

**Министерство образования и науки Российской Федерации**

**КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ**

**ИНСТИТУТ ФИЗИКИ**

**КАФЕДРА КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ И  
РАДИОСПЕКТРОСКОПИИ**

Направление: 011800.62 – Радиофизика

**КУРСОВАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА**

**Фурье - преобразование в модуляционной  
спектроскопии**

**Работа завершена:**

" \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2015 г. \_\_\_\_\_ (К.С. Гладнев)

**Работа допущена к защите:**

Научный руководитель

к.ф.-м.н., доцент

" \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2015 г. \_\_\_\_\_ (А.В. Егоров)

Заведующий кафедрой

д.ф.-м.н., профессор

" \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2015 г. \_\_\_\_\_ (М.С. Тагиров)

**Казань – 2015**

## Оглавление

Введение .....	3
Глава 1. Влияние амплитуды модуляции на резонансную линию.....	4
Глава 2. Влияние амплитуды модуляции на отношение сигнал/шум.....	11
Глава 3. Коррекция модуляционного искажения.....	17
Заключение.....	21
Список использованных источников:.....	22

## Введение

Современные спектрометры принципиально ничем не отличаются от спектрометров, которые использовались 70 лет назад. В “классических” спектрометрах, иногда называемых дифференциальными, используется синхронное детектирование – широко распространенный метод повышения отношения сигнал/шум – выделяющее спектральную плотность сигнала на частоте модуляции  $S(\omega)$ . Этот метод сужения полосы регистрации известен также как lock-in или захват частоты. Отказ от синхронного детектирования и непосредственная оцифровка сигнала детектора с последующим фурье-преобразованием (рисунок 1.) позволяет одновременно численно оценивать амплитуду не только первой, но и высших гармоник  $S(2\omega)$ ,  $S(3\omega)$  и т.д

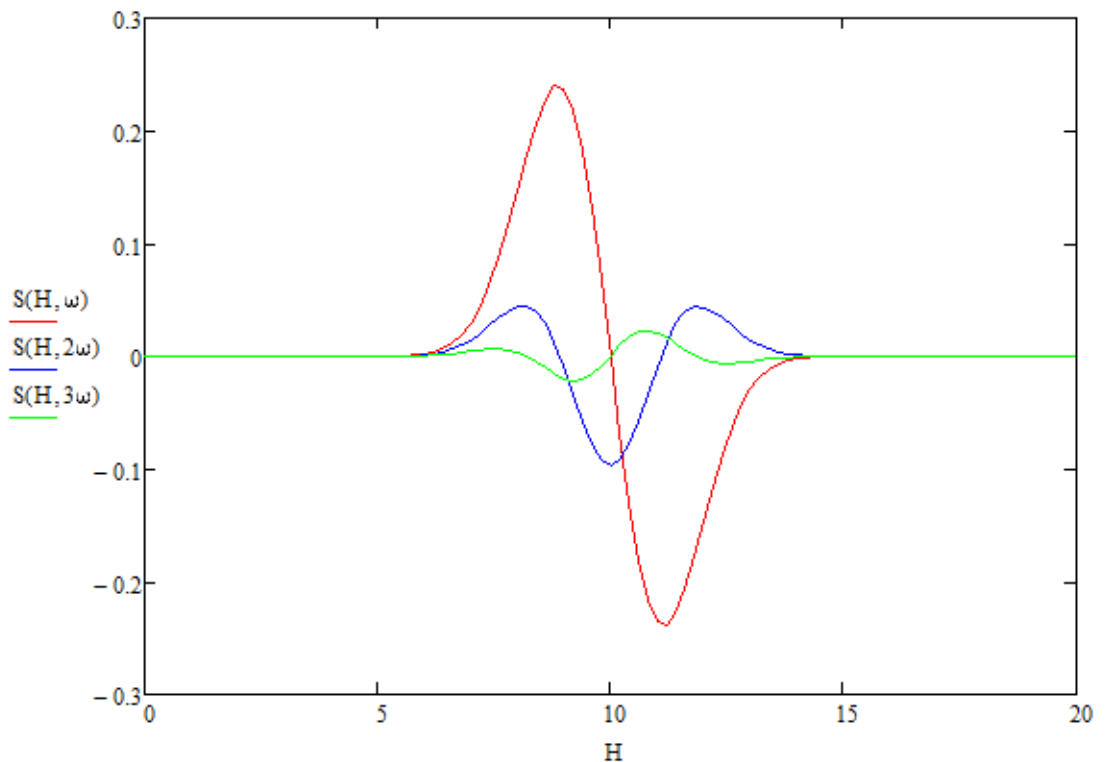


Рисунок 1 – Первая, вторая и третья гармоники.

Отказ от классического метода и использование цифровых методов обработки и записи сигнала позволяет получать больше информации о сигнале, и, в конечном итоге, получать большее отношение сигнал/шум.

## Глава 1. Влияние амплитуды модуляции на резонансную линию

Условие, при котором спиновая система поглощает энергию имеет вид

$$h\nu \approx g\beta H_0 \quad (\text{ЭПР}) \quad (1)$$

или

$$h\nu \approx \gamma \hbar H_0 \quad (\text{ЯМР}) \quad (2)$$

где,  $\gamma$  гиромагнитное отношение,  $g$ -  $g$ -фактор известные из условия резонанса.  $\beta$  – магнетон Бора.  $H_0$  – резонансное значение напряженности магнитного поля,  $\nu$  частота.

Если поддерживается постоянная частота, а изменяется магнитное поле, то количество поглощаемой мощности будет меняться соответственно функции формы  $F(H)$ , которая имеет вид

$$F(H) = Ae^{\left(-\frac{(H-H_0)^2}{2(dH)^2}\right)} \quad (\text{гауссова форма}) \quad (3)$$

Или

$$F(H) = A / \left(1 + \left(\frac{H-H_0}{2(dH)}\right)^2\right) \quad (\text{лоренцева форма}) \quad (4)$$

Где  $A$  - пиковая амплитуда сигнала при  $H = H_0$ ,  $dH$  ширина резонансной линии.

В данной работе исследования проводятся для гауссовой формы линии.

Зададим входной сигнал в виде функции (3). Для определенности положим,  $H_0 = 10$ , а  $dH = 1$ ,  $A = 1$ . На рисунке 2 представлен график функции (5)

$$F(H) = e^{\left(-\frac{(H-H_0)^2}{2(dH)^2}\right)} \quad (5)$$

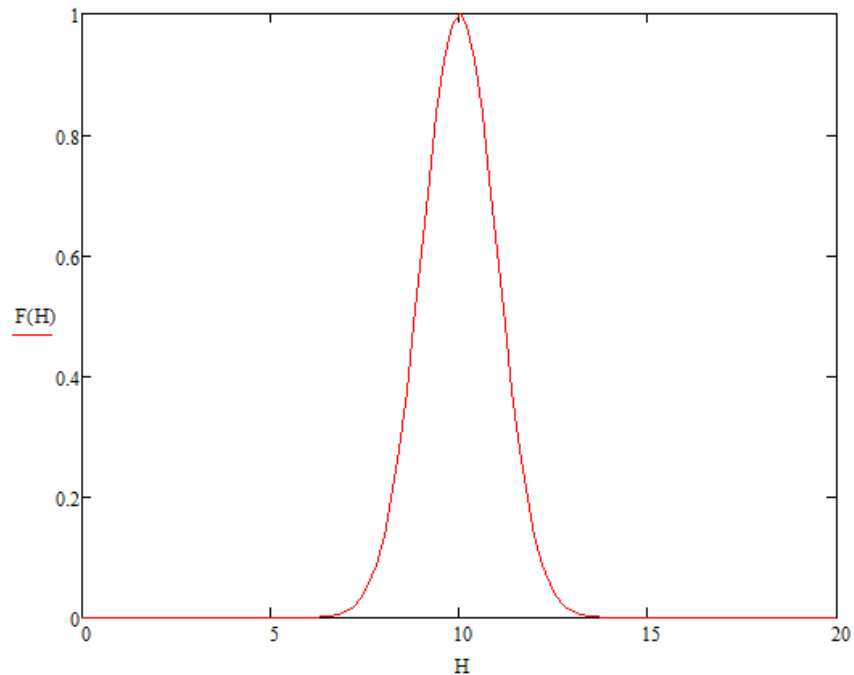


Рисунок 2 - Гауссова форма линии для заданных  $A$ ,  $H_0$ ,  $dH$

Представляет интерес анализ спектральных характеристик сигнала детектора при наличии модуляции. Когда магнитное поле модулируется с частотой  $\omega$  на постоянное магнитное поле накладывается переменное магнитное поле  $h \cdot \cos(\omega \cdot t)$ , где  $h$  амплитуда модуляции магнитного поля (для определенности положим равной  $0.1 \cdot dH$ ). Тогда в момент времени  $t$  значение магнитного поля примет вид

$$F(H(t)) = F(H + h \cdot \cos(\omega \cdot t)) \quad (7)$$

Проведём дискретное Фурье-преобразование положим  $N = 1000$ ,  $\Delta t = 0,1$ . Построим график.

$$S(H, \omega) = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=0}^{N-1} F(H(t)) \cdot \cos(\omega \cdot t_i) \quad (8)$$

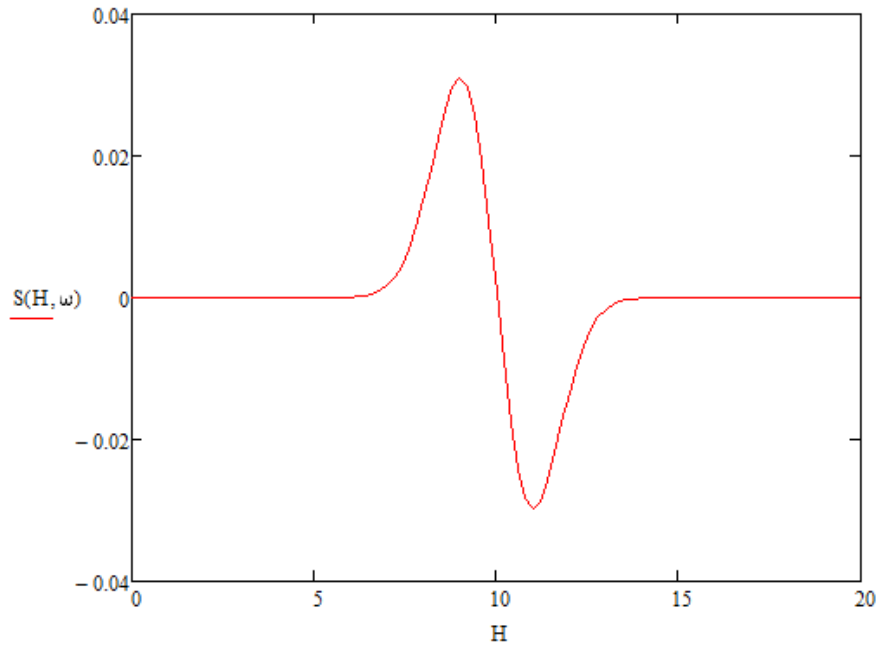


Рисунок 3 - Первая гармоника при амплитуде модуляции  $0.1 \cdot dH$

Полученная первая гармоника имеет вид первой производной. Действительно, разложим в ряд функцию (5), ограничившись первыми тремя членами разложения

$$F(H + \Delta H) = F(H) + \frac{\partial F}{\partial H} \Delta H + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 F}{\partial H^2} \Delta H^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 F}{\partial H^3} \cdot \Delta H^3 \quad (9)$$

Полагая, что  $\Delta H = h \cdot \cos(\omega \cdot t)$ , где  $h$  – амплитуда модуляции, а  $\omega$  – частота, получим зависимость от времени:

$$F(t) = \sum_{n=0}^3 \frac{1}{n!} \left( \frac{\partial^n F}{\partial H^n} \right) (h \cdot \cos(\omega \cdot t))^n \quad (10)$$

Проведём Фурье-преобразование этой функции

$$S(\Omega) = \frac{1}{T} \int_0^T F(t) \cos \Omega t dt \quad (11)$$

Для перехода к гармоническим составляющим воспользуемся формулами понижения степени (12) и (13) :

$$\cos^2(x) = \frac{1 + \cos(2x)}{2} \quad (12)$$

$$\cos^3(x) = \frac{3 \cdot \cos(x) + \cos(3x)}{4} \quad (13)$$

Фурье преобразование (11) будут иметь ненулевые составляющие только на частотах кратных частоте модуляции  $\omega$ , а именно:

$$S(0) = F \quad (14)$$

$$S(\omega) = \frac{1}{2} \frac{\partial F}{\partial H} \cdot h + \frac{1}{16} \frac{\partial^3 F}{\partial H^3} \cdot h^3 \quad (15)$$

$$S(2\omega) = \frac{1}{8} \frac{\partial^2 F}{\partial H^2} \cdot h^2 \quad (16)$$

$$S(3\omega) = \frac{1}{48} \frac{\partial^3 F}{\partial H^3} \cdot h^3 \quad (17)$$

$S(0)$  – напряжение смещения детектора.

$S(\omega)$  – спектральная плотность на частоте модуляции при синхронном детектировании. Из формулы 15 следует, что спектральная плотность пропорциональна первой производной сигнала, если амплитуда модуляции мала  $h \ll dH$ . Увеличение  $h$  ведет к увеличению  $S(\omega)$ , быстро увеличивается сигнал, с другой стороны с увеличением  $h$  увеличивается и добавка обусловленная третьим членом разложения в ряд Тейлора. Как следствие искажается сигнал.

Сравним первую гармонику с первой производной линии для амплитуды модуляции равной  $0.1 \cdot dH$ . С учетом предыдущих формул построим график первой гармоники и первой производной (рисунок 4).

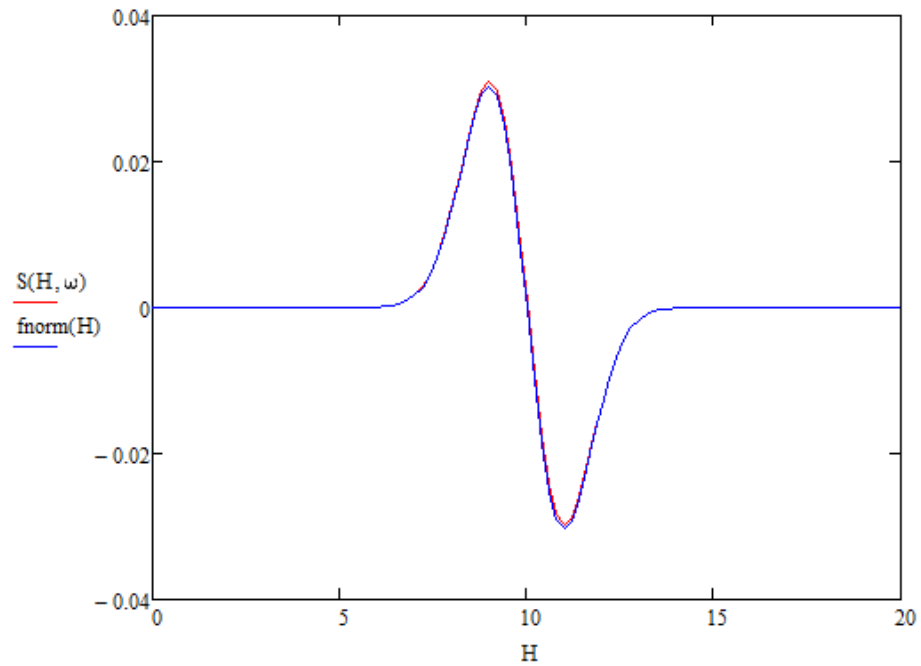


Рисунок 4 - График нормированной первой производной и первой гармоники.

На рисунке 4  $S(H, \omega)$  первая гармоника, а  $f_{norm}(H)$  аналитически посчитанная производная с учетом нормировки (15).

$$f(H) = \left(-\frac{H-H_0}{(dH)^2}\right) \cdot e^{\left(-\frac{(H-H_0)^2}{2(dH)^2}\right)} \quad (18)$$

$$f_{norm}(H) = \frac{1}{2} f(H) \cdot h \quad (19)$$

Из рисунка 4 видно, что при амплитуде модуляции равной одной десятой ширины, уравнение (15) полностью выполняется. Первая гармоника в точности равна первой производной линии. Увеличим амплитуду модуляции в 15 раз  $h = 1,5dH$  и повторим предыдущие действия и преобразования, построим график (рисунок 5).



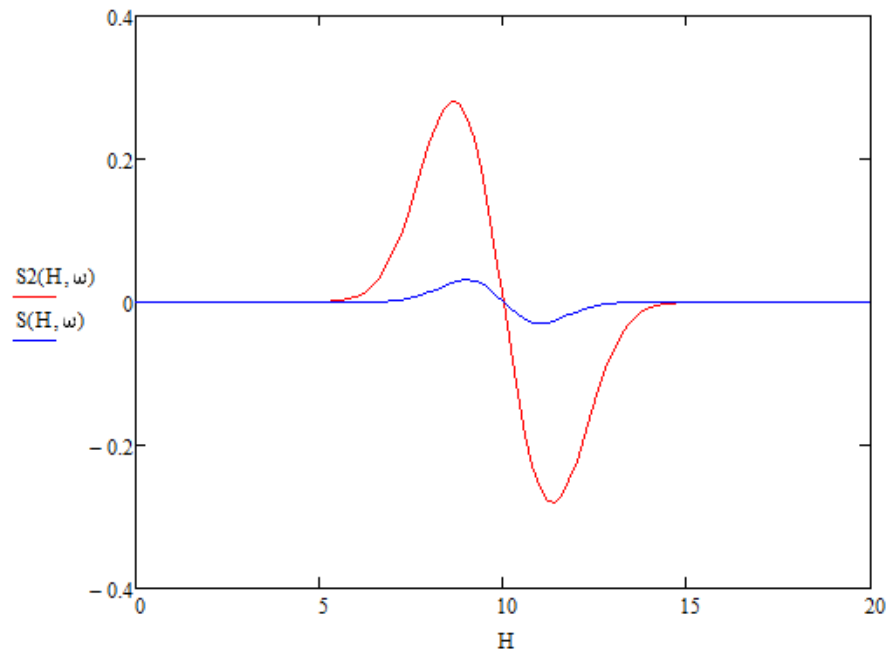


Рисунок 5 - Модуляционная уширение.  $S(H, \omega)$  первая гармоника при амплитуде модуляции  $0.1 \cdot dH$  и  $S2(H, \omega)$  первая гармоника при амплитуде модуляции  $1.5 \cdot dH$

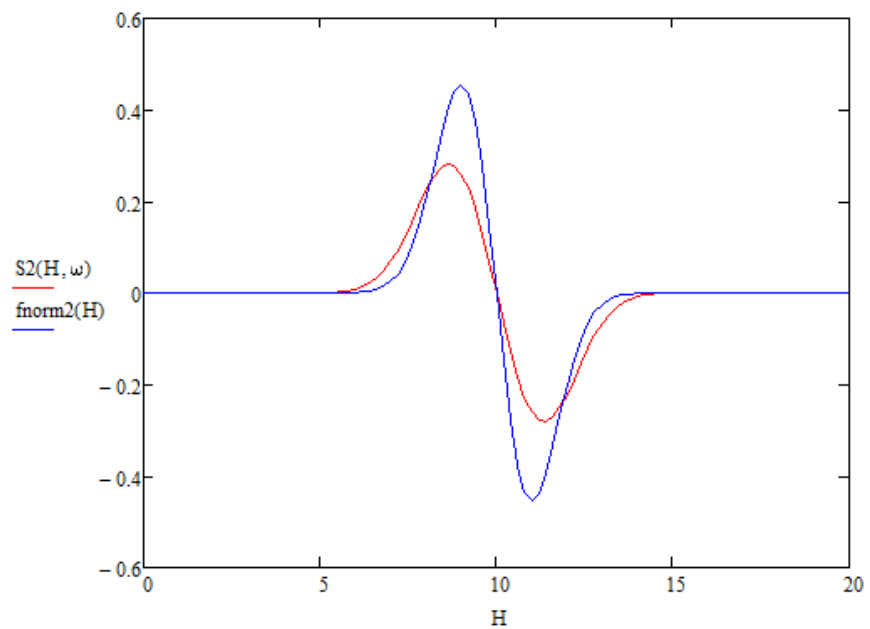


Рисунок 6 - Сравнение нормированной первой производной и первой гармоники амплитуда модуляции равна  $1.5 \cdot dH$ .

При увеличении амплитуды модуляции растёт интенсивность (рисунок 5), но с другой стороны происходит модуляционное уширение (рисунок 6). Это явление подробно описано в книге Чарльза Пула [1]. Для примера на рисунке 7 представлена зависимость ЯМР-сигнала протонов в водном растворе  $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3$  от амплитуды модуляции.

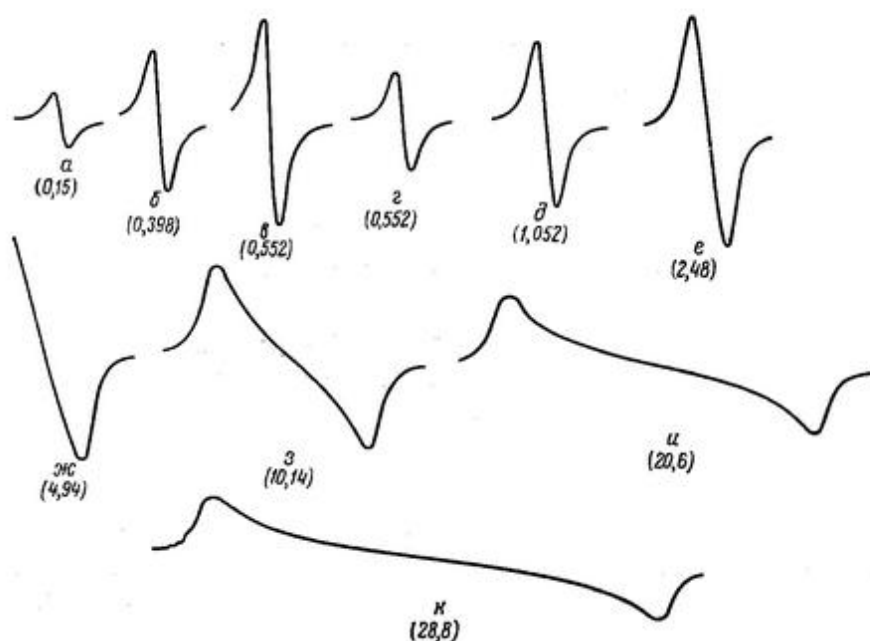


Рисунок 7 - Зависимость ЯМР-сигнала протонов в водном растворе  $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3$  от амплитуды модуляции.

## Глава 2. Влияние амплитуды модуляции на отношение сигнал/шум

В идеальном случае, то есть когда входной сигнал попадает на детектор без шумов, увеличивать амплитуду модуляции не имеет смысла. На практике же всегда имеется шум. Наложим шум на наш исходный сигнал (3). Для этого воспользуемся встроенной в Mathcad функцией  $rnd$ , имеющая равномерное распределение. Пусть случайная величина  $x$  имеет стандартное непрерывное равномерное распределение на  $[-0,5; 0,5]$ , т. е. её плотность вероятности задана равенством

$$p(x) = \begin{cases} 1, & x \in [-0,5; 0,5] \\ 0, & x \notin [-0,5; 0,5] \end{cases} \quad (20)$$

Тогда дисперсией называется

$$D[x] = M[(x - M[x])^2] \quad (21)$$

Где,  $M[x]$  математическое ожидание. Если случайная величина  $x$  вещественна, то, в силу линейности математического ожидания, справедлива формула:

$$D[x] = M[x^2] - (M[x])^2 \quad (22)$$

Тогда

$$M[x^2] = \int_{-0,5}^{0,5} x^2 p(x) dx = \frac{x^3}{3} \Big|_{-0,5}^{0,5} = \frac{1}{24} + \frac{1}{24} = \frac{1}{12} \quad (23)$$

И

$$M[x] = \int_{-0,5}^{0,5} xp(x) dx = 0 \quad (24)$$

Тогда

$$D[x] = M[x^2] - (M[x])^2 = \frac{1}{12} \quad (25)$$

среднее квадратичное отклонение

$$\sigma = \sqrt{D[x]} = \sqrt{\frac{1}{12}} \quad (26)$$

В природе не существует шума с равномерным распределением. Сформировать случайные величины, распределенные по нормальному закону, можно используя центральную предельную теорему теории вероятностей. Распределение вероятностей величины  $x$ , равной сумме  $n$  независимых случайных величин  $\beta_i$  [2]

$$x = \sum_{i=0}^{n-1} \beta_i \quad (27)$$

с произвольным законом распределения и мало различающимися дисперсиями (т.е. дающими примерно одинаковый вклад в общую сумму) при  $n \rightarrow \infty$  асимптотически стремится к нормальному закону.

Если величины  $\beta_i$  распределены равномерно на интервале  $[-0,5 \dots 0,5]$ , то дисперсия равна  $D[x]=n/12$ .

При  $n=12$ ,  $D[x]=1$ . Наложим шум, распределенный по нормальному закону на функцию (5), с масштабным коэффициентом  $\frac{1}{2}$  тем самым влияя на среднее квадратичное отклонение, а следовательно и на дисперсию. Тогда дисперсия шума будет равна  $D[x]=0,25$ , а среднее квадратичное отклонение  $\sigma=0,5$ , построим график (рисунок 8).

$$F(H) = e^{-\frac{(H-H_0)^2}{2(dH)^2}} + \left(\frac{1}{2}\right) \sum_{i=1}^{11} (rnd(1) - 0.5) \quad (28)$$

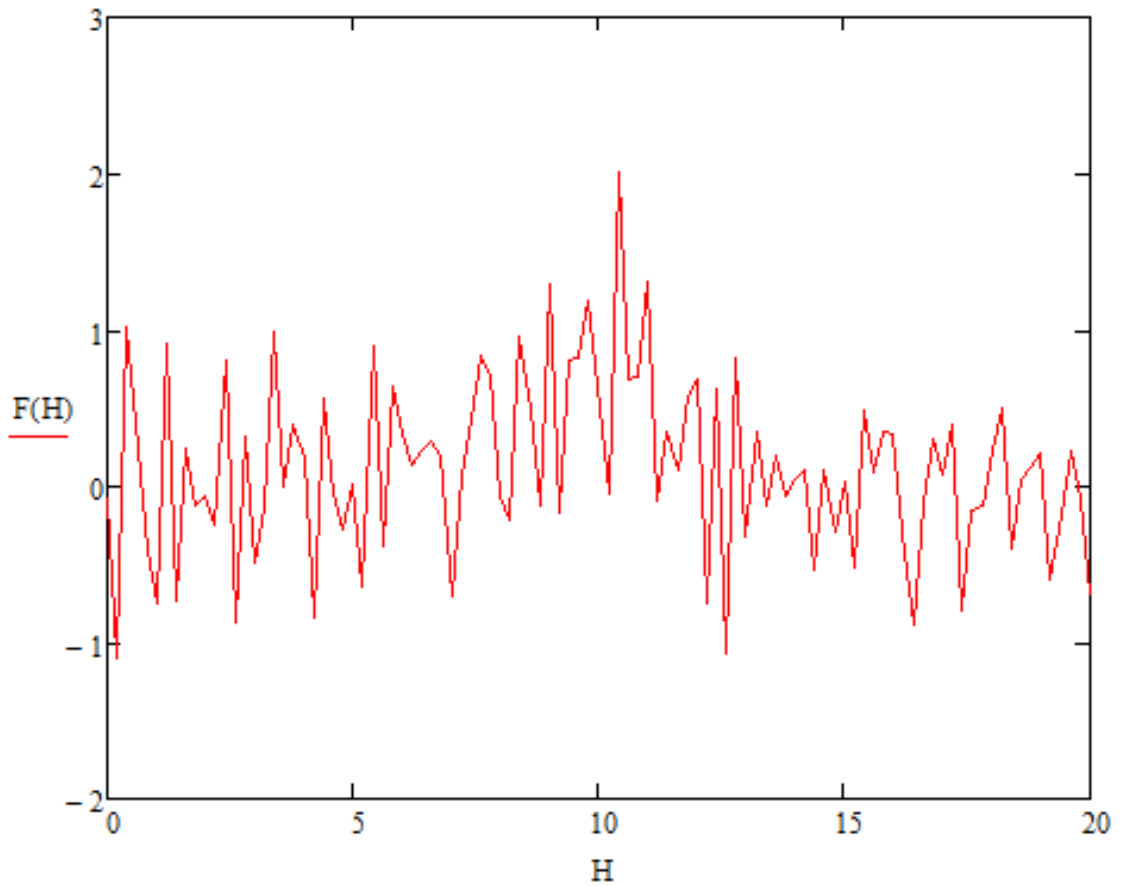


Рисунок 8 - Исходная функция при наличии шума, отношение сигнал/шум 2

Исследуем влияние амплитуды модуляции на отношение сигнал/шум, для этого будем сравнивать четыре сигнала с различными амплитудами модуляций. Для наглядности возьмем амплитуды модуляции  $h1 = 0.1dH$ ,  $h2 = 0.2 dH$ ,  $h3 = 0.5 dH$  и  $h4 = dH$ . Повторим предыдущие рассуждения, тогда

$$F1(H(t)) = F(H + h1 \cdot \cos(\omega \cdot t)) \quad (29)$$

$$F2(H(t)) = F(H + h2 \cdot \cos(\omega \cdot t)) \quad (30)$$

$$F3(H(t)) = F(H + h3 \cdot \cos(\omega \cdot t)) \quad (31)$$

$$F4(H(t)) = F(H + h4 \cdot \cos(\omega \cdot t)) \quad (32)$$

А Фурье - преобразование соответственно

$$S(H, \omega) = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=0}^{N-1} F(H(t)) \cdot \cos(\omega \cdot t_i) \quad (33)$$

$$S2(H, \omega) = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=0}^{N-1} F2(H(t)) \cdot \cos(\omega \cdot t_i) \quad (34)$$

$$S3(H, \omega) = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=0}^{N-1} F3(H(t)) \cdot \cos(\omega \cdot t_i) \quad (35)$$

$$S4(H, \omega) = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=0}^{N-1} F4(H(t)) \cdot \cos(\omega \cdot t_i) \quad (36)$$

Построим первые гармоники.

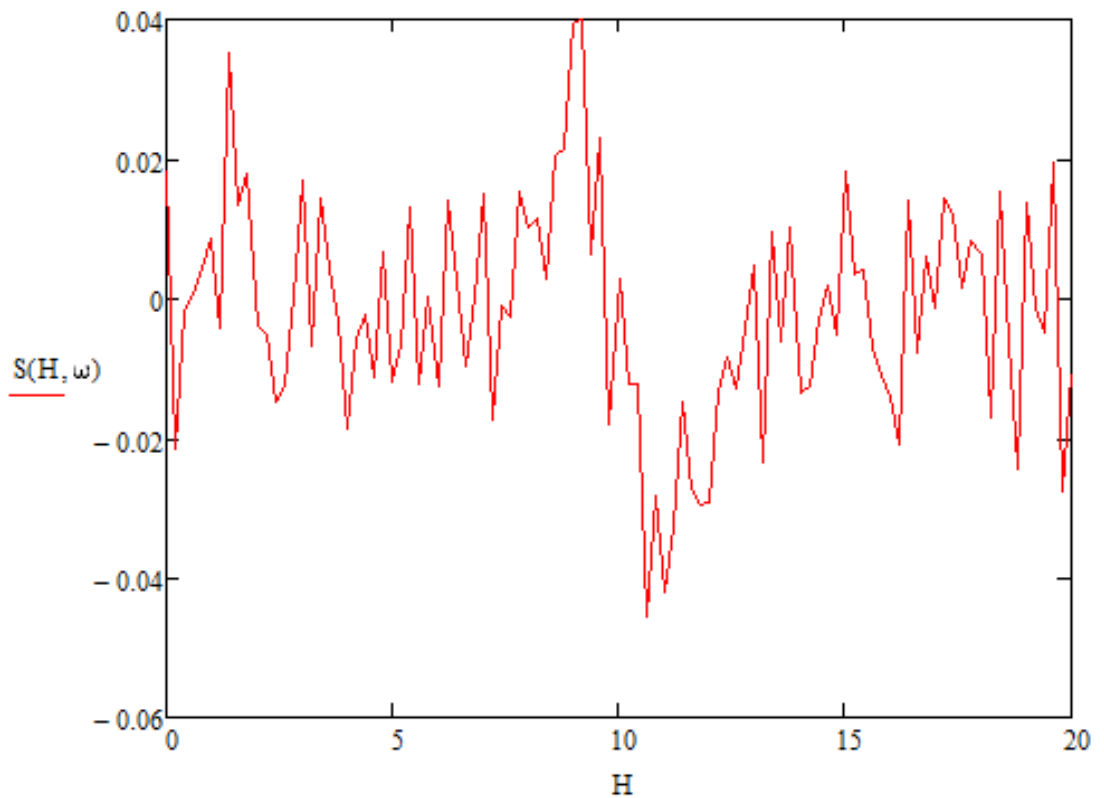


Рисунок 9 - Первая гармоника при наличии шума, амплитуда модуляции  $0.1dH$ , отношение сигнал/шум 6

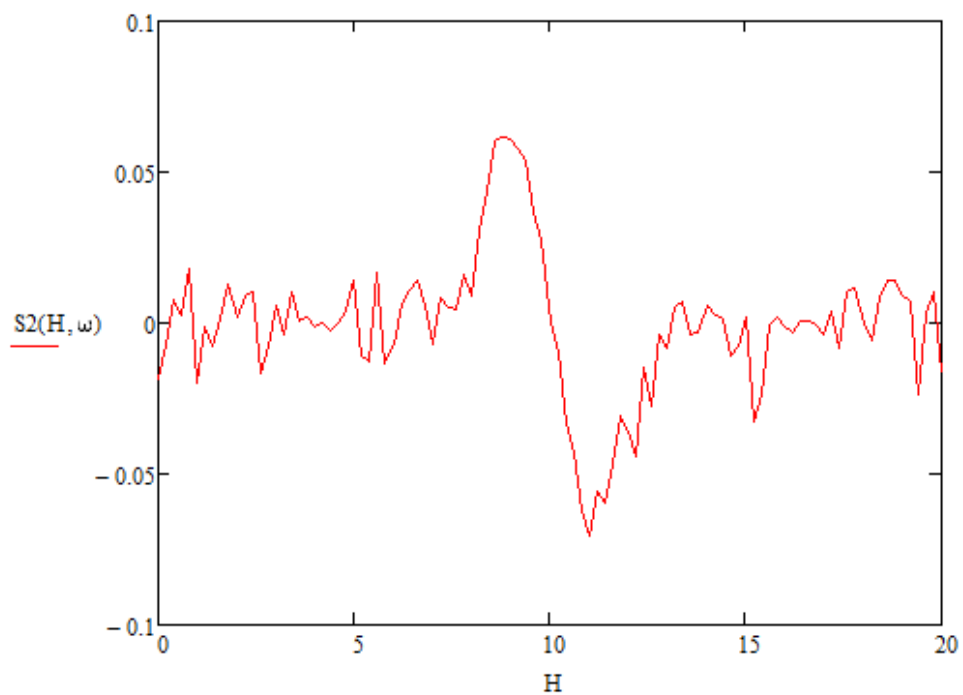


Рисунок 10 - Первая гармоника при наличии шума, амплитуда модуляции  $0.2dH$ , отношение сигнал/шум 12

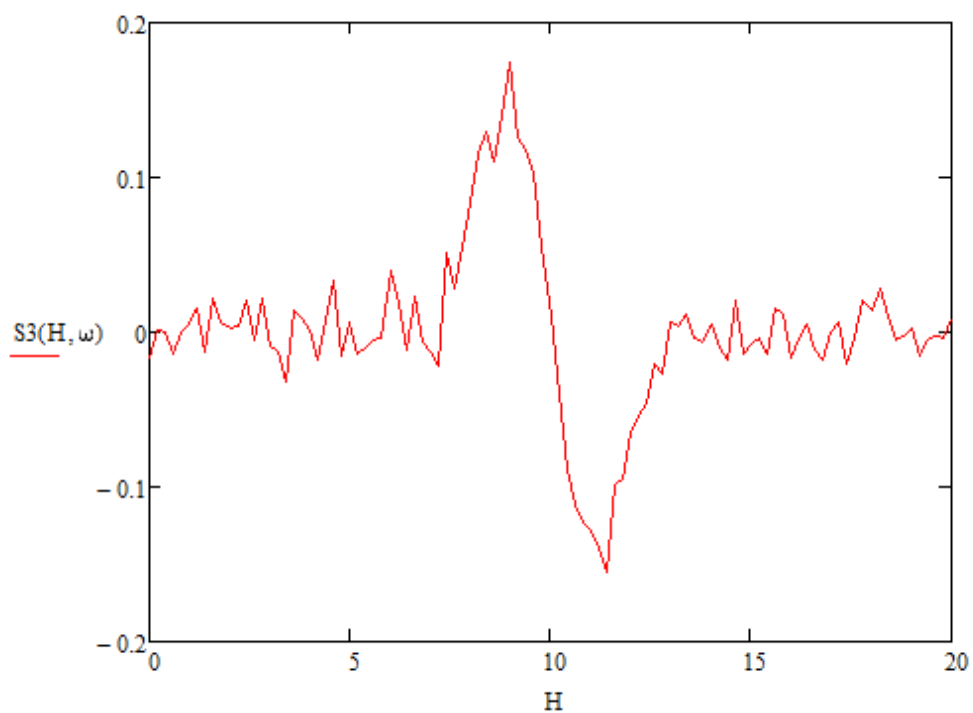


Рисунок 11 - Первая гармоника при наличии шума, амплитуда модуляции  $0.5dH$ , отношение сигнал шум 26

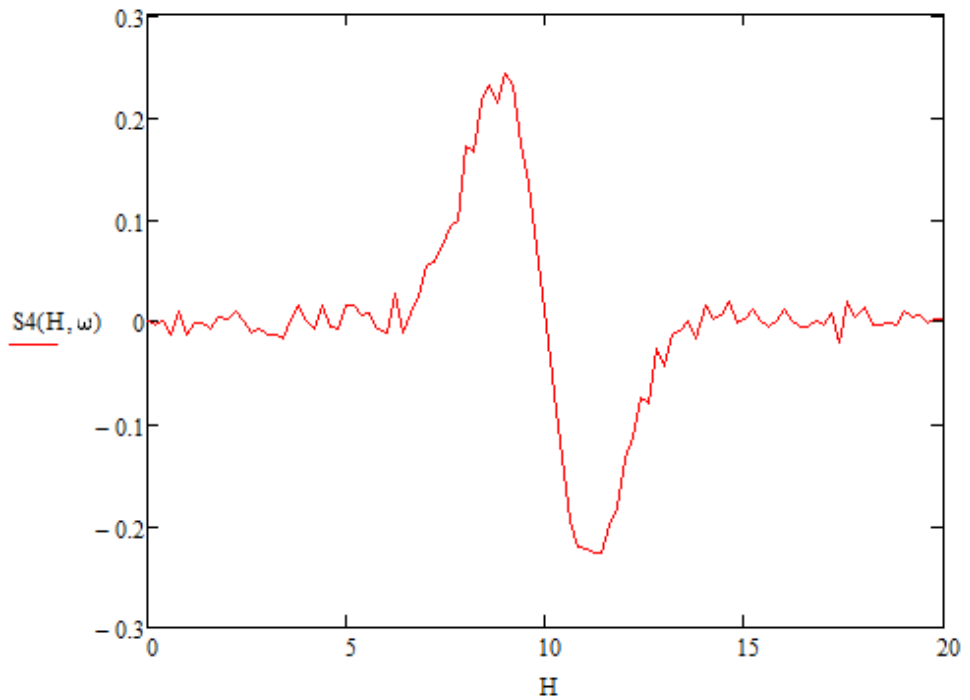


Рисунок 12 - Первая гармоника при наличии шума, амплитуда модуляции  $dH$ , отношение сигнал шум 43,6

Из рисунка 9 видно, что  $S(H, \omega)$  плохо проглядывается за шумами, кроме того если увеличить дисперсию шума, то сигнала с маленькой амплитудой модуляции видно не будет. На рисунке 10 первая гармоника  $S2(H, \omega)$  с амплитудой модуляции равной 0.2 ширины линии, становится интенсивнее, увеличивается отношение сигнал/шум. Можно сделать вывод, что при увеличении амплитуды модуляции улучшается отношение сигнал шум, но с другой стороны, как мы знаем, увеличение амплитуды модуляции ведет к искажениям.



### Глава 3. Коррекция модуляционного искажения

Вернемся к проблеме модуляционного уширения. Как было показано ранее, что бы избежать модуляционного уширения, амплитуда модуляции должна быть много меньше ширины линии. Тогда для выделения сигнала из помехи, необходимо использовать синхронный детектор. Блок схема с синхронным детектором представленная на рисунке 13 или схема с заменой самопишущего потенциометра на аналого-цифровой преобразователь (рисунок 14).



Рисунок 13 - Схема детектирования сигнала с самописцем.



Рисунок 14 - Схема детектирования сигнала с АЦП.

То есть использование АЦП не вносит ничего нового в процесс регистрации и обработки сигнала. Между тем цифровые методы обработки сигнала позволяют нам получить больше информации о форме сигнала. Действительно, отказ от синхронного детектирования и непосредственная оцифровка сигнала детектора с последующим Фурье преобразованием (рисунок 15) позволяет одновременно численно оценивать амплитуду не только первой, но и высших гармоник.

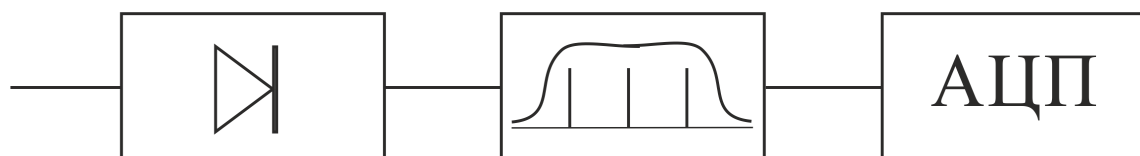


Рисунок 15 - Схема варианта с цифровой регистрацией.

Располагая такой информацией, можно корректировать модуляционные искажения, увеличивая, таким образом, отношение сигнал/шум.

Если ограничиться третьей гармоникой, то применение формул (15) и (17) позволяет получить более точное значение первой производной линии:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial F}{\partial H} \cdot h = S(\omega) - 3S(3\omega) \quad (37)$$

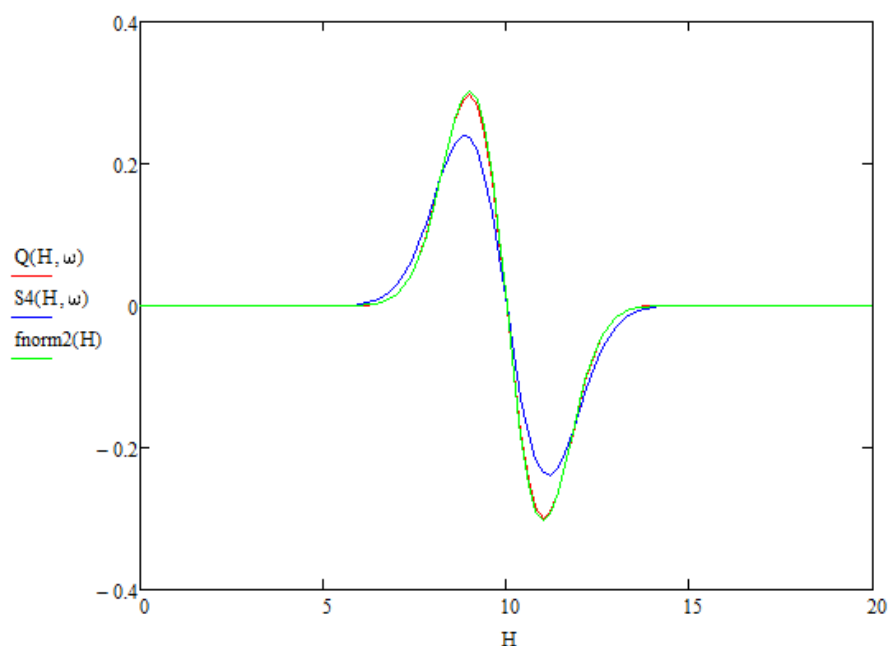


Рисунок 16 - коррекция модуляционного уширения.

На рисунке 16 показана коррекция формы первой производной линии с учетом (30), здесь  $S4(H, \omega)$  первая производная линии без коррекции,  $fnorm2(H)$  аналитически подсчитанная производная с учетом нормировки, и  $Q(H, \omega)$  первая производная линии с учетом третьей гармоники. Если амплитуда модуляции равна ширине линии, видно что  $Q(H, \omega)$  полностью совпадает с первой производной линии. Дальнейшие исследования показали, что учет третьей гармоники позволяет нам увеличивать амплитуду модуляции до размеров резонансной ширины. Затем, необходимо учитывать гармоники более высокого порядка. Как было показано ранее, увеличение

амплитуды модуляции приводит к увеличению отношения сигнал шум, но приводит к уширению формы линии. С учетом коррекции мы можем построить не искаженную форму линии и выиграть в соотношении сигнал шум (рисунок 17).

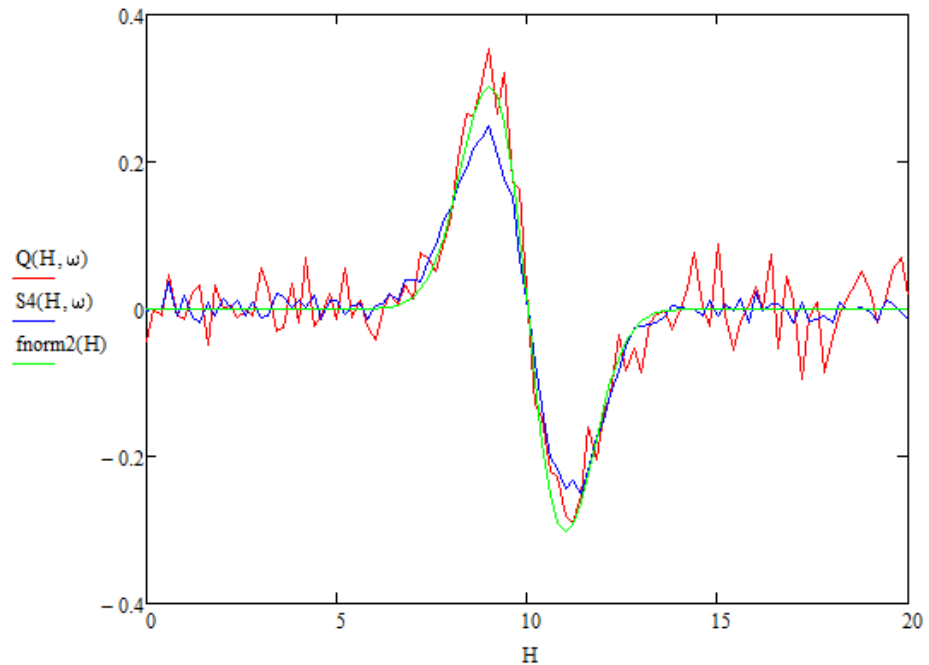


Рисунок 17 -  $Q(H, \omega)$  первая производная линии с учетом коррекции амплитуда модуляции равна ширине, отношение сигнал шум 18,75,  $fnorm2(H)$  нормированная первая производная линии подсчитанная аналитически.  $S4(H, \omega)$  первая гармоника при амплитуде модуляции равной ширине, отношение сигнал шум 43,6.

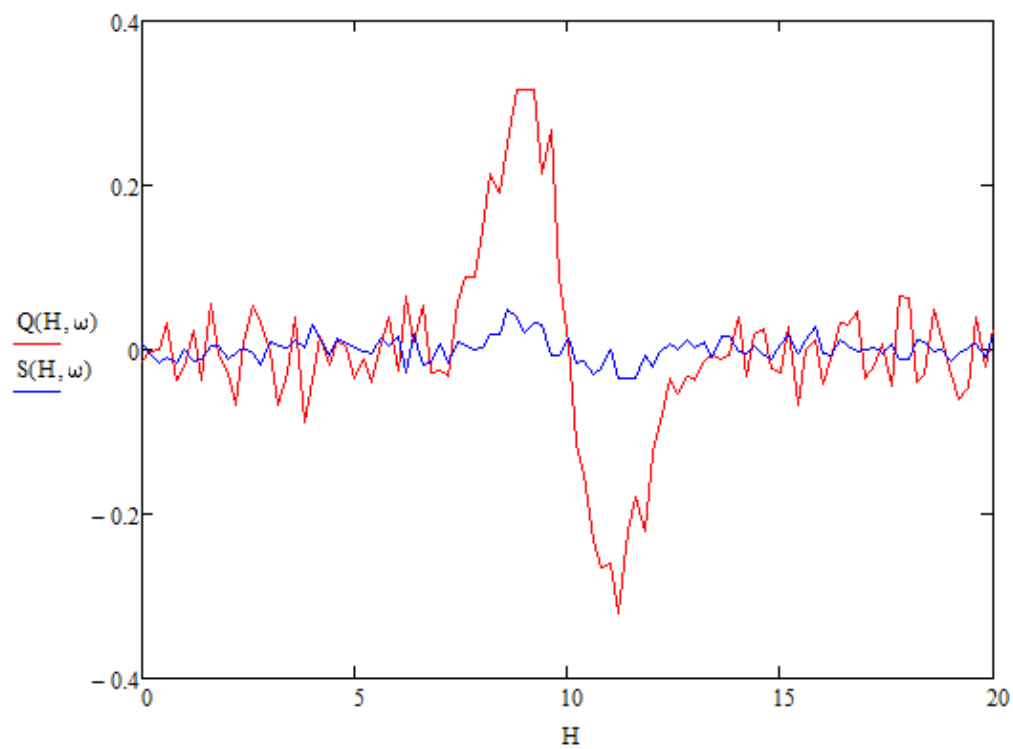


Рисунок 18 – сравнение первых производных линий,  $Q(H, \omega)$  с амплитудой модуляции равной ширине и  $S(H, \omega)$  с амплитудой модуляции равной 0,1 ширины.

### **Заключение:**

При увеличении амплитуды модуляции улучшается отношение сигнал/шум. С другой стороны, увеличение амплитуды модуляции магнитного поля приводит к модуляционному искажению. Проведенные исследования показывают, что связанные с большой амплитудой модуляции искажения, можно корректировать. Тем самым мы можем достигнуть большего соотношения сигнал шум и не исказить форму линии.

**Список использованных источников:**

1. Ч. Пул // Техника ЭПР – Спектроскопии / Мир.- 1970.- С. 206-241
2. <http://mathhelpplanet.com/static.php?p=predelnye-tyeoremy-tyeorii-veroyatnostyei>
3. Кирьянов Д.В. // Mathcad 15/Mathcad Prime 1.0 / БХВ-Петербург Год: 2012.