

UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA

Facultad de Ciencias Exactas

**Preparación y estudio de propiedades moleculares de  
compuestos covalentes en los estados electrónicos  
fundamental e iónico**



**Mauricio Federico Erben**

**2005**



El presente trabajo, realizado en el Centro de Química Inorgánica CEQUINOR (CONICET-UNLP), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, bajo la dirección del Prof. Dr. Dr. Carlos Omar Della Védova, constituye la Tesis Doctoral que elevo a consideración de las autoridades correspondientes para optar al título de Doctor de la Facultad de Ciencias Exactas, Orientación Química.



*"Si mi compromiso es realmente con el hombre concreto,  
con la causa de su humanización, de su liberación,  
no puedo por ello mismo prescindir de la ciencia ni de la tecnología,  
con las cuales me vaya instrumentando para mejor luchar por esta causa".*

Paulo Freire

*a Yanina*

*a Federico y María Isabel*



## AGRADECIMIENTOS

*“...el futuro no es crónico  
por suerte no es crónico  
cuando menos se piensa está golpeando,  
cuando menos se piensa es una y media  
y flagrantemente cumplo mis dieciocho.”*

Mario Benedetti, El cumpleaños de Juan Angel.

Flagrantemente presento éste, mi trabajo de tesis doctoral. Estoy muy agradecido y en deuda con mucha gente que me ha ayudado a concretarlo. Por suerte existe este apartado donde expresar ese agradecimiento de una manera escrita, que; para que negarlo, supone cierta perennidad vedada a la palabra dicha.

Quiero agradecer en primer lugar al director de este trabajo, Prof. Dr. Dr. Carlos Omar Della Védova, por su permanente guía en la realización de esta tesis. Su fervor hacia el trabajo, aliento y empuje constantes han sido motores sin los cuales el trabajo que aquí presento no hubiese llegado a cristalizarse nunca. No puedo dejar de mencionar la confianza y libertad que me otorgó para realizar este trabajo de tesis. El inicio de las investigaciones utilizando radiación sincrotrón que aquí presento, un tema completamente nuevo en el grupo, contó con su aprobación, colaboración, aporte de ideas y entusiasmo desde el primer día, cuando la empresa no era más que un cúmulo de (dudosas) potencialidades.

En lo personal, la amistad construida a lo largo de estos cinco años de mates amargos, congresos, viajes y asados me honra.

Al Dr. Pedro Aymonino y al Dr. Enrique Baran, quienes posibilitaron el desarrollo de este trabajo de tesis doctoral en el Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR).

A la Dra. Rosana Romano por su ayuda constante, especialmente en los primeros pasos de la realización de esta tesis. También por las largas horas compartidas en los turnos de medida del sincrotrón, charlas varias y cafés mediante.

Durante el desarrollo de esta tesis se utilizó una variedad de técnicas experimentales de una sofisticación bastante elevada, asequibles mediante la cooperación con otros grupos de investigación, mayormente del extranjero. De esta manera, fue posible de realizar este trabajo únicamente con la ayuda de mucha gente a la cual estoy hondamente agradecido. Más allá de la reciprocidad que involucra el trabajo de cooperación científica, encontré en estas personas una disposición muy grande para dedicarme uno de sus recursos más importantes y escasos: tiempo. En orden cronológico debo mencionar a las siguientes personas:

-Dr. Osvaldo Sala (Universidad de San Pablo, San Pablo, Brasil) por las medidas de espectros Raman que realizamos allá por el año 2001 y su contagiosa pasión por la espectroscopia.

-Dr. Heinz Oberhammer (Universidad Tübingen, Tübingen, Alemania) por la hospitalidad mostrada en mis visitas a Tübingen, las explicaciones y discusiones mantenidas en relación con las medidas de difracción de electrones en fase gaseosa... y por las medidas.

-Dr. Helge Willner (Universidad Gerhard Mercator, Duisburg, Alemania) por haberme recibido en su laboratorio y por la confianza dispensada al poner a mi disposición la totalidad del equipamiento, material de laboratorio y reactivos, especialmente el equipo de infrarrojo de matrices a temperaturas criogénicas. La reincidencia de mis visitas a Duisburg (años 2002 y 2003) atestigua su generosidad (y capacidad de aguante!).

Asimismo agradezco inmensamente la ayuda brindada en el manejo del equipamiento a Stefan von Ashen, Stefan Balters y Mike Finze.

Las estadías en Alemania fueron experiencias muy gratas gracias a dos tipos fenomenales: Holger Pernice y Plácido García. Los momentos compartidos con ellos reafirman la hospitalidad característica de los hispanos y ponen en duda la supuesta frialdad atribuida a los teutones (la profusión de tragos bebidos en su compañía demuestra la inclinación definitiva de latinos, ibéricos y alemanes hacia las bebidas alcohólicas). Muchísimas gracias amigos por su ayuda en todos los problemas surgidos, ya sea en el trabajo como fuera del laboratorio.

-Dr. Roland Boese (Universidad Essen, Essen, Alemania) por la hospitalidad mostrada en mis visitas a Essen (inolvidable y honorífica fue la invitación a conocer su bar) y las discusiones relacionadas con las medidas de difracción de rayos X a bajas temperaturas... y por las medidas.



-Dr. Arnaldo Naves de Brito (Laboratorio Nacional de Luz Síncrotron, Campinas, Brasil) por su ayuda y generosidad desinteresada al poner a nuestra disposición todo el equipamiento necesario para las medidas realizadas en el sincrotrón. A todo su grupo de trabajo y al personal técnico de las líneas de luz TGM y SGM (Florian, Lucia, Pacheco, Paulo, Reinaldo, Gustavo, Ricardo). No tengo dudas que sin su ayuda nunca hubiésemos podido extraer un solo dato de esa “máquina infernal” instalada en Campinas.

-Agradezco también al Dr. Reinaldo Pis Diez (CEQUINOR) por los cálculos realizados y las discusiones relacionadas con el capítulo de FONF<sub>2</sub>.

Quiero agradecer a José Guilherme Lopez (Universidad de San Pablo), por su hospitalidad cada vez que debo ir a San Pablo (festejo de pentacampeonato brasilero incluido).

Al personal administrativo, técnico y de limpieza del CEQUINOR por todas las ayudas brindadas. A los compañeros de trabajo de la cátedra Química Inorgánica por el trabajo conllevado.

Estoy muy agradecido a todos los integrantes del grupo de trabajo (Guido, Norma, Sonia, Mauricia y Jorge) por los momentos compartidos, disposición y ayuda brindada. A los nuevos integrantes del grupo: Mariana, Laura, Yeny, Ximena, Isabel, Ana, Valeria y Lorena por su afecto.

Las siguientes instituciones sirvieron de apoyo económico tanto para la realización de este trabajo como para mi subsistencia durante su desarrollo:

-Facultad de Ciencias Exactas, en la que desarrollo mis tareas docentes.

-Universidad Nacional de La Plata a través de su Beca de Iniciación 2000-2001 (tan decisiva para todo lo que siguió).

-Consejo de Investigaciones Científicas y Técnicas mediante la beca de Formación Interna de Doctorado (2001-2005).

-Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica y el DAAD quienes mediante el programa de cooperación argentino-alemán, PROALAR hicieron posible los viajes a Alemania.

-Laboratorio Nacional de Luz Síncrotron mediante subsidios para la realización de medidas (horas luz) y el otorgamiento de ayudas para viajes y estadías durante las medidas.

-CONICET, ANPCYP, CICPBA, Fundación Antorchas, Volkswagen Foundation, que asistieron económicamente la realización del trabajo mediante el otorgamiento de subsidios.

La consecución de este trabajo requirió la dedicación de tiempo que en muchas oportunidades fue sustraído de aquel perteneciente a gente a la que quiero mucho. De aquí que deba agradecer muy especialmente la comprensión y paciencia de todos ellos:

-A Yanina (de quien estoy profundamente enamorado), por aguantar y sobrellevar mis ausencias. Por sus visitas a Alemania, por volar en avión. Por su amor y por soportar mis humores cambiantes (la “rabia simple del hombre silvestre” como dice Silvio), tengan o no que ver con esta tesis. Por estas y otras razones es que este trabajo está dedicado a ella.

-A mi familia sin cuyo amor es difícil imaginar la vida. A mis padres, seres excepcionales a quienes también está dedicada esta tesis. A mis hermanos Esteban y Juan Manuel, los quiero mucho. A toda mi familia de Chajarí y Villa del Rosario.

-A Tati, un amigo de fierro.

-A mis amigos de Chajarí que siempre están.

-A Ricardo y Guadalupe mis suegros (tengo que solucionar esta situación) y a la “familia marplatense” por su cariño. A Guadalupe por el esfuerzo en comprender mi trabajo y poder reflejarlo en su arte.

-A los compañeros del Centro de Estudiantes de la Facultad de Ciencias Exactas por su amistad y por la lucha compartida.

-A todos aquellos con quienes comparto el día a día en la facultad. Aunque paradójico, nombrarlos a todos implicaría olvidarme de alguno.

¡MUCHAS GRACIAS!

Mauricio, Marzo de 2005.

## **MOLÉCULAS ESTUDIADAS EN ESTE TRABAJO**

