



电子顺磁共振 (EPR)

SpinFit Liquids

液态样品CW-EPR谱图的模拟和拟合

秉持诚信 不断创新

引言

SpinFit Liquids是一个用于对溶液中自由基的CW-EPR谱图进行模拟和拟合的软件模块。SpinFit Liquids可通过将一组精简的参数与原始数据相拟合，最大程度减少用户输入以简化物质鉴定过程。SpinFit Liquids提供了一套丰富的常见自由基谱图库，以及相应的拟合参数，以便快速轻松地完成鉴定。在液体中，顺磁性物质的翻滚速度取决于溶剂的粘度或物质的大小。其翻滚速率，也即转动运动的程度，决定了所观测到的CW-EPR谱图的动态机制。要对不同动态机制下的谱图进行模拟，就需要运用多种不同的理论描述，而SpinFit Liquids正好可以提供这些理论描述。

布鲁克通过获得专利的SpinFit和SpinCount组合软件模块，为EPR分析提供了易用性和便利性。该模块是所有采用Xenon和Xepr软件的布鲁克EPR波谱仪的标准配置，以及ESRStudio软件的可选配置。通过使用该软件包，用户可直接对样品进行准确表征，而无需将其与标准样品或单独测定的校准曲线进行比较。借此，布鲁克提供了一套简单可靠的解决方案，可应用于广泛的科学研究或过程/质量控制。

特色功能

- 对处于液态的自由基和过渡金属物质的谱图进行模拟和拟合
- 简单易用的界面
- 常见顺磁物种谱图库，以便鉴定自由基
- 鉴定和量化复杂混合物中的单一组分物种
- 支持一维和二维数据集
- 自动选择动态机制
- 与SpinCount轻松对接
- 整合到波谱仪控制软件中，以便研究人员在完成数据采集后，立即快速、轻松地鉴定顺磁性物质

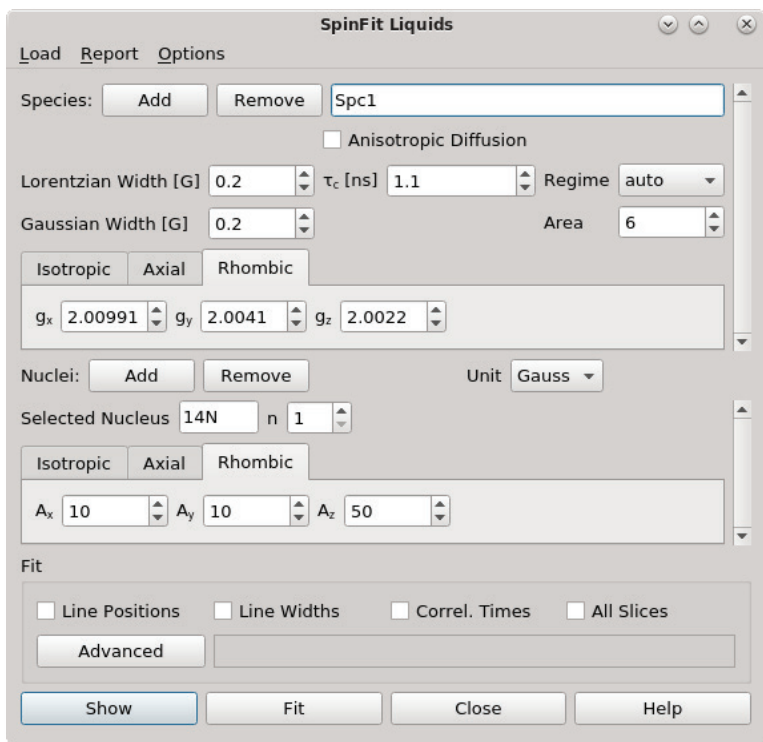


图1

SpinFit Liquids用户界面

- 自动或手动选择动态机制
- 轻松、精确地对不同运动动态机制下的谱图进行模拟和拟合

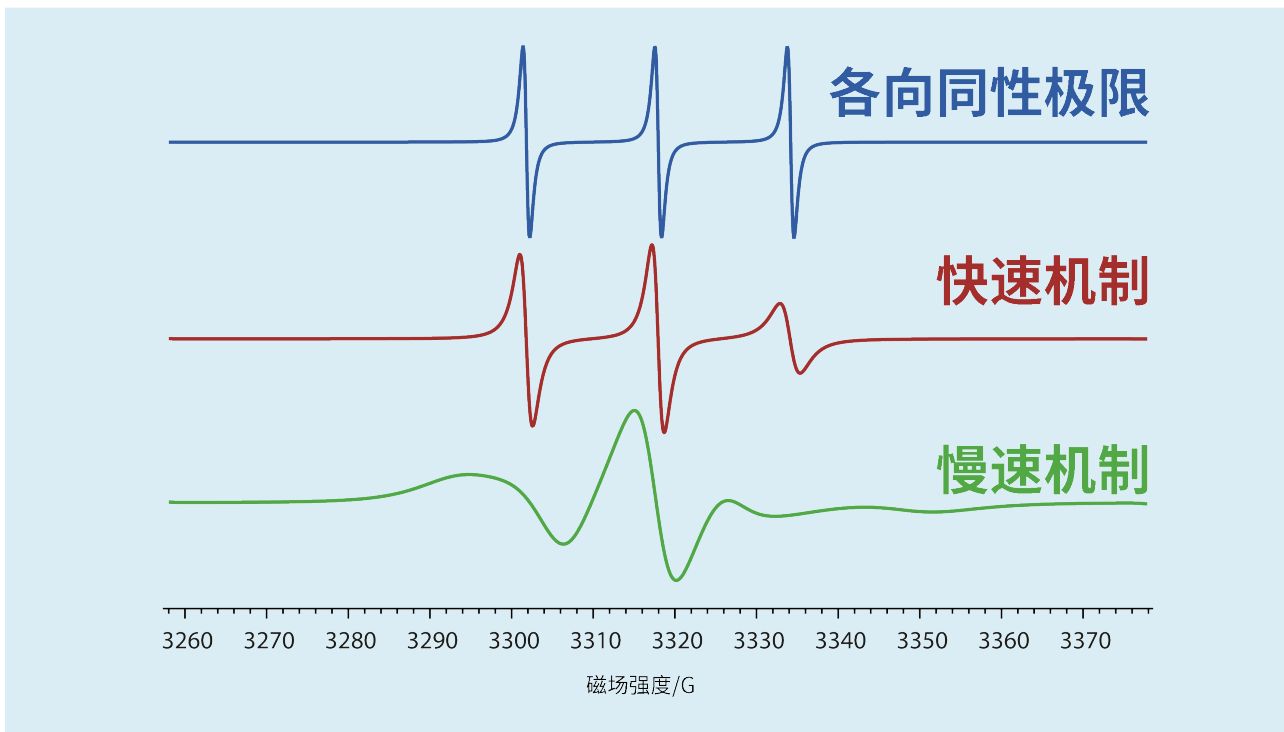


图2

几种动态机制下的氮氧自由基谱图

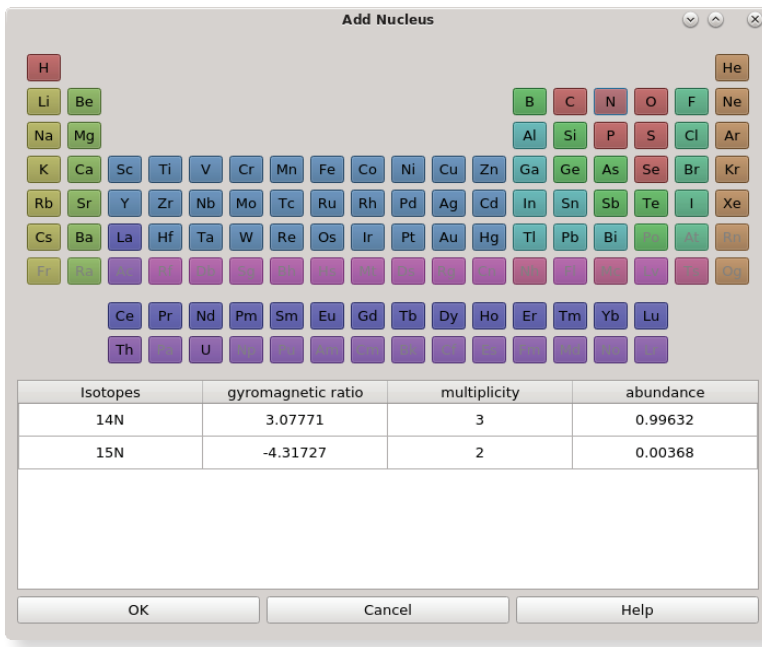


图3
直观易操作的界面,方便用户从元素周期表中选择原子及其同位素

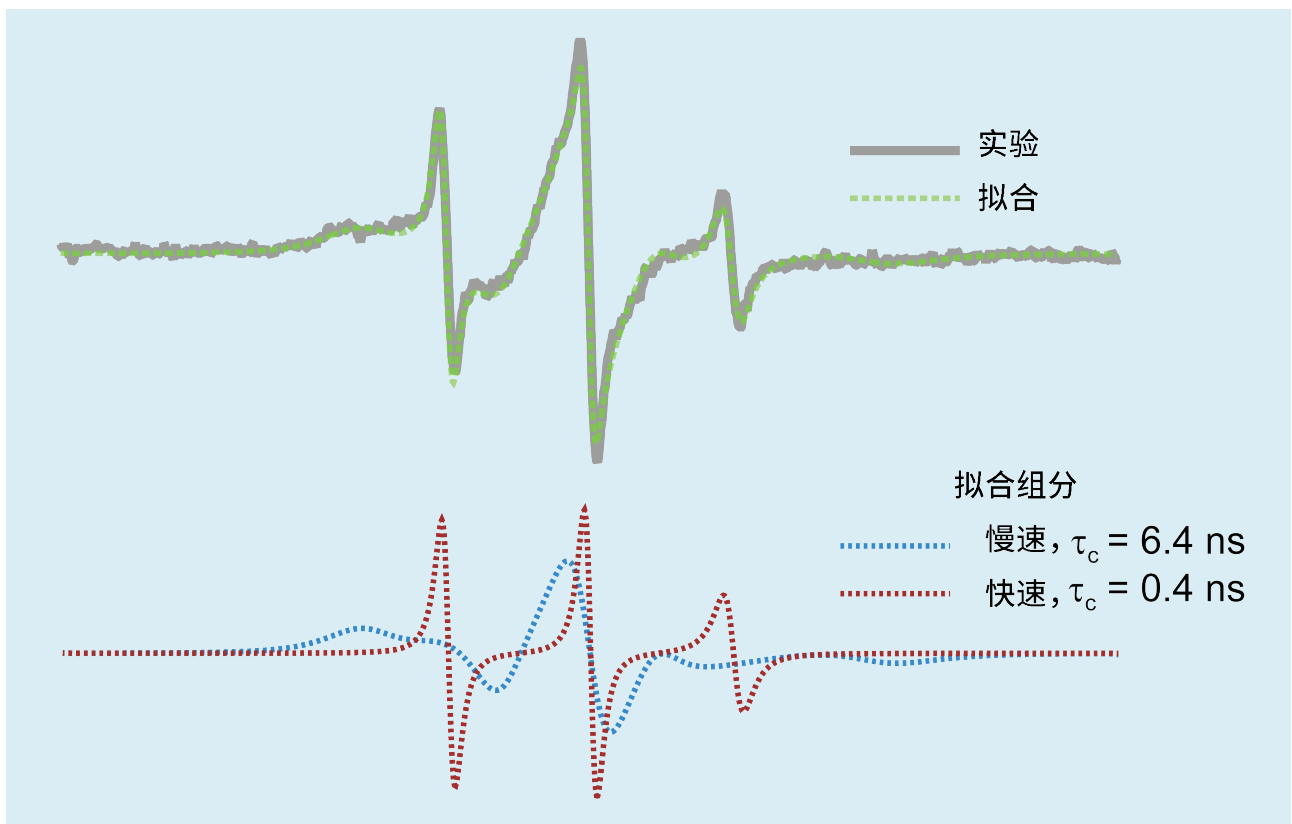
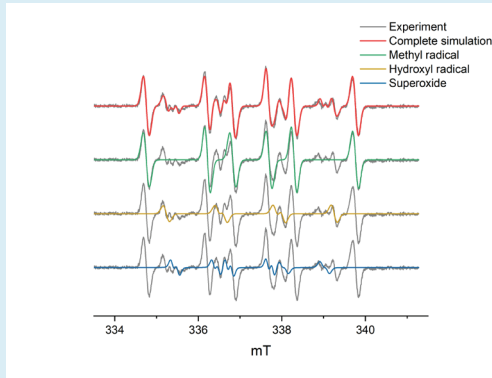


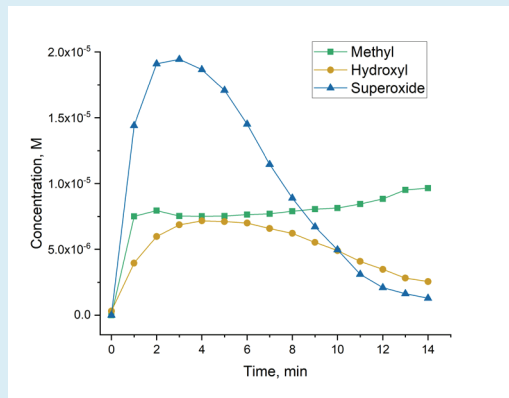
图4
自旋标记蛋白质的双组分谱图

- 辨析和鉴定多种组分和物质
- 对转动相关时间进行拟合,以深入了解其运动动力学
- 通过组合使用SpinFit Liquids与SpinCount模块,确定标记效率



拟合和计算

A	B	C	D	E	F	G
1 Data name	Time [s]	Height [mm]	Diameter [mm]	Volume [ml]	Spins	Spin conc. [M]
2 TlO2_kinetics_full_13_001_fit Methyl	0	23	0.94	0.01596149	1.50E+26	15572192.21
3 TlO2_kinetics_full_13_002_fit Methyl	60.00309	23	0.94	0.01596149	7.2147E+13	7.53E-06
4 TlO2_kinetics_full_13_003_fit Methyl	120.00404	23	0.94	0.01596149	7.6133E+13	7.94E-06
5 TlO2_kinetics_full_13_004_fit Methyl	180.01358	23	0.94	0.01596149	7.2381E+13	7.53E-06
6 TlO2_kinetics_full_13_005_fit Methyl	240.01271	23	0.94	0.01596149	7.2324E+13	7.52E-06
7 TlO2_kinetics_full_13_006_fit Methyl	300.01222	23	0.94	0.01596149	7.2418E+13	7.53E-06
8 TlO2_kinetics_full_13_007_fit Methyl	360.00496	23	0.94	0.01596149	7.2416E+13	7.44E-06
9 TlO2_kinetics_full_13_008_fit Methyl	419.99944	23	0.94	0.01596149	7.4041E+13	7.70E-06
10 TlO2_kinetics_full_13_009_fit Methyl	480.01144	23	0.94	0.01596149	7.5848E+13	7.89E-06
11 TlO2_kinetics_full_13_010_fit Methyl	540.00394	23	0.94	0.01596149	7.7472E+13	8.00E-06
12 TlO2_kinetics_full_13_011_fit Methyl	600.00085	23	0.94	0.01596149	7.8286E+13	8.14E-06
13 TlO2_kinetics_full_13_012_fit Methyl	660.00474	23	0.94	0.01596149	8.1133E+13	8.44E-06
14 TlO2_kinetics_full_13_013_fit Methyl	720.00093	23	0.94	0.01596149	8.4881E+13	8.83E-06
15 TlO2_kinetics_full_13_014_fit Methyl	780.01355	23	0.94	0.01596149	9.1431E+13	9.51E-06
16 TlO2_kinetics_full_13_015_fit Methyl	840.00539	23	0.94	0.01596149	9.2791E+13	9.65E-06
17 TlO2_kinetics_full_13_001_fit Hydroxyl	0	23	0.94	0.01596149	3.0077E+12	3.13E-07
18 TlO2_kinetics_full_13_002_fit Hydroxyl	60.003009	23	0.94	0.01596149	3.7995E+13	3.95E-06
19 TlO2_kinetics_full_13_003_fit Hydroxyl	120.00404	23	0.94	0.01596149	5.7467E+13	5.98E-06
20 TlO2_kinetics_full_13_004_fit Hydroxyl	180.01358	23	0.94	0.01596149	6.5967E+13	6.86E-06
21 TlO2_kinetics_full_13_005_fit Hydroxyl	240.01271	23	0.94	0.01596149	6.8886E+13	7.17E-06
22 TlO2_kinetics_full_13_006_fit Hydroxyl	300.01322	23	0.94	0.01596149	6.8402E+13	7.12E-06
23 TlO2_kinetics_full_13_007_fit Hydroxyl	360.00496	23	0.94	0.01596149	6.7281E+13	7.00E-06
24 TlO2_kinetics_full_13_008_fit Hydroxyl	419.99944	23	0.94	0.01596149	6.3321E+13	6.59E-06
25 TlO2_kinetics_full_13_009_fit Hydroxyl	480.01144	23	0.94	0.01596149	5.9795E+13	6.22E-06
26 TlO2_kinetics_full_13_010_fit Hydroxyl	540.00394	23	0.94	0.01596149	5.3118E+13	5.53E-06
27 TlO2_kinetics_full_13_011_fit Hydroxyl	600.00085	23	0.94	0.01596149	4.7125E+13	4.90E-06
28 TlO2_kinetics_full_13_012_fit Hydroxyl	660.00474	23	0.94	0.01596149	3.9177E+13	4.08E-06
29 TlO2_kinetics_full_13_013_fit Hydroxyl	720.00093	23	0.94	0.01596149	3.3401E+13	3.48E-06
30 TlO2_kinetics_full_13_014_fit Hydroxyl	780.01355	23	0.94	0.01596149	2.7804E+13	2.81E-06



绘图

图5

由三种自旋捕获自由基组成的混合物的多组分谱图

- 提供常见自由基物质谱图库，以便进行分析
- 支持一维和二维数据集
- 对重叠谱图进行去卷积，以测定单一组分浓度
- 高精度定量分析（甚至在信噪比低的情形下）



布鲁克磁共振微信公众号

● 布鲁克 (北京) 科技有限公司

网址: www.bruker.com
E-mail: sales.bbco.cn@bruker.com
布鲁克应用技术咨询:
400-898-5858
布鲁克售后技术支持:
400-898-1088

布鲁克 (北京) 科技有限公司
北京市海淀区西小口路66号
中关村东升科技园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