

固体核磁共振研究进展—邓风研究员及其团队专访

《物理化学学报》编辑部

北京大学化学与分子工程学院, 北京 100871

Interview with Professor Feng Deng and His Research Team on the Solid-State NMR Research

Editorial Office of *Acta Physico-Chimica Sinica*

College of Chemistry and Molecular Engineering, Peking University, Beijing 100871, P. R. China.

Email: whxb@pku.edu.cn.

Published online: November 11, 2019.

与 X 射线衍射相比, 固体核磁共振(NMR)作为一种重要的谱学技术, 它对体系中的近程有序变化更为敏感, 非常适合用于研究各类非晶固体材料的微观结构和动力学行为, 能够提供原子分子水平的结构信息。固体 NMR 已被广泛应用于多相催化、聚合物、玻璃、锂电池、纳米材料、药物和膜蛋白等诸多研究领域。近年来, 随着高场 NMR 谱仪(800 MHz 及以上)和超高速(60 kHz 及以上)魔角旋转探头的应用以及各类先进一维、二维脉冲实验技术和超极化技术的研发, 极大地促进了固体 NMR 方法学的发展及其应用范围的拓展。

我们荣幸采访了固体核磁共振专家, 《物理化学学报》“固体核磁共振”特刊的客座编辑邓风研究员, 为我们分享他的固体核磁共振研究经历及对固体核磁共振的现状和发展趋势的看法。

问题1: 邓风研究员, 在您的科研生涯中从事过哪些方面的研究? 您从什么时候开始从事固体核磁共振方面的研究?

回答: 我从1988年到中国科学院武汉物理与数学研究所读研究生开始就一直从事固体核磁共振方面的研究工作, 并于1992年开始专注于以沸石分子筛为代表的固体酸催化剂的结构与性能的固体 NMR 研究。

问题2: 请介绍一下您的课题组在固体核磁共振领域取得的主要成果?

回答: 我的课题组一直从事固体酸催化剂(包括沸石分子筛、金属氧化物、杂多酸等)的微观结构和反应机理的固体 NMR 研究。这一类催化剂由于具有环境友好、产物选择性高和易分离等优点而被广泛应用于石油化工和化学工业的各种催化过程。研究固体酸催化剂的结构与性能关系对于现有催化剂的改性以及新型高效催化剂的研发都具有

重要的意义。在这些年的研究工作中, 我们一方面致力于相关固体 NMR 表征技术的发展, 另一方面致力于用所发展的技术来解决固体酸催化中的一些关键科学问题。主要成果包括: 发展了固体酸催化剂酸强度定量测量的 NMR 方法、活性中心协同作用表征的二维和双共振 NMR 方法、主客体相互作用表征的二维和双共振 NMR 方法以及催化反应机理表征的原位 NMR 方法等, 并用这些方法研究了在固体酸催化剂上有机小分子(低碳烷烃、CO、甲醇等)的活化与转化机制, 阐明了催化剂的构效关系。

问题3: 请您简单回顾一下固体核磁共振领域最近几年的重要进展?

回答: 近年来, 由于高场固体 NMR 谱仪的逐渐普及, 再加上固体 NMR 脉冲方法的发展, 使得固体催化剂中一些低本征灵敏度、低含量的金属活性中心(如 Zn、Mo、Ga、Sn 等)的观测成为可能, 在

此基础上还可以进一步研究金属活性中心与其它活性中心的相互作用和协同效应。另外,动态核极化(Dynamic Nuclear Polarization, DNP)是一种电子核的双共振超极化技术,近年来由于高场DNP技术的发展,能使NMR的灵敏度得到2-3个量级的提高,该新技术在功能材料、多相催化和结构生物学等领域都展现出很好的应用前景。

问题4: 目前我国固体核磁共振研究在国际上处于什么水平?

回答: 目前我国的固体NMR研究领域正处于明显的上升繁荣时期,研究水平也有了长足的进步,尤其在多相催化研究中的固体NMR方法发展、应用研究的水平以及关键科学问题的解决能力等方面已经达到国际先进水平,部分处于国际领先水平。近年来,一批中青年学者在纳米材料、电池材料和膜蛋白等领域的固体NMR研究中都做出了一系列出色工作,在国际上逐步崭露头角。但在总体研究能力上与国际领先实验室相比仍有一定差距,这主要是受限于我国固体NMR的谱仪数量、设备水平、研究队伍规模以及研究工作积累等方面。

问题5: 固体核磁共振领域有迫切需要突破的卡脖子技术吗?

回答: 目前固体核磁共振领域需要突破的卡脖子技术主要是魔角旋转(MAS)探头技术,能进行高速旋转、大范围变温、实时/原位观测的MAS探头技术是开展各种固体NMR研究的必备核心技术,一直被国外所垄断。可喜的是最近中国科学院武汉

物理与数学研究所的研究团队自主研发了4 mm MAS探头,转速达到14 kHz,为下一步独立研发固体NMR谱仪奠定了坚实的基础。

问题6: 您可否预测一下固体核磁共振的发展趋势?

回答: 随着磁体技术的发展,美国国家强磁场实验室已研制出超高场NMR系统(1.5 GHz),商业化的1.2 GHz NMR谱仪也将不久会投入使用,这将极大提高NMR的检测灵敏度和分辨率,为固体NMR在材料科学和结构生物学的应用提供新机遇。近年来,超极化NMR技术的发展为大幅提高核磁共振信号的检测灵敏度提供了可能。除了DNP技术能够使NMR信号的检测灵敏度提高2-3个数量级,仲氢诱导核极化(Para-Hydrogen Induced Polarization, PHIP)技术也能够实现2-4个数量级的NMR信号增强,这些超极化技术将为表/界面的结构、相互作用和反应机理的研究提供新手段。另外,发展在原位和“工作状态”下的固体NMR实时表征技术也是将来发展的重要方向。

问题7: 您对准备从事固体核磁共振研究的青年学者有何建议?

回答: 青年学者应该敢为人先,积极去尝试和开展一些别人没有做过的课题,拓宽固体NMR的应用范畴。一旦选定自己感兴趣的方向或课题,应该保持定力,持之以恒、坚持不懈,把它做到极致,成为国际上的引领者。在这个过程中,既要重视科学问题的研究,又要注重固体NMR方法学的发展,二者的紧密结合,将支撑高水平的科学研究。



邓风,中国科学院武汉物理与数学研究所研究员、博士生导师,波谱与原子分子物理国家重点实验主任。

1988年获四川大学物理化学专业学士学位,分别于1991和1996年获中国科学院武汉物理与数学研究所无线电物理(核磁共振)专业硕士和博士学位,1997-1998年美国Texas A & M大学化学系博士后。1999年任中国科学院武汉物理与数学研究所研究员。

长期从事固体核磁共振方法学及其在多相催化和材料化学中的应用研究。在*Chem. Rev.*、*Acc. Chem. Res.*、*J. Am. Chem. Soc.*、*Angew. Chem. Int. Ed.*、*Nat. Commun.*、*Chem. Sci.*、*J. Phys. Chem.*、*J. Chem. Phys.*、*ACS Catal.*、*J. Catal.*、*J. Magn. Reson.*、*Solid State Nucl. Magn. Reson.*等刊物上发表SCI论文300余篇,被SCI论文他引10000余次。

2000年获“王天眷波谱学奖”,2004年获国家杰出青年基金(物理化学)资助,2009年入选“新世纪百千万人才工程”国家级人选。中国物理学会波谱专业委员会、中国化学会催化专业委员会、中国化学会分子筛专业委员会、中国化学会物理化学专业委员会委员, *Solid State Nuclear Magnetic Resonance*、《物理化学学报》、《波谱学杂志》和《科学通报》等期刊编委。