

# 中国药科大学 500 兆核磁共振波谱仪机柜和探头的国产替代开发及应用

宋喆<sup>1</sup>, 沈文斌<sup>1</sup>, 刘剑锋<sup>2</sup>

(1.中国药科大学分析测试中心, 江苏南京 211122; 2. 中国药科大学实验室与设备管理处, 江苏南京 211122)

**摘要:** 中国药科大学分析测试中心与武汉中科牛津波谱技术有限公司合作, 经过 5 年的长期摸索和不断改进, 打造出合格的国产 500 兆核磁共振仪机柜和核磁专用设备探头, 有效地改变了国内高场核磁共振波谱仪机柜升级长期依赖进口的情况, 为国产大型特种仪器设备的研发提供了宝贵实例。

**关键词:** 国产核磁机柜; 国产核磁探头; 国产大仪替代; 国产仪器验证

中图分类号: T

文献标识码: B

## Domestic substitution and development nuclear magnetic cabinet and nuclear magnetic probe of the 500 MHz NMR Installed at CPU, and the application

Song Zhe<sup>1</sup>, SHEN Wenbin<sup>1</sup>, LIU Jianfeng<sup>2</sup>

( 1.China Pharmaceutical University Center for Analysis and Testing, Nanjing 211122, China ; 2.China Pharmaceutical University Laboratory and Equipment Management Office, Nanjing 211122, China )

**Abstract :** China Pharmaceutical University Center for Analysis and Testing and Q.One Instruments Ltd. have been cooperated in 2014 to 2019. After long-term exploration and product upgrades of domestic nuclear magnetic resonance spectrometer software and hardware, 500MHz NMR magnetic cabinet and nuclear magnetic probe produced that meet the requirements. Effectively changing the situation where the upgrade of high field NMR cabinets can only be completed by foreign manufacturer. We have provided valuable examples for the research and development of domestically produced instruments and equipment.

**Keywords:** Domestic NMR cabinet, Domestic NMR probe, Domestic instrument replacement, Domestic instrument verificatio

## 1 设备更新历程简介

中国药科大学分析测试中心原有一台瑞士产 Bruker-AV-500 型核磁共振波谱仪，2001 购进，从 2010 年开始故障不断，至 2013 年已不能正常使用，经原厂工程师检查后，判断属于机柜中电路板老化引起的不可修复的故障，建议更新机柜。经招标，在 2014 年更换了武汉中科牛津波谱技术有限公司生产的国产机柜（中科牛津第一代原型机，中标价 50 万，bruker 原厂机柜更新报价 120 万），在 2021 年又更新了武汉中科牛津波谱技术有限公司生产的国产探头。

## 2 研发特点

### 2.1 打破国外核磁共振仪器的垄断

核磁共振仪广泛引用于有机物的结构分析，长期以来被瑞士 Bruker、日本电子的产品所垄断。武汉中科牛津波谱技术有限公司是由中国科学院武汉物理与数学研究所控股的我国唯一能提供高场超导核磁共振波谱仪商品化服务的高新技术企业。在研究所核心技术的基础上，引进世界先进的英国牛津仪器超导磁体技术，生产出我国完整的具有自主知识产权的核磁共振波谱仪，有效地改变了国内高场核磁共振仪器长期依赖进口的现状。

### 2.2 参与研发周期长

中国药科大学分析测试中心是最早接受国产核磁仪机柜升级应用的高校实验室之一，见证了国产核磁共振仪器厂商的成长历程，目前我校已有 300 兆和 500 兆两台核磁共振波谱仪接受了国产机柜的升级改造。其中分析测试中心 2014 年引进武汉中科牛津第一代国产 500 兆机柜，在后来长达 5 年不断的应用磨合中，因机柜的很多硬件和软件问题，仪器一直在调整核心零部件更替，不断提高国产化率，我们根据使用中出现的問題，提出了若干应用要求方案，在与厂家共同合作和努力下，解决了机柜体积缩小、内置功放性能下降、前置功放接头不稳定、机柜接地降阻、软件锁场定位的方法改变，机柜整体检测降噪，探头国产化等一系列问题。经过不断地应用验证，更换了增强的信号接收电子器件以及全新设计的前置放大器，扩展了数字锁场及温度控制能力，又陆续更新了两代国产机柜，最后在 2019 年验收的是定型的第三代国产机柜 Qone-Quantum-I-Plus，和第一代国产机柜相比，体积又缩小了三分之一，比原厂机柜体积更是缩小了一倍，国产化率达到了 95% 以上。



原厂 Bruker AV-500 机柜 第一代国产机柜 第二代国产机柜 第三代国产机柜

## 2.3 技术指标稳定

近 4 年来仪器运行正常，性能逐渐稳定，主要技术指标与原厂同级别仪器指标水平接近，没有太大变化，基本满足教学、科研需要。

## 2.4 样品来源复杂

因该仪器属于分析测试中心管理，实验室对校内校外用户均提供测试服务，学校各个课题组及校外厂家都会提供不同性质的样品，涉及单一成分药物，药品辅料，小分子蛋白等各种多样化的检品，用该仪器均能测出比较好的结果。

## 2.5 仪器技术功能强

可开展 1.  $^1\text{H}$ 、 $^{13}\text{C}$ 、 $^{15}\text{N}$ 、 $^{19}\text{F}$ 、 $^{31}\text{P}$  等常规一维核磁测试；2. DEPT（45、90、135）、APT、NOE 等高阶一维核磁测试；3. COSY、HSQC、HMBC、NOESY、DOSY 等二维核磁测试。

## 2.6 应用范围广

该仪器主要用分子结构解析、分子间相互作用研究、分子动力学研究、复杂混合物成分分析、定量核磁分析等等。

## 2.7 工作成绩显著

2019 年验收完毕后，平均每年工作机时在 2000 小时以上，检测样品数量在 10000 个以上，分测中心安排专人定期维护保养，节假日也饱和工作，在校内大型仪器应用指标统计中均名列前茅，创收金额每年均在 100 万元左右，为学校教学、科研提供了巨大助力、在每年全校大仪考核评比中，均获得一等或二等奖。

## 3 国产替代应用市场巨大

面对目前日益紧张的国际局势，我国面临着严峻的高端仪器卡脖子的问题，高端仪器的国产化是一个非常重要的发展方向。中国的高端仪器严重依赖进口，加强国产科学仪器科技自立自强尤为重要。习近平总书记指出，要打好科技仪器设备、操作系统和基础软件国产化攻坚战，鼓励高校同企业开展联合攻关，提升国产化替代水平和应用规模，争取早

日实现用我国自主的研究平台、仪器设备来解决重大基础研究问题。中国每年有许多核磁共振仪的机柜会到达服务年限（10~15 年），磁体寿命一般在 50 年，大都保存良好，只是机柜出现问题需要更换（常见故障为电路板老化），整机报废太浪费，如果国产升级机柜能替代进口的机柜，则是一个巨大的应用市场，对促进和发展我国磁共振技术，推动核磁共振仪国产化也是一个非常好的契机。

中国仪器仪表杂志