentada por el Lic. Francisco E.A. Parisi para optar al título de Dr. en Ciencias Físicas. Ftad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA, 8 de junio de 1994.

Tesis " Propiedades Electrónicas y Magnéticas de Superredes Metálicas", presentada por el Lic. Gabriel Fabricius para optar al título de Dr. en Ciencias. FCE, UNLP, 27 de septiembre de 1994.

Tesis "Propiedades Electrostáticas de Moléculas de Interés Farmacológico", presentada por el Lic. Andrés E. Goeta para optar al título de Dr. en Ciencias. FCE, UNLP, 21 de julio de 1995.

Tesis "Interacciones Hiperfinas en el Sistema $\text{BaTiO}_3\text{-BaHfO}_3$ ", presentada por el Lic. Alejandro Pedro Ayala para optar al título de Dr. en Ciencias. FCE, UNLP, 22 de agosto de 1995.

Tesis "Estructuras y Transiciones de Fase en Complejos de Coordinación de Zn y Cd", presentada por el Lic. Daniel R. Vega para optar al título de Dr. en Ciencias Físicas. Ftad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA, 22 de septiembre de 1995.

Tesis "Estudio Espectroscópico de Especies Isotópicas del Nitroprusiato de Sodio. Refinamiento del Campo de Fuerza", presentada por la Lic. María Elizabeth Chacón Villalba para optar al título de Dr. en Ciencias Químicas. FCE, UNLP, 30 de octubre de 1995.

Tesis "Estudio Teórico-Experimental de Empaquetamientos en Cristales Moleculares Orgánicos", presentada por el Lic. Gustavo A. Echeverría para optar al título de Dr. en Ciencias. FCE, UNLP, 25 de marzo de 1997.

Tesis "Interacciones Hiperfinas en AHfO_3 con A=Ba, Sr y Ca ", presentada por la Lic. Patricia M. de la Presa para optar al título de Dr. en Ciencias. FCE, UNLP, 2 de abril de 1997.

Tesis "Caracterización y Estudio de la Capacidad de Amorfización de Vidrios en los Sistemas Fe-B-Sn y Ni-B-Sn", presentada por la Lic. Bibiana G. Arcondo para optar al título de Dr. en Ciencias. FCE, UNLP, 11 de abril de 1997.

Tesis "Estudio Estructurales y Conformacionales de Moléculas en Fase Gaseosa. Difracción de Electrones y Cálculos Químicos-Cuánticos", presentada por la Lic. Karina Inés Gobbato para optar al título de Dr. en Ciencias Químicas. FCE, UNLP, 5 de mayo de 1997.

Tesis "Síntesis, caracterización y propiedades de pentaciano(L)osmato(II)", presentada por el Lic. Leonardo D. Slep para optar al título de Doctor de la UBA, 21 de mayo de 1999.

Tesis "Estudio por resonancia paramagnética electrónica de las propiedades electrónicas de complejos de cobre con aminoácidos", presentada por la Lic. Marta B. Massa para optar al título de Doctor en Física de la Universidad Nacional de Rosario, 22 de junio de 1999.

Tesis "Compuestos de coordinación de renio: estudio estructural. Desarrollo y estudio fisicoquímico de nuevos precursores para la síntesis de compuestos de coordinación del Re", presentada por la Lic. Dinorah Gambino para optar al título de Doctor de la Universidad de La República, Montevideo, Uruguay, 16 de marzo de 2001.

Jurado del Premio Hans J. Schumacher, otorgado por la Asociación Argentina de Investigación Fisicoquímica a las mejores tesis doctorales realizadas durante el bienio 2002-2004.

Tesis "Interacciones eléctricas en macromoléculas de interés biológico", presentada por el Lic. Diego F. G. Vallejo para optar al título de Doctor de la Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 19 de diciembre de 2005.

Tesis "Estudios de procesos de complejación de calixarenos con iones metálicos y especies neutras por simulaciones de Dinámica Molecular", presentada por Alexandre Suman de Araujo, alumno del Doctorado del Instituto de Física de San Carlos (IFSC), Universidad de San Pablo (USP), Brasil, 20 septiembre de 2006.

Jurado del Premio J. J. Giambiaggi 2007 a las mejores tesis en Física del país durante el período 2005-2006.

VIII.4 Integración de Jurados de Concursos y Promociones y Comisiones Evaluadoras

Jurado de sendos concursos para proveer dos cargos de Profesor del Departamento de Física de la Universidad Nacional de San Luis, agosto de 2000 y abril de 2002.

Jurado Titular de tres concursos para proveer cargos de Profesor del Instituto de Física de San Carlos, Universidad de San Pablo, Brasil, mayo de 2001, mayo de 2002 y marzo de 2006.

Evaluador de proyectos de investigación, de ingresos y promociones de la Carrera del Investigador Científico y de becas del CONICET, desde 1998.

Evaluador Programa de Incentivos de la UNLP, 2004.

Evaluador promoción cargo de Investigador del Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas (IVIC), junio de 2005.

Profesor miembro Comisión Asesora para la provisión de 4 cargos de JTPDE y 7 cargos de JTPDS, Dto. de Física, FCE, UNLP, agosto de 2005.

Jurado Titular de cuatro concursos para proveer cargos de Profesor del Instituto de Física de San Carlos, Universidad de San Pablo, Brasil, del 18 al 20 de febrero de 2008.

Miembro de la Comisión Asesora de Física del CONICET, enero de 2009-enero de 2011 (Res. D N° 021).

Profesor miembro de Comisión Asesora para la provisión de 7 cargos de JTPDS, Dto. de Física, FCE, UNLP, julio de 2009.

Jurado Titular de un concurso para proveer un cargo de Profesor Libre Docente del Instituto de Física de San Carlos, Universidad de San Pablo, Brasil, 16 y 17 de mayo de 2011.

Profesor miembro de Comisión Asesora para la provisión de 6 cargos de Profesor Adjunto del Departamento de Física, FCE, UNLP, Agosto de 2011.

VIII.5 Actividades de Gestión Académica y Científica

Miembro del Consejo Asesor del Departamento de Física, FCE, UNLP, 1983, 1987, 1988, 1989, 1992, 1993, 1996, 2010.

Profesor miembro del Consejo Académico Normalizador Consultivo de la Facultad de Ciencias Exactas, UNLP y de la Comisión de Enseñanza de la misma Facultad, 1984-1985.

Profesor a cargo jefatura Departamento de Física, FCE, UNLP, desde septiembre de 1996 a setiembre de 1997.

Jefe del Departamento de Física, FCE, UNLP, desde noviembre de 2000 a noviembre de 2001.

Profesor miembro de la Comisión de Investigaciones Científicas de la Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, desde junio de 2005 hasta abril de 2008.

Miembro de la Commission on Structural Chemistry de la Internacional Union of Crystallography, desde julio de 2005 a agosto de 2008.

Profesor miembro de la Comisión de Investigaciones Científicas del Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, desde el 23 de abril de 2008.

VIII.6 Subsidios para Tareas de Investigación

Subsidio PID 3907602/85 otorgado por el CONICET, período 1985-87. Proyecto: "Estudios Estructurales de Complejos de Coordinación en Estado Sólido por Difracción de Rayos X".

Subsidio Proyecto 011/84 (código CONICET para el primer año) de colaboración científica titulado "Química y Física Estructural de Compuestos Orgánicos e Inorgánicos", realizado en el marco del convenio de Intercambio CONICET-CNPQ (Brasil) durante el período 1985-88.

Subsidio PID 3-071300/88 otorgado por el CONICET, período 1989-91. Proyecto: "Estructura y Propiedades Ópticas de Sólidos de Coordinación".

Subsidio PID 3601/92 otorgado por el CONICET, período 1993-95.
Proyecto: "Estructura de Sólidos de Coordinación".

Subsidio Fundación Vitae, Brasil (Antorcha en Argentina, Andes en Chile) en el marco del programa de Cooperación Científico-Académica entre Argentina, Brasil y Chile, períodos octubre 1995-octubre 1996, 1996-1997 y 1999-2000.
Proyecto: "Estructura y Espectroscopía de Sólidos".

Subsidio Automático de la UNLP dentro del marco del Programa de Incentivos del Ministerio de Educación durante el período 1996-2000.
Proyecto 11/X184: "Estructura de Sólidos".

Subsidio PIA 6400/96 otorgado por el CONICET para 1997.
Proyecto: "Estructura de Sólidos".

Subsidio Automático de la UNLP dentro del marco del Programa de Incentivos del Ministerio de Educación durante el período 2001-2005.
Proyecto 11/X269: "Estructura y Espectroscopía de Sólidos".

Subsidio PIP 0361/98 (CONICET), años 2000 y 2001
Proyecto: "Estructura de Sólidos".

Colaboración científica en el marco del convenio CONICET-CNPq (Brasil). Proyecto: "Aplicación de métodos cristalográficos por difracción de rayos-X al estudio de complejos de ligantes orgánicos con iones metálicos". Período 2001-2002.

Coordinador por Argentina de un Proyecto Temático (Proceso N° 98/12151-1) trianual subvencionado por FAPESP (Brasil).
Proyecto: "Studies of the molecular and electronic structures of small molecules for pharmacological and environmental applications". Período 1999-2002.

Coordinador por Argentina de un Proyecto Temático (Proceso N° 2003/07521-4) trianual subvencionado por FAPESP (Brasil).
Proyecto: "Crystallographic, electronic and molecular dynamics studies of some calixarene supramolecular compounds and its complexes with heavy atoms".
Período: 2004-2006

Subsidio PIP 6006 (CONICET), años 2005 y 2006.
Proyecto: "Estructura y Espectroscopía de Sólidos de Coordinación".

Subsidio Automático de la UNLP dentro del marco del Programa de Incentivos del Ministerio de Educación para el período 2006-2009.
Proyecto 11/X460: "Estructura y Espectroscopía de Sólidos de Coordinación, Moleculares y Supramoleculares".

Subsidio PIP 112 200801 01529 (CONICET) años 2009-2011.
Proyecto: "Relación Estructura Molecular-Propiedades de Materiales".

Subsidio Automático de la UNLP dentro del marco del Programa de Incentivos del Ministerio de Educación para el período 2010-2013.

Proyecto 11/X593: "Relación Estructura Molecular-Propiedades de Materiales".

VIII.7 Dirección y Organización de Grupos de Investigación

Director del Programa de Física Molecular (PROFIMO) del CONICET, desde octubre de 1996 a junio de 1999, cuando se integró al Instituto de Física de La Plata (IFLP) del CONICET.

Miembro del Consejo Directivo del IFLP (CONICET-UNLP), desde su fundación, el 10-06-1999.

Co-Director del Laboratorio Nacional de Difracción (LANADI) del CONICET, desde enero de 1999.

VIII.8 Actividad en Extensión Universitaria

Co-Director del proyecto acreditado "Portal de divulgación de la Física" (desde 2007).
Sitio: <http://descubriendo.fisica.unlp.edu.ar>

Artículo: "¿Que es el tubo de Monsieur Pitot?". Oscar E. Piro, Episteme, Revista de Ciencia N°9, mayo 2010, p. 16-18, Editorial del IFLP. También accesible en:
<http://descubriendo.fisica.unlp.edu.ar>

Libro "Fundamentos electromagnéticos de la Revolución Tecnológica", Oscar E. Piro, ISBN 978-3-8473-6405-4, Editorial Académica Española, Saarbrücken, Alemania (2012).

Libro a ser enviado para su publicación: "Breve historia del ADN, su estructura y función", Oscar E. Piro (2012).

Exposición sobre "Físicos, Ingenieros e Inventores y sus Máquinas Eléctricas". Oscar E. Piro, Escuela Técnica N° 2 de Ensenada, 25 de Noviembre de 2011.

Exposición sobre "Breve historia del ADN, la molécula de la herencia, su estructura y función". Oscar E. Piro, Ciclo de charlas de divulgación organizadas por la filial La Plata de la Asociación Física Argentina (AFA), 26 de abril de 2012.