
开发高效固体核磁共振脉冲技术

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/16138.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

开发高效固体核磁共振脉冲技术。近日，中科院大连化学物理研究所研究员侯广进团队开发出一种高效且适用性广泛的固体核磁共振脉冲技术——相位调制转动共振（PMRR），可用于核间距离的精准测量，团队利用该技术精准测量了三甲氧膦（TMPO）在H—ZSM—5分子筛Brønsted酸位上的吸附结构。相关研究成果发表于《化学科学》。

在现代固体核磁共振谱学中，通过魔角旋转技术能够减小甚至消除核自旋相互作用的各向异性，从而获得高分辨的固体核磁共振谱图。然而，这些被消除的各向异性自旋相互作用往往包含丰富的结构和动力学信息。为了在魔角旋转条件下重新获得这些结构信息，通常需要施加特殊的脉冲序列来激发与选择核自旋相干路径，选择性地获取与结构相关的核自旋相互作用信息。因此，重耦脉冲序列的设计在固体核磁共振结构测量中至关重要。对不同种类原子核（以下简称异核）核间距测量而言，虽然目前已存在一系列可用的脉冲序列，但大都在效率、选择性和稳定性上难以做到兼顾，故而在使用中存在诸多限制。因此，发展高效、稳定及高选择性的脉冲序列用于测量异核核间距，对于在复杂样品和仪器条件下实现精准结构探测具有重要意义。

侯广进团队基于对称性序列原理和转动共振方法开发的PMRR脉冲序列，具有高效率、高选择性和高稳定性的特点。PMRR脉冲序列能够选择性地测量 $1/2$ —自旋核与其他核的核间距，并排除同核偶极耦合的干扰，因此能够用于复杂样品中。在开窗修饰后，PMRR的射频场强度可在较宽的范围内调节，以适应从慢速到超快魔角旋转条件。同时，相比于其他方法，PMRR对硬件条件具有更强的适应性和更高的稳定性，对固体核磁探头的射频场不均匀性以及载波频率偏置不敏感。除了测量核间距以外，PMRR还可用于测量键角，以及作为基础脉冲序列，发展信号增强技术等新方法，获得更丰富的结构与动力学信息。

研究中，团队将PMRR方法用于测量TMPO吸附在H—ZSM—5分子筛Brønsted酸位上时的 1H — 31P 核间距。TMPO上甲基的 1H — 1H 偶极耦合对Brønsted酸与TMPO之间的 1H — 31P 核间距测量存在干扰，而PMRR能够有效地抑制 1H — 1H 耦合的干扰，准确测得 1H — 31P 核间距。核间距测量结果显示，在文献报道的超强酸位点中，Brønsted酸的 1H 与TMPO的 31P 核间距长于TMPO在其他酸位点上吸附时的 1H — 31P 核间距。水吸附实验进一步说明超强酸位点上TMPO的吸附同时受到了Brønsted酸和Lewis酸的作用，使得 1H — 31P 核间距被拉长。（来源：中国科学报卜叶）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1039/D1SC03194E>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。

作者：侯广进等 来源：《化学科学》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发