



## Entrevista a María Dolores Alba (Científica Titular del CSIC en el Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla)

### “La Resonancia Magnética Nuclear de Sólido en Sevilla ha dado un salto cuantitativo en su proyección científica futura”

**Sevilla, 11/08/2010.** La Resonancia Magnética Nuclear (RMN) en estado sólido es actualmente una técnica esencial para el desarrollo de diversas líneas de investigación científica. La información que aporta esta herramienta permite, entre otros aspectos, el estudio de los materiales estructuralmente desordenados, al tiempo que ayuda a distinguir átomos con números atómicos similares.

Por ello, el conocimiento de la RMN y de los instrumentos aplicados resultan de gran interés para los futuros investigadores. De ahí que el Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla (ICMS) organice, en colaboración con el cicCartuja, un curso de posgrado para adentrar a 16 alumnos en este terreno. Las jornadas, que llevan el título “Determinación de Estructuras en Sólidos Reales: Técnica de Resonancia Magnética Nuclear”, se celebrarán entre el 13 y el 17 de septiembre y serán dirigidas por María Dolores Alba Carranza, científica del ICMS y experta en la RMN en estado sólido.

#### ¿Qué objetivos plantea esta actividad académica?

El objetivo fundamental es acercar a los alumnos de posgrado, doctorado y técnicos de Servicios Generales de Investigación a la Resonancia Magnética Nuclear en su aplicación al Estado Sólido, tanto desde un punto de vista teórico como práctico. Se verán cumplidos los objetivos si los alumnos al final del curso se encuentran preparados para interpretar los resultados obtenidos mediante esta técnica y decidir el tipo de experimento más apropiado para su investigación.

**El curso tiene una estructura que alterna las clases teóricas con la aplicación de las herramientas**



Además de ejercer la docencia en la Universidad de Sevilla, María Dolores Alba es responsable científica del Servicio de RMN del cicCartuja.

#### Perfil científico

Licenciada en Farmacia y Doctora en Química por la Universidad de Sevilla, María Dolores Alba Carranza obtuvo plaza de Científica Titular del CSIC en el Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla en el año 2000. Experta en el ámbito de la Química del Estado Sólido y en la aplicación de la Resonancia Magnética Nuclear, ha sido la encargada, junto a otros compañeros, de introducir esta técnica en el cicCartuja, donde es, precisamente, responsable científica del Servicio General de RMN en su Configuración de Estado Sólido.

Anteriormente, había desarrollado diversos proyectos de investigación en la Universidad de Sevilla, en el Macaulay Land Use Research Institute de Aberdeen, en la Universidad de Cambridge y en el ICMS. Entre 1995 y 1997 fue becaria postdoctoral dentro del Programa Capital Humano y Movilidad de la UE en la Universidad de Cambridge y la Universidad de Sevilla, y posteriormente, entre 1998 y 1999, ocupó plaza de Profesora Asociada en la Hispalense.

Sus actuales líneas de investigación giran especialmente en torno a la síntesis y reactividad de silicatos laminares para la eliminación de contaminantes, y la caracterización mediante difracción de rayos X y neutrones (espectroscopía MAS-NMR e Infrarroja).

**básicas para la RMN. ¿Cuáles son los conceptos básicos que van a manejar los asistentes al curso? ¿Qué instrumentos tendrán que utilizar?**

Los conceptos teóricos comienzan desde un nivel muy básico: en la primera mañana del curso se inicia a los alumnos en los fundamentos básicos de la Resonancia Magnética Nuclear. Para ello, se abordan los fundamentos físicos que ocurren en el núcleo de los átomos en presencia de un campo magnético externo, durante la excitación de los núcleos y durante la relajación (fenómenos comunes tanto a su aplicación al estado líquido como sólido).

A partir de la tarde del primer día se va adentrando a los alumnos en las particularidades de la técnica en su aplicación al estado sólido. Todas las clases están diseñadas de modo que al comienzo se dedica un tiempo a explicar los fenómenos físicos que se producen, a continuación los programas de pulsos más apropiados para extraer la información más adecuada y, finalmente, ejemplos reales de su aplicación.

A cada clase teórica le corresponde una clase de problema para la cual cada cuatro alumnos cuentan con un tutor que les ayuda a resolver las dudas generadas durante las clases de teoría y a resolver los problemas planteados.

Finalmente, hay dos sesiones prácticas en el equipo disponible en los Servicios Generales de cicCartuja, en el que se les enseña a los alumnos a variar los parámetros fundamentales necesarios para optimizar las medidas. Se adquieren espectros con programas de pulso simple y se les enseña las herramientas informáticas necesarias para procesar e interpretar los espectros. Para todo ello, se ha elegido a profesores con una gran trayectoria en la técnica, tanto locales

como de otros centros del CSIC en España o del CNRS en Francia.

**Para los no iniciados en esta materia, ¿podría explicar nos brevemente en qué consiste la RMN de estado sólido?**

Básicamente, los fenómenos físicos que rigen a la Resonancia Magnética Nuclear de Sólido son iguales a los que rige a la Resonancia Magnética Nuclear de Líquido, y es la degeneración de los niveles de energía de los núcleos con un *spin* nuclear distinto de cero en presencia de un campo magnético externo. Dicha diferencia de energía aporta información acerca del orden local alrededor del núcleo.

***“En la RMN de estado sólido se manifiestan interacciones magnéticas y eléctricas con el núcleo diferentes a las de los líquidos”***

La peculiaridad de la aplicación de esta técnica al estado sólido proviene únicamente del carácter anisotrópico de los sólidos, que hace que se manifiesten una serie de interacciones magnéticas y eléctricas con el núcleo que no se ponen de manifiesto en los líquidos, debido a su carácter isotrópico.

Dichas interacciones dificultan la adquisición de las medidas y la interpretación de las mismas, al mismo tiempo que enriquecen la información estructural que se puede extraer de los espectros. Todo ello demanda el desarrollo de una tecnología y una metodología muy sofisticada.

**¿Qué retos se plantea a corto plazo la Resonancia Magnética Nuclear de estado sólido a nivel técnico o instrumental?**

En la actualidad, el instrumental del que disponemos (un imán de 400 MHz de líquido adaptado a sólidos) sólo permite obtener espectros sencillos de los denominados sólidos blandos y básicamente se puede extraer poca información de los núcleos cuadrupolares (núcleos

con *spin* nuclear mayor de 1/2), los cuales suponen más de 2/3 de los elementos de la tabla periódica.

Por tanto, el reto más inmediato, y merced a financiación de los fondos FEDER, es poner en funcionamiento en los Servicios Generales de Investigación de la Universidad de Sevilla (CITIUS) un equipo dotado de un imán de sólido de 600 MHz (el imán de sólido de mayor campo actualmente en España) y de un conjunto de sondas que permitirán un gran avance en el desarrollo metodológico de la técnica y abordar prácticamente todos los problemas que demanden los usuarios.

**Como científica del ICMS ha desarrollado nuevos métodos y técnicas en la investigación de la RMN de estado sólido. ¿Qué balance haría de su trayectoria como responsable del servicio general de RMN en el cicCartuja?**

La evaluación de mi trayectoria como responsable del servicio general de RMN en el cicCartuja, desde su creación en 1997 hasta la actualidad, la dividiría en dos grandes apartados:

a) A nivel docente: el servicio siempre ha estado abierto a la formación de usuarios y merced a cursos de doctorados y de Máster continuados desde 1997, el curso de posgrado desde 2007, un escuela internacional en 2008 y cursos particulares diseñados a investigadores especializados, se han formado en la técnica

***“Desde 1997, el Servicio de RMN del cicCartuja ha formado en esta técnica a varias promociones de estudiantes”***

varias promociones de estudiantes de doctorado y postgrado.

b) A nivel de investigación: el servicio no se ha dedicado únicamente a la obtención de medidas, sino que en las normas que rige el servicio se contemplan unas horas de reserva para el desa-

## Contenidos del curso “Determinación de Estructuras en Sólidos Reales”



Las jornadas contarán con sesiones prácticas, en las que se emplearán los equipos de espectroscopia del cicCartuja, así como los programas informáticos apropiados.

Repartidas en clases teóricas y prácticas, estas jornadas contarán con un total de 15 horas académicas, en las que se intentará aportar a los alumnos los conocimientos básicos para el estudio de los sólidos reales, a través de una técnica que informa acerca del orden local de los átomos de la red.

Por ello, a comienzo del curso se realizará una breve introducción teórica de los sólidos reales, resaltando los aspectos estructurales que demandan el empleo de técnicas instrumentales que ofrezcan información a corto alcance.

Iguamente, se abordarán los principios básicos en los que se basa la RMN, que irán acompañados de una serie de problemas. Por último, se plantearán las dificultades mostradas por esta técnica en su aplicación al estado sólido en función de la naturaleza del núcleo a estudiar.

Las sesiones prácticas incluirán el uso del equipo disponible en el cicCartuja, con el fin de resolver casos sencillos.

rollo de nuevas metodologías. Las metodologías desarrolladas en el seno del servicio han sido publicadas en revistas de alto índice de impacto del SCI (como, por ejemplo, *Chemical Communication*, *Inorganic Chemistry Journal* *Physical Chemistry*...) y se incluyen en libros de texto escritos por otros autores.

Asimismo, se empleará el paquete informático apropiado para el procesado y tratamiento matemático de los espectros.

Con el objetivo de hacer más cercanas estas clases, los 16 alumnos matriculados en el curso se dividirán en cuatro grupos, a cuyo frente se situará un tutor, que les guiará en la resolución de problemas y con el que se mantendrán sesiones de debates para aclarar las dudas que puedan surgir.

Entre los profesores que impartirán las clases teóricas, precedentes tanto de centros del CSIC como del CNRS francés, se encuentran los doctores Laurence Delevoye, Ana Isabel Becerro, Alberto Escudero, Teresa Blasco, Pedro Nieto, Miguel A. Castro, Esperanza Pavón, Juan I. Corredor, Jesús Sanz, Marco Mantovani, Pablo Chain y la propia directora del curso, María Dolores Alba.

Como profesor de prácticas figura Miguel Ángel Avilés, responsable del personal técnico del Servicio de RMN del cicCartuja.

Ambos hechos han repercutido, de una parte, en un aumento considerable del número de usuarios (internos y externos) de la técnica y, por otra, en el apoyo de los fondos FEDER para que la Resonancia Magnética Nuclear de Sólido en Sevilla de un salto cuantitativo en cuanto a su proyección científica futura. ●