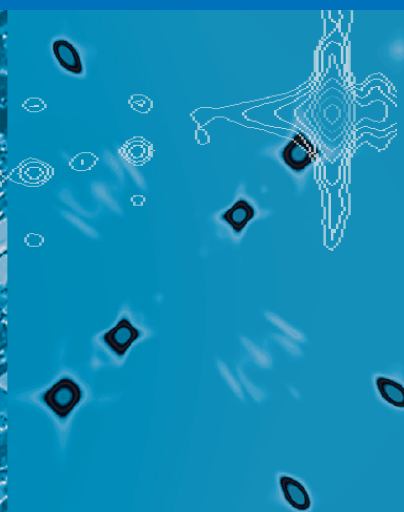
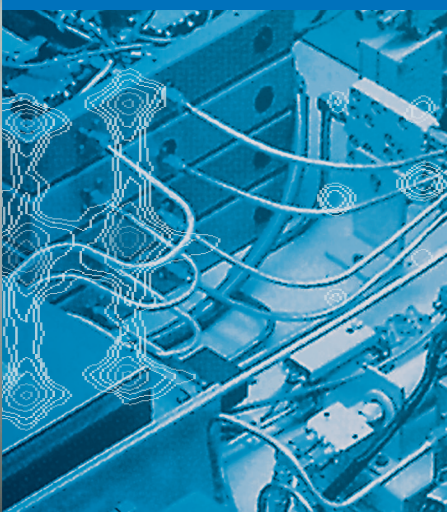
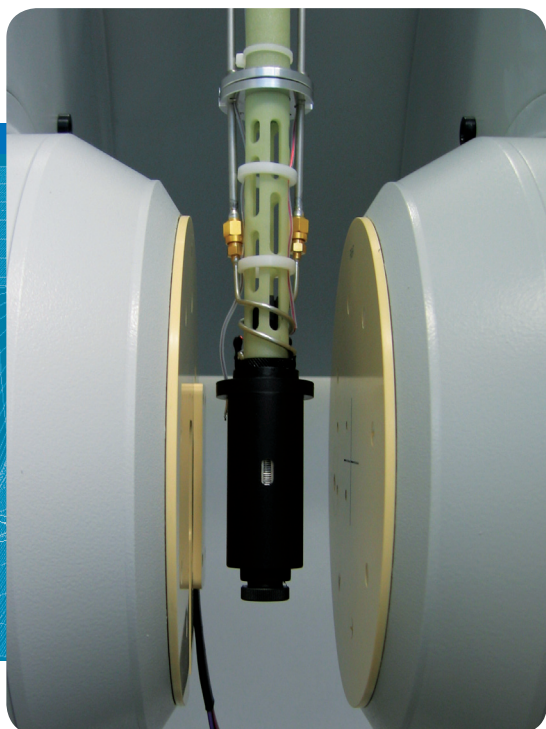




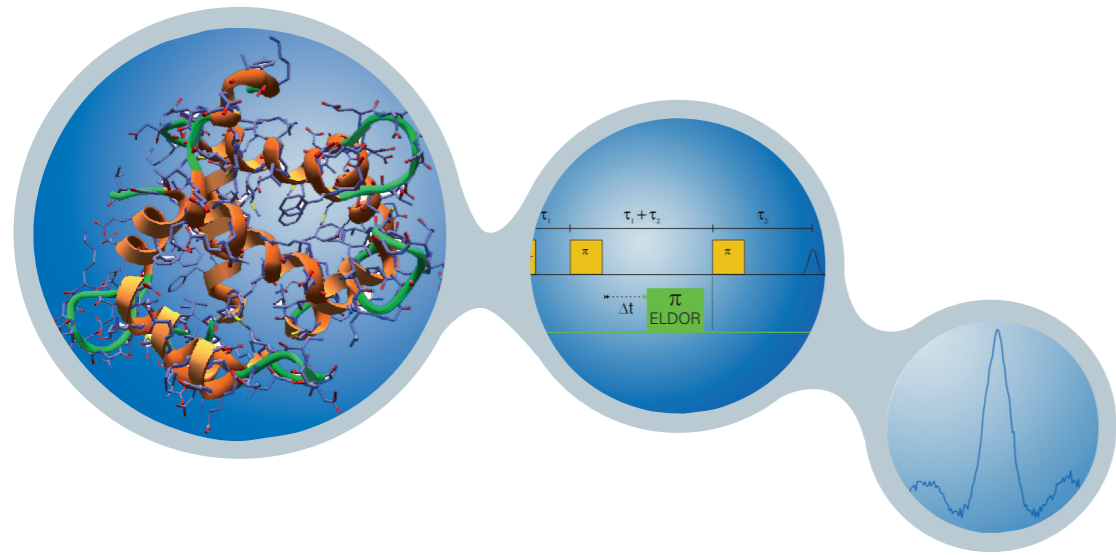
布鲁克 BioSpin



# ELEXSYS E 580

- 应用于生命科学、材料科学和量子计算领域的旗舰 EPR 系统

# E 580 FT/CW EPR 波谱仪



ELEXSYS™ E 580，旗舰 EPR 波谱仪，应用于生命科学、材料科学和量子计算领域中的电子自旋回波波谱、ESEEM、二维波谱、脉冲-ENDOR、脉冲-ELDOR (DEER)、瞬态 EPR 和多频 EPR。

# 微波桥 & 中频

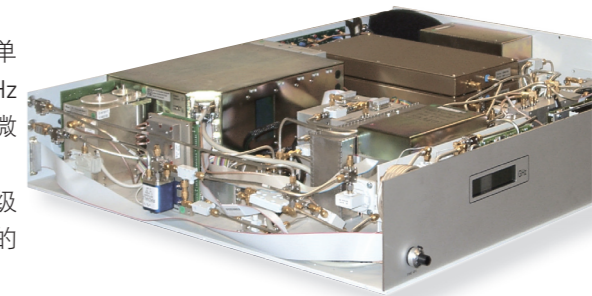
微波桥是脉冲 EPR 波谱仪的核心。从脉冲整形到信号放大，SuperX-FT/CW 微波桥都展现出了无与伦比的多功能和高性能。模块化设计保证了研究型仪器所需的灵活性。

## SuperX-FT

- 连续波和脉冲运行
- 用于脉冲整形的 SPFU
- 低功率脉冲监测仪 (TM)
- 高功率脉冲监测仪 (RM)
- 正交检波：48 dB 增益，1 GHz 带宽

## ELDOR 单元 (可选)

对于电子-电子双共振实验，ELDOR 单元 (E 580-400) 可额外产生一个 800 MHz 范围的微波激发频率，这适用于所有的微波波段 (L、S、X、Q 和 W)。相干 ELDOR 附件是 ELDOR 单元的升级款，可产生检测系统和 ELDOR 源之间的相位相干。



SuperX-FT 微波桥

## MPFU (可选)

MPFU 可允许设置脉冲相位和振幅。借助它可进行结合了软硬脉冲的实验或具有任意相位关系的复合脉冲实验。最多可额外加入 4 个微波通道。

## 低功耗连续波检测 (可选)

借助 LCW 路径，有可能生成用于连续波检测饱和和恢复实验或相干拉曼拍频实验所需的硬脉冲、低功率连续波激发序列。数字 DC-AFC 提供了这些实验所需的长时间稳定性。

## 中频 (IF) 路径 (可选)

对于不同频段 (L、S、Q 和 W) 的 EPR，IF 路径用于将 X 波段频率 (激发和检测) 导入或导出到附加频段。X 波段微波桥的所有功能在新的运行频率下得到了保留。

布鲁克在 1987 年发布了 ESP 380 CW/FT EPR 波谱仪，自此布鲁克开启了商用脉冲-EPR 的时代。第二代系统 ELEXSYS™ E 580 在灵敏度方面取得了重要突破。为满足脉冲-EPR 的需求，布鲁克开发了数字单元 PatternJet™ 和 SpecJet™，首次实现对样品 T<sub>1</sub> 极限内的 FID 和回波进行平均化，同时消除了之前平均化上的耗时瓶颈。在过去的 20 年中，布鲁克不断将基础的 X 波段波谱仪向多频应用上扩展。基于布鲁克的中频 (IF) 概念，从 L 波段到 W 波段的全范围 EPR 频率现在都可用于脉冲 EPR 波谱学。

脉冲-ENDOR 和脉冲-ELDOR (DEER) 多共振附件充实了多频平台。我们多年来持续不断开发，如今打造出第二代 E 580 系列旗舰产品，其独特之处在于集成了 PatternJet-II 和 SpecJet-II，且两者时钟频率都达到了 1 GHz。E 580 除已具备脉冲-EPR 领域内无与伦比的性能外，还兼具 E 500 连续波-EPR 波谱仪的全部功能。



## 标准脉冲成形单元 (SPFU)

- 四个独立的脉冲通道：+X、+Y、-X 和 -Y。
- 每个通道中可编程脉冲的位置和长度
- 通道内脉冲为同一相位和振幅
- 不同通道脉冲之间的延时、甚至交叉和重叠不受限制



# 探头和低温实验



Flexline 脉冲-ENDOR  
谐振腔 EN 4118X-MD4

谐振腔是波谱仪的中心部件。它必须提供高微波场强来生成短脉冲，并且在很大程度上决定着系统的灵敏度。借助 Flexline™ 系列的介质和分裂环谐振腔，布鲁克可提供集高性能和易用性于一体的通用探头和专用探头。

ER 4118X-MD5 通用探头可容纳超大体积样品，因此在样品量不限时具有最高的灵敏度。Flexline 分裂环系列 探头专为瞬态实验的高时间分辨率和为在 ELDOR 实验中最低 Q 值时产生最高  $B_1$  场而设计。2 mm 分裂环谐振腔为点样品提供了最高的灵敏度。



液氮低温恒温器 ER 4118CF

## ER 4118X-MD5 Flexline 通用探头

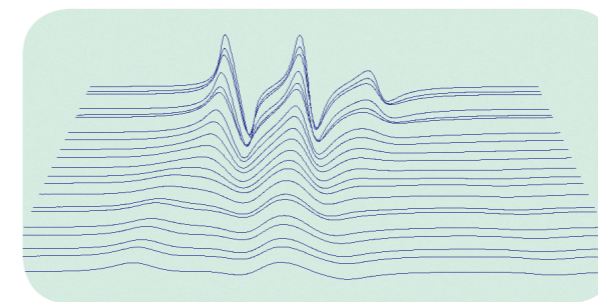
- 从 5000 到 20 的可变 Q 值
- 尺寸达 5 mm 的样品管
- 高达 255  $\mu$ l 的样品体积
- 低 Q 时的高  $B_1$
- 死时间短
- CW-EPR (临界耦合、调制线圈)
- 2 - 300 K 的可变温度
- 快速换样
- 易于操作
- 可选脉冲-ENDOR 版本
- 可选光学窗口

## Flexline 分裂环系列 ER4118X-MS

- 瞬态 EPR、饱和恢复 EPR 和 ELDOR 专用探头
- 具有 5 mm、3 mm 和 2 mm 等不同尺寸的样品入口
- 高达 1 GHz 的带宽 (Q = 10)
- 极低 Q 时的极高  $B_1$
- 临界耦合下的高时间分辨率

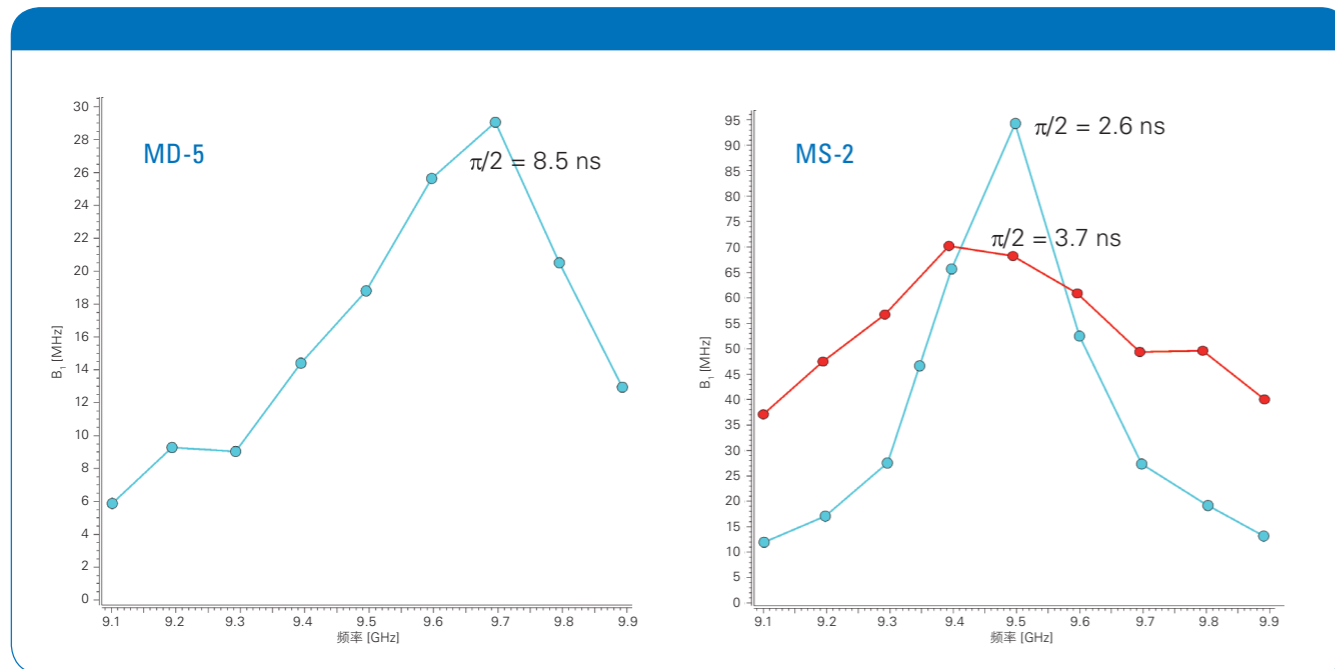
## 与氮气或氦气温度控制系统兼容的 Flexline 低温恒温器

- ER 4118CF, 可变温度为 2 - 300 K
- ER 4118CV, 可变温度为 100 - 300 K



## 低温实验

样品温度是许多 EPR 实验的一个关键参数。它用于研究样品某个特定性质的温度依赖性，或用于建立所需的样品条件。



高  $B_1$  和大带宽：在不同耦合强度（1 kW 行波管）下的 Flexline 带宽和  $B_1$

# PatternJet™ 和 SpecJet™

脉冲 EPR 的匹配激发和检测：PatternJet-II 可为脉冲的宽度、定位和演化提供高达 1 ns 的高时间分辨率。SpecJet-II 可提供 1 ns 时间分辨率的高速采集和板载数字信号处理。

PatternJet-II 脉冲编程器持续为 EPR 群体提供着其所需的灵活性和精确性，以应对脉冲 EPR 领域日新月异的变化。对于高质量脉冲 EPR 波谱研究来说，高速演化、快速重复和精确定位三者缺一不可。

## 提升性能

借助 PatternJet-II，可减少对需相循环和/或多维时间演化实验的时间消耗，例如，无需任何重编程序即可完成需 4 步相循环的 256 x 256 点 HYSORE 实验。

## 扩展可能

PatternJet-II 的特点是它的每个脉冲通道上都配有扩展存储器，从而扩展了实验可能性，例如，一个含有 512 个脉冲的脉冲序列可以使用多达 1024 个不同的时间演化。

### PatternJet-II

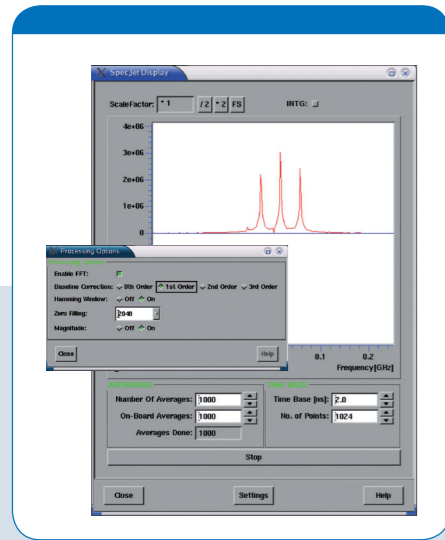
- 与脉宽无关的 1 ns 或 2 ns 分辨率
- 动态范围为  $10^9$
- 无需重新加载的多维时间演化
- 相邻激发无延时的脉冲演化
- 激发和循环之间的间隔时间为零
- 任意数量的脉冲皆有相同的边缘位置分辨率

## 实时优化

每秒高达  $10^6$  个信号的高速采集使得在实验执行前即可进行空前水平的信号优化。SpecJet-II 上添加的板载数字信号处理 (DSP) 可通过时域信号的实时傅里叶变换，将该优化扩展到频域。

## 匹配分辨率

借助 1 ns 的最大检测分辨率，SpecJet-II 可为具有 1 ns 激发分辨率的 PatternJet-II 提供相匹配的分辨率。该匹配可激发和检测高达 1 GHz 的信号。



SpecJet-II 实时快速傅里叶变换 (FFT) 显示

### SpecJet-II

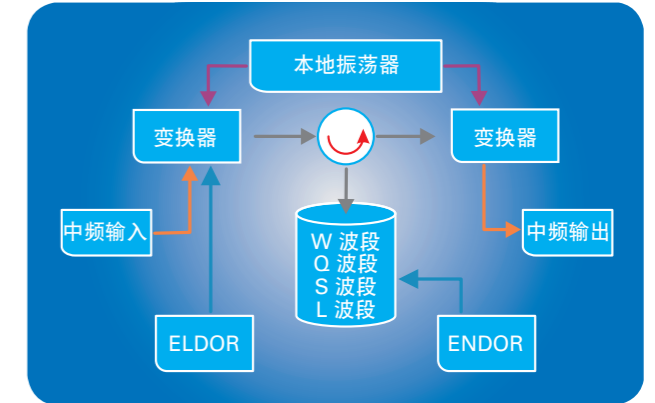
- 实时傅里叶变换或时间显示
- 高达 65,536 板载平均
- 从 1 ns 到 10 ms 的可变时基
- 从 32 个到 65,536 个点的记录长度
- 每秒高达 100 万次瞬态检测
- 内部触发、外部触发和电平触发
- 1 GHz 8 位数字转换器

# 多频

虽然传统的 EPR 实验多是在 X 波段 (9-10 GHz) 上进行的，但在高于或低于此基础微波频率上进行 EPR 实验有几个优点。借助布鲁克的中频概念，脉冲 EPR 可从 X 波段扩展到所有其它常见的 EPR 频段。

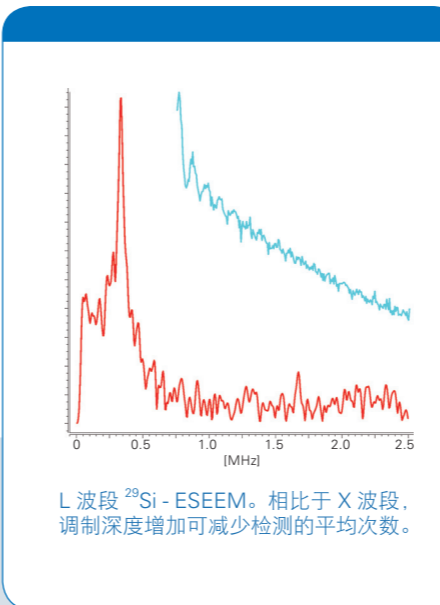
## 中频 (IF)

中频概念可将 SuperX-FT 微波桥激发和检测的高品质和高性能，从 X 波段频率迁移到所需的运行频率。SuperX-FT 微波桥的所有功能在新的微波频率下都得到了保留。



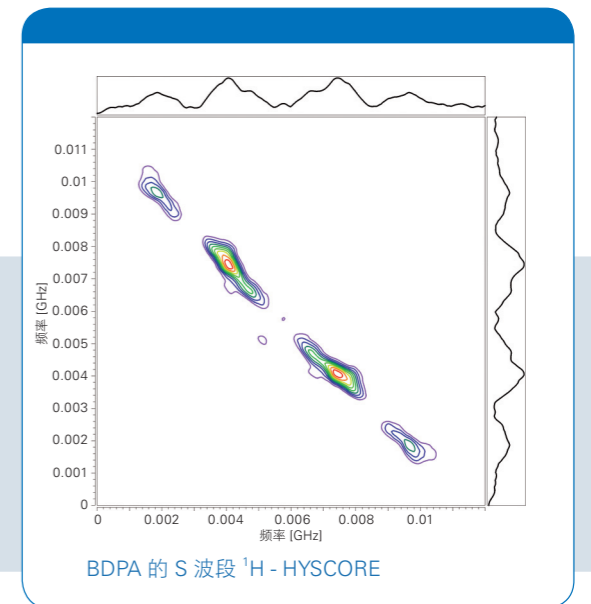
### SuperL-FT (L 波段)

- 对含水样品有最高的穿透深度
- 最深的 ESEEM 调制深度
- 可容纳大型样品 (例如小动物)。



### SuperS-FT (S 波段)

- ESEEM 实验中的调制深度增加
- 损耗样品穿透率增强
- 超精细分辨率提高
- g 因子分散性减弱



SuperL-FT 和 SuperS-FT 微波桥可作为 SuperX-FT 微波桥形成多波段系统的升级模块。可配置样品入口尺寸为 5 mm 的 Flexline 变温探头。

# SuperQ-FT

Q 波段是脉冲和连续波 EPR 中使用率仅次于 X 波段的频段。提高 ENDOR、ESEEM 和 HSCORE 实验中的 g 值分辨率和核频率分辨率对结构测定有极大益处。

## Q 波段

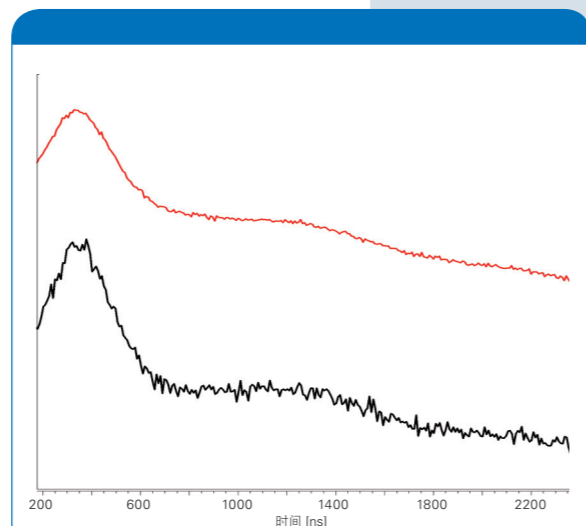
- 灵敏度提高
- 提高 DEER 实验灵敏度
- 高分辨率的 ESEEM 实验
- ENDOR 分辨率提高



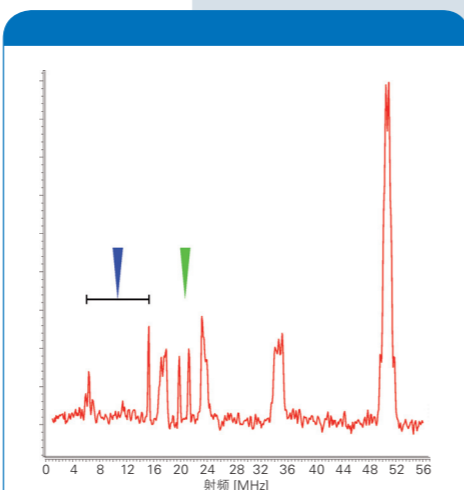
Q 波段 谐振腔 EN 5107D2

SuperQ-FT 微波桥既可以作为一个独立单元使用，也可作为 SuperX-FT 的升级版，用于双波段操作。

高性能 EN 5107D2 谐振腔（EPR 和 ENDOR 版本）进一步完善了该设置，可用于变温工作。



Q 波段 4-脉冲 DEER 实验的优异信噪比提高了距离和距离分布的可靠性和准确性：自旋标记泛素的最佳样品量在 Q 波段（红色）为 10  $\mu$ l，在 X 波段（黑色）为 150  $\mu$ l。



Cu-Pt 络合物的 Davies ENDOR 波谱中核分辨率的提高有助于  $^{31}\text{P}$  和  $^{195}\text{Pt}$  的核耦合作用的归属

# 高频 / 高场 EPR

W 波段 (94 GHz) 高频 EPR 提高了 g 值和核频率的绝对灵敏度和分辨率。ELEXSYS E 680 W 波段波谱仪可作为独立版本使用，也用作 X-W 双频仪器。

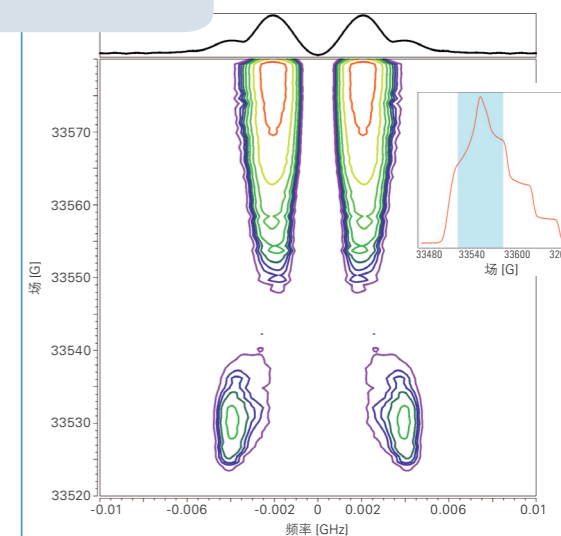


## 用于 EPR 的超导磁体

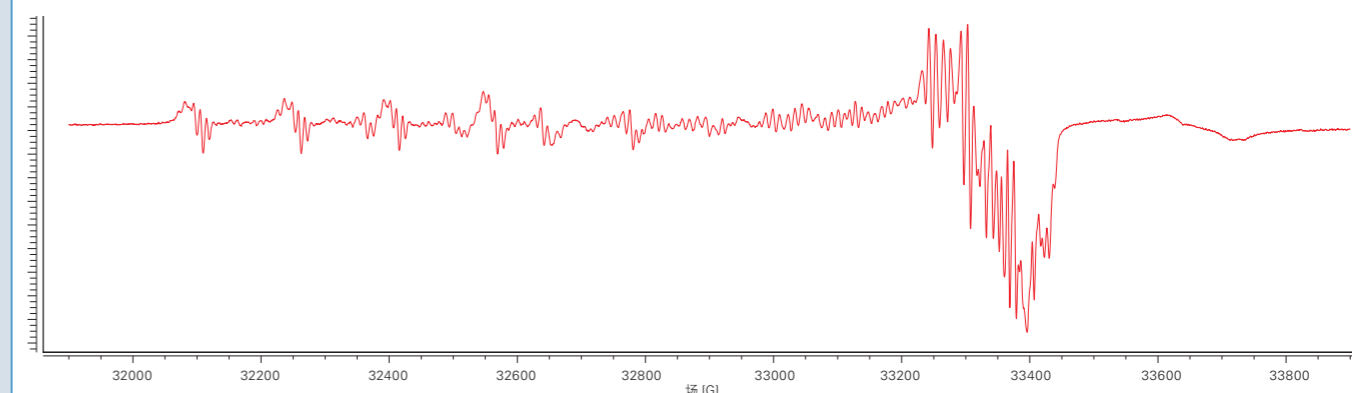
从一开始，EPR 的性能就推动着 6T EPR SC 磁体的设计。主线圈在 30 分钟内可完成 0-6 Tesla 的扫描，而高分辨率扫描线圈的扫描范围为 2000 G。全软件控制轻松实现了主线圈和扫描线圈之间的操作切换。

## W 波段

- 对有限样品量的高灵敏度
- 高 g 值分辨率
- 高核频率分辨率



W 波段较高的 g 值分辨率为定向选择性脉冲实验提供了更多可能：在  $g_x$  区域内施加泵脉冲和在  $g_y$  区域内施加探测脉冲的二维 4 脉冲 DEER 实验显示了偶极波谱中的平行组分。



借助 6T EPR SC 的扫描线圈的 2000 G 扫描范围，在不改变磁体主磁场的情况下可以对很多顺磁性物种进行脉冲和连续波 EPR 实验。

# Xepr™ 和 MoSophe

Xepr 是 ELEXSYS 系列的综合软件包，配有强大的采样和处理工具，可满足每个用户的需求。MoSophe 通过创新环境中放置高性能模拟程序来应对数据解释的挑战。

## 控制

作为监控和控制整个谱仪的中控系统，Xepr 可利用 ELEXSYS 系列波谱仪的所有特性。用户可通过 Xepr 来掌控当前的实验状态，并定义实验的设置。

## 执行

Xepr 提供了脉冲 EPR 实验定义的三种选项：辅助脉冲 EPR、脉冲表和脉冲 SPEL。每个选项都是为满足研究人员期望的控制程度而设计。

## 处理

Xepr 能够实现包含常规方法在内的多种多样的数据处理技术，同时也为非传统方法提供了环境。

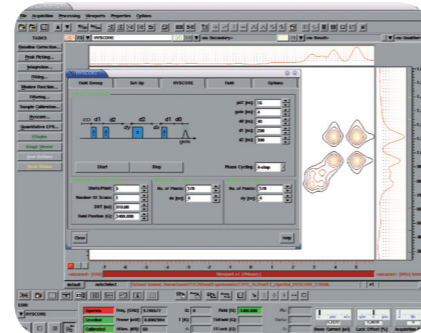
## 模拟和解释

可选模拟程序 Molecular Sophe 用直观的图形用户界面实现了从数据收集到数据解释之间的轻松过渡。自旋体系由原子和键构成，其中磁相互作用很容易被定义和激活。然后像在现实中用 E580 做实验一样，定义和设置虚拟实验。

由于具备如 Tau 抑制和脉冲选择性之类的脉冲序列效应，MoSophe 模拟可为研究人员在数据解释和实验设计上提供更多准确性。

## 仪器监视器

- 样品取向
- 谐振腔温度
- 谐振腔 Q 值
- 磁场位置
- 特斯拉计场
- 微波频率
- 微波功率

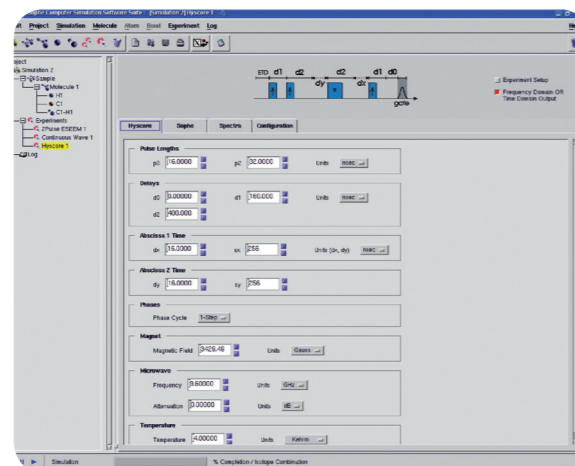


## 数据处理

- 峰值分析
- 拟合
- 死时间重建
- FFT 和交叉项平均
- 卷积和去卷积
- 用户定义的宏处理
- 以及更多……

## 辅助脉冲 -EPR

- FT-EPR
- 2-脉冲 ESEEM
- 3-脉冲 ESEEM
- HYSCORE
- 脉冲 ENDOR
- 脉冲 ELDOR
- 饱和恢复



# 傅里叶变换和扫场谱图数据

采集 EPR 谱图是测试样品的第一步。除了提供 g 值和超精细结构等信息外，EPR 谱图是进一步研究核耦合、分子运动和自旋特性的起点。傅里叶变换和扫场技术都可提供连续波 -EPR 无法提供的选择性。

## 灵敏度

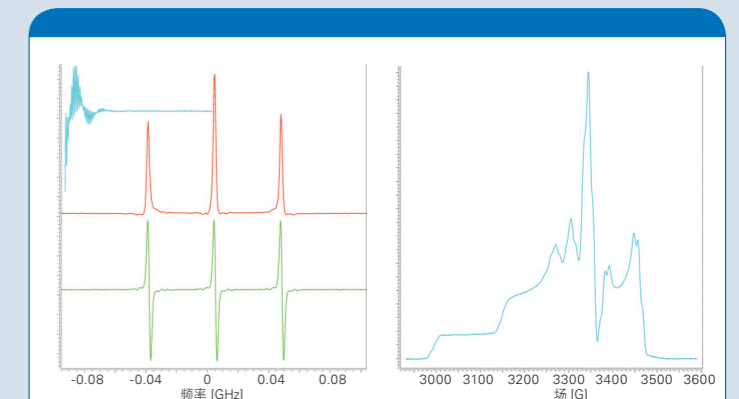
当频谱范围很小时 ( $\leq 200$  MHz)，傅里叶变换 (FT) 技术可提供具有优异灵敏度的 EPR 谱图。由于信号平均值仅受量级在几十微秒的电子弛豫时间 ( $T_1$ ) 的限制，因此可以在极短的时间内记录到大量的谱图数据。

## 选择性

对于较大的频谱范围，EPR 谱图需要由扫场 (FS) 技术来记录。任何产生 ESE 或 FID 的脉冲序列都可用来采集 EPR 谱图。波谱筛分过滤有各种可能性，例如利用  $T_1$  的差异来记录在重叠谱图数据中的个体 EPR 谱图。

## 分辨率

FT-EPR 技术对于由光激发生成的自由基等短寿命自由基物种研究具有重要价值。可通过变更自由基物种生成和检测的时间间隔来监测自由基的增长和衰减，其时间分辨率可达几纳秒。

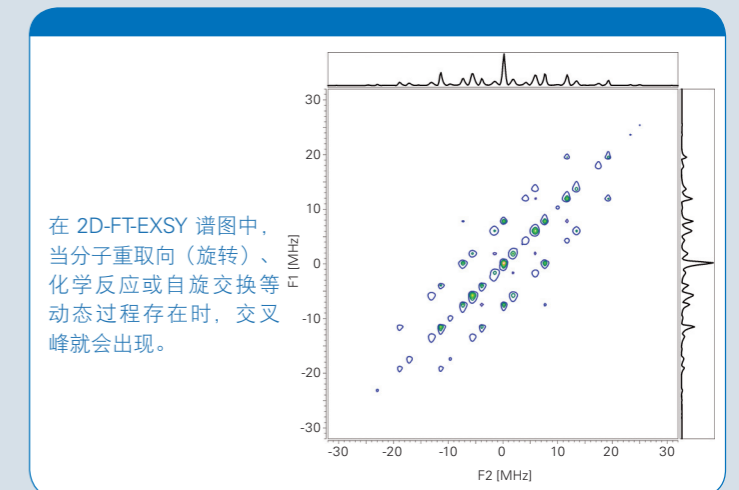


FT-EPR (红色) 波谱在 10 秒内进行 400000 次平均。CW-EPR (绿色) 波谱 10 秒内扫描 1 次。扫场回波检测到的 Cu-Pt 络合物的 EPR 谱图

## 相互作用隔离

2D-SECSY (自旋回波相关波谱学) 实验利用傅里叶变换技术或扫场技术记录了 EPR 谱图上  $T_2$  变化。SECSY 谱图区分了均匀展宽和非均匀展宽对 EPR 谱图的贡献。

2D-EXSY (交换波谱学) 实验探测了在不同超精细线或 EPR 物种之间的磁化转移，进而提供了系统中分子内和分子间过程的视图。



在 2D-FT-EXSY 谱图中，当分子重取向 (旋转)、化学反应或自旋交换等动态过程存在时，交叉峰就会出现。

# ESEEM 和 ENDOR

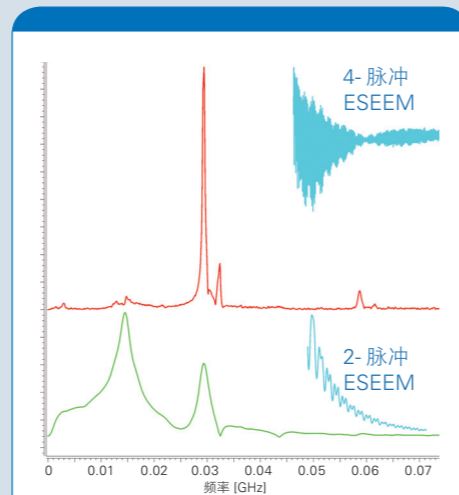
ESEEM 和 ENDOR 技术是探测顺磁中心微观环境的重要工具。这两种技术都可记录核超精细谱图，从中展现出原子核的类别、几何结构和数量。耦合分析可得出自旋密度分布和分子轨道图。

## 电子自旋回波包络调制 - ESEEM

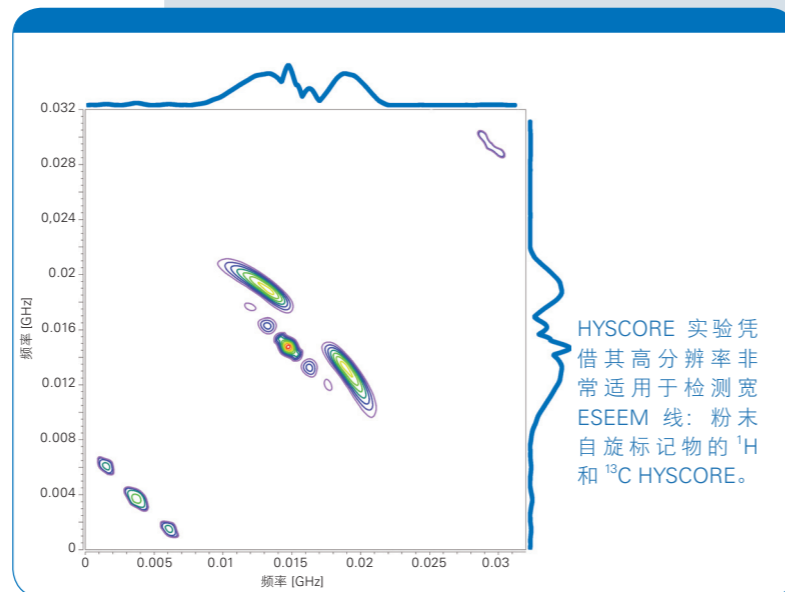
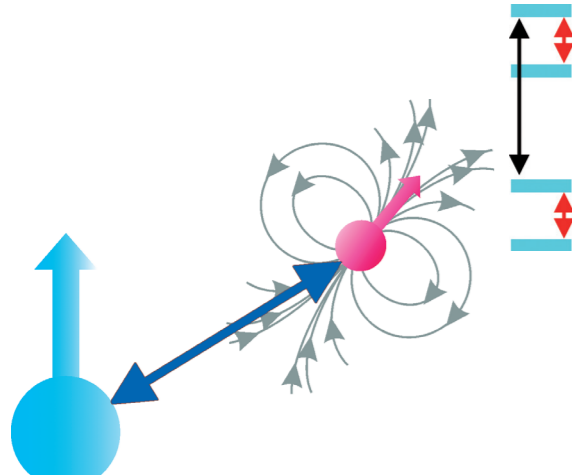
ESEEM 实验是时域微波技术，可为低频下的微弱电子-核耦合提供高灵敏度。直接的时域波谱分析可揭示相互作用核的数量，而频域波谱分析可显示出原子核的类别、耦合和定位。

## 超精细能级相关 - HYSCORE

2D-HYSCORE 实验是研究无序系统最常用的 ESEEM 技术。所增加的频谱维数可提高检测各向异性耦合较强的原子核的灵敏度，这是其他 ESEEM 技术常常做不到的。

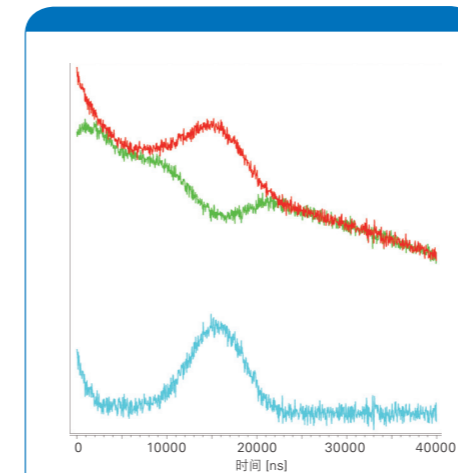


许多 ESEEM 序列都可用于提高灵敏度和分辨率：粉末自旋标记物的 4-脉冲（顶部）vs. 2-脉冲（底部）ESEEM 波谱。



HYSCORE 实验凭借其高分辨率非常适用于检测宽 ESEEM 线：粉末自旋标记物的  $^1\text{H}$  和  $^{13}\text{C}$  HYSCORE。

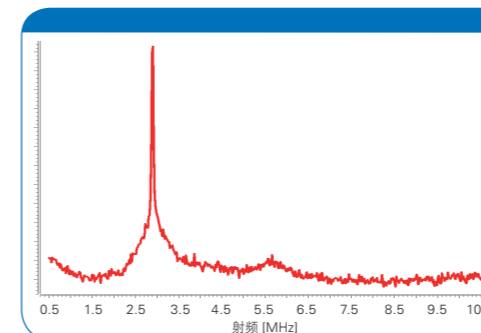
## 核自旋 FID 和回波



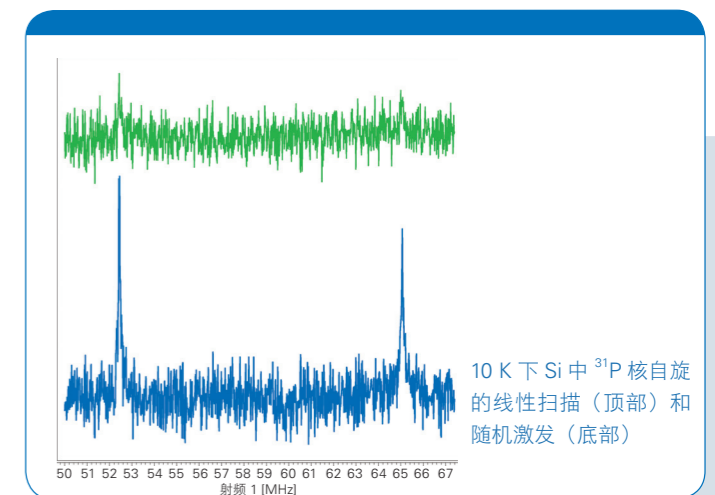
核自旋 FID 和回波检测可获取核自旋弛豫时间，并为 ENDOR 波谱提供了额外的滤波器。需要用射频相位循环来消除无用的信号贡献。

## 随机 ENDOR

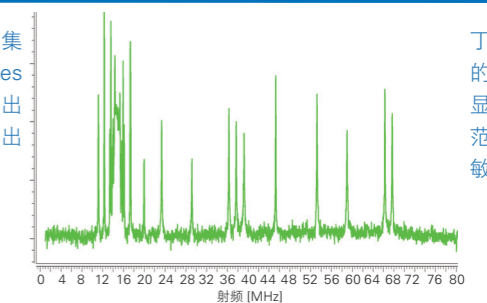
在传统的 ENDOR 实验中，射频是以线性方式扫描的，而在随机 ENDOR 实验中，激发频率是随机选择的。基线稳定性的显著提高和弛豫瓶颈的下降极大地改善了 ENDOR 波谱。



石英中天然富集的  $^{29}\text{Si}$  的 Davies ENDOR 显示出在极低频率下出色的灵敏度。



10 K 下 Si 中  $^{31}\text{P}$  核自旋的线性扫描（顶部）和随机激发（底部）



丁二酸单晶中  $^1\text{H}$  的 Davies ENDOR 显示出在宽频率范围内出色的灵敏度。

## E 560 DICE 单元

### 电子核双共振 - ENDOR

结合了微波脉冲和射频脉冲的脉冲-ENDOR 实验是一套通用的多共振技术，可选择性地探测弱电子-核耦合和强电子-核耦合。此类实验中，Mims 和 Davies ENDOR 序列是最突出的技术，但 DICE 单元的能力远不止于此。DICE 单元结合了传奇的 Flexline 脉冲-ENDOR 谐振腔，从而让许多高级序列都能以最高的性能执行。

- 脉冲-TRIPLE
- HYEND
- 超精细选择性的 ENDOR
- 脉冲-ENDOR 诱导的 EPR
- 核自旋 FID / 回波检测
- 多量子 ENDOR
- 核自旋章动
- 随机激发

# ELDOR 和弛豫

ELDOR 技术和弛豫测量可以轻易地探测到分子的整体结构、长程距离和动力学性质。4 脉冲 -DEER 测量的距离最长可达 80 Å。内部振动、外部碰撞和整体翻转可通过测量弛豫时间  $T_1$  和  $T_2$  来进行评估。

## 长程距离

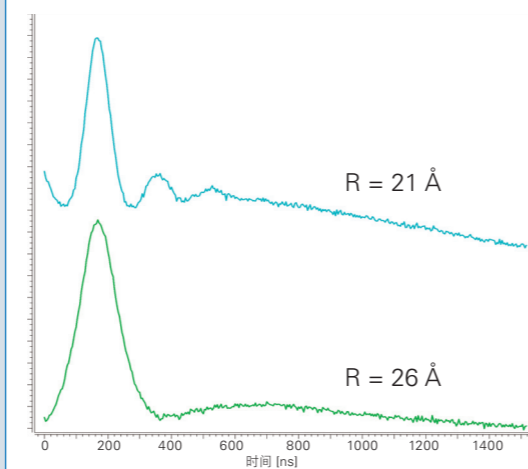
结合了定点自旋标记的脉冲 DEER 技术在蛋白质和聚合物等大分子结构研究中有着极高的价值。

使用了两个微波源的 DEER 实验通常用于探测间距从 15 Å 到 80 Å 不等的未成对电子之间的距离。

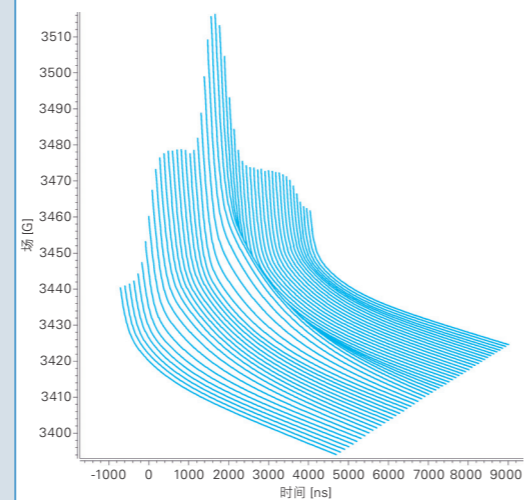
## 距离分布

距离测量的一个重大进步是引入了不受限于死时间的 DEER 序列。除了 EPR 物种之间的平均距离外，4- 脉冲 DEER 实验还可用来测定距离分布。

### 使用 E 580-400 ELDOR 单元测量的 4- 脉冲 DEER

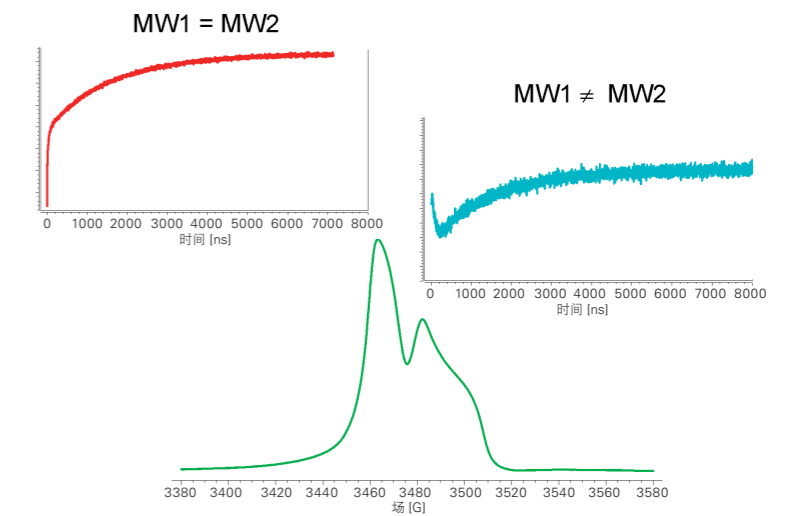


DEER 技术可获取长程距离以及系统中的距离分布：  
自旋标记溶菌酶的 4 脉冲 -DEER 谱图  
数据由 W. Hubbell 提供



二维弛豫时间反映了与分子结构相关的系统动力学性质：  
封装在 Li-X 中的自旋标记物的回波衰减 vs 场

### 使用 LCW 通道和 E 580-400 ELDOR 单元测量的 SR-ELDOR



关联 EPR 谱图不同部分的弛豫过程使得我们能够深入了解结构动力学：<sup>15</sup>N 自旋标记血红蛋白的饱和恢复 EPR 和 ELDOR。  
数据由 P. Fajer 提供。

## 内部弛豫

研究 EPR 谱图的不同部分通过交叉弛豫和核弛豫路径进行交互的方式为理解系统动态过程和系统结构提供了宝贵的信息。

SR-ELDOR 实验是测量这些影响的饱和恢复实验的一个变体，其使用了两个微波频率来测量饱和恢复。

## 结构和动力学

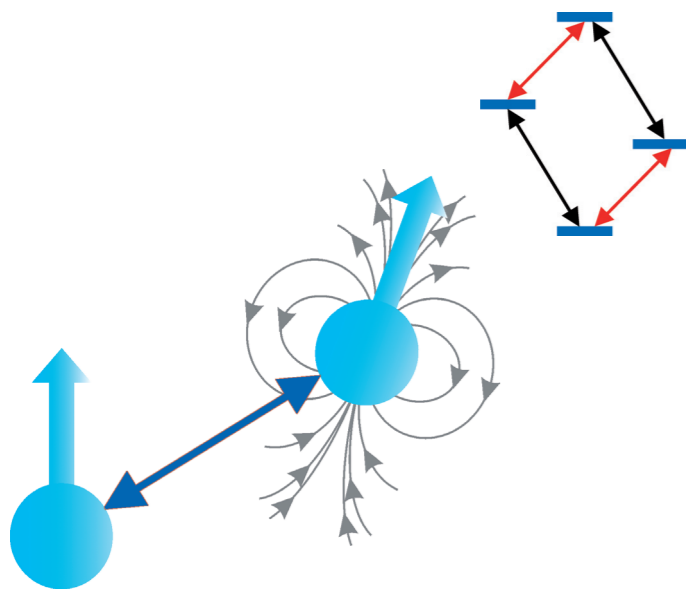
通过电子弛豫时间  $T_1$  和  $T_2$ ，人们可获得丰富的动力学和结构信息。

### 自旋 - 晶格弛豫, $T_1$

- 分子碰撞
- 激发态耦合
- 晶格振动

### 自旋 - 自旋弛豫, $T_2$

- 分子翻转
- 内部旋转
- 偶极相互作用





# 布鲁克 BioSpin，您的解决方案合作伙伴

布鲁克 BioSpin 可针对您的生命和材料科学需求，提供一系列市场领先的世界级分析解决方案。

我们在研发上的不懈努力和大量投入表明了我们代表客户对技术创新的长期承诺。

布鲁克 BioSpin 拥有 40 多年满足各学科专业科研部门需求的经验，通过了解特定的需求和提供细致热情的服务，与科学界和各个专业领域都建立了令人瞩目的合作关系。

布鲁克解决导向的方法保证了我们与您之间的密切合作，进而确定您的特定需求，并根据我们种类齐全的仪器为您制定相应的解决方案包，甚至与您一同合作开发新的解决方案。



● 布鲁克（北京）科技有限公司

[www.bruker.com](http://www.bruker.com)

布鲁克（北京）科技有限公司  
北京市海淀区西小口路 66 号中关村  
东升科技 B-6 号楼 C 座 8 层  
邮编：100192  
电话：(010)58333000  
传真：(010)58333299

上海办公室  
上海市闵行区合川路 2570 号  
1 号楼 9 楼  
邮编：200233  
电话：(021) 51720800  
传真：(021) 51720810

广州办公室  
广州市海珠区新港东路 618 号  
南丰汇  
6 楼 A12 单元  
电话：(020) 22365885/  
(020)22365886



布鲁克磁共振公众号