

## МЕТОД ПОБУДОВИ ЯДЕРНО-КВАДРУПОЛЬНОГО РЕЗОНАНСНОГО ТЕРМОМЕТРА НА ОСНОВІ ЦИФРОВИХ СИНТЕЗАТОРІВ

© Ростислав Волицький

Національний університет «Львівська політехніка»,  
кафедра інформаційно-вимірювальних технологій,  
вул. С. Бандери, 28а, 79013, Львів, Україна

*В рамках цієї роботи було розглянуто традиційні методи детектування ядерно-квадрупольного резонансу та запропоновано новий підхід до розроблення його вимірювального каналу. Даний канал базується на основі цифрових синтезаторів та цифрових елементів. Також було розглянуто недоліки і переваги даних методів.*

*As part of this work were considered traditional methods of detection of nuclear quadrupole resonance, and a new approach to the development of its measuring channel. This channel is based on the digital synthesizers and digital elements. It was also discussed the advantages and disadvantages of these methods.*

*В рамках этой работы были рассмотрены традиционные методы детектирования ядерно-квадрупольного резонанса и предложен новый подход к разработке его измерительного канала. Данный канал базируется на основе цифровых синтезаторов и цифровых элементов. Также были рассмотрены недостатки и преимущества данных методов.*

**Вступ.** Ядерно – квадрупольний резонанс (ЯКР) це метод спектроскопії, який був вперше описаний у роботі Демельта і Крюгера в 46-му році минулого століття [1]. За допомогою даного методу можна отримати детальну інформацію про фізико – хімічну будову певного кристалу речовини, а саме: симетрію кристалу, будову хімічних зв'язків, фазових переходів, міжмолекулярних з'єднань, дефектів та внутрішніх процесів кристалу [2, 3]. Даний метод становить величезний інтерес для фізиків і хіміків, так як він уможливорює розуміння суті і природи певної речовини.

Суть явища ЯКР криється у такому значенні, як ядерно квадрупольний момент. Ядерно квадрупольний момент це така величина, яка характеризується неідеальністю сферичної форми ядра. В кристалах під впливом ядерного квадрупольного з електричним полем електронних оболонок виникає орієнтація ядерних спінів у деякому напрямку. Якщо перпендикулярно даному напрямку накласти радіочастотне поле, частота якого рівна частоті переходу між рівнями квадрупольної енергії, то можна спостерігати поглинання потужності радіочастотного поля [4].

ЯКР є тісно пов'язаний з ядерно – магнітним резонансом. Міллер і Беррел у вступі до своєї статті прекрасно описують різни-

цю між цими двома явищами [5]. Весь матеріал цієї статті зводиться до того, що ключовою різницею між ЯМР та ЯКР є саме слово «зовнішній». Тобто, у ЯМР виникає зовнішнє магнітне поле, тому що дослідник використав свої зусилля, щоб прикласти дане поле до досліджуваного зразка, можливо використовуючи надпровідний електромагніт. У ЯКР, потрібне електричне поле (якщо більш точно, градієнт електричного поля), яке є самодостатнім: воно відображає місця розташування електронів навколо досліджуваного ядра, а іншими словами існує завжди. При даних умовах відбувається поглинання енергії зовнішнього поля, яке можна визначити, а отже і дізнатись про внутрішню структуру або процеси у кристалі за допомогою першого чи другого методу.

У відповідність до вказаних явищ, автор статті приводить хороший приклад: атомний електрон поглинає фотон певної частоти (тобто отримує порцію потрібної енергії) і переходить від стану спокою у збуджений стан, коли ж навпаки, то електрон випромінює фотон тієї ж самої частоти, щоб зрівноважити свою енергію.

У 1951 році Хорстом Байером було розроблено теорію температурної залежності частоти ЯКР у вибраному термометричному матеріалі [6]. Дана теорія базується на принципі ЯКР. Саме це стало поштовхом для

створення ядерно – квадрупольного термометра. Ця ідея була вперше запропонована такими вченими, як Крістофер Дін і Роберт Паунд [7].

**Ядерно-квадрупольний резонансний термометр.** Ядерно-квадрупольний резонансний термометр (далі ЯКР термометр) є складним сучасним електронним приладом, що дозволяє вимірювати абсолютну температуру з прецизійною точністю у широкому діапазоні. Термометр здатний вимірювати у діапазоні (77-425) К з точністю 0,001 К та у діапазоні (10-77) К з точністю 0,01 К. Нижче 10 К сигнал ЯКР термометра різко спадає і вимірювання стає неможливим.

У якості чутливого елемента (сенсора) термометра виступає хлорат калію (KClO<sub>3</sub>), так як цей елемент має високу хімічну стабільність. Саме ця сіль, на даний момент, найкраще задовольняє вимогам щодо побудови чутливого елемента ЯКР термометра. Сенсор ЯКР термометра одноразово відградуваний, не потребує періодичних перевірок і калібрування протягом всього періоду експлуатації. Також варто зазначити, що сенсор є чутливим до потужного магнітного поля. Хоч і дане магнітне поле не впливає на роботу сенсора але сигнал різко падає і розширюється, що не сприяє точному вимірюванню. Якщо напруженість магнітного поля перевищує 160 А/М, сигнал ЯКР практично зникає і термометр стає непрацездатним. Цю проблему можна вирішити шляхом екранування чутливого елемента пермалоевим екраном.

$$\text{Чутливість } S = \left. \frac{dF_{\text{ЯКР}}}{dT} \right|_{T=300 \text{ К}} = 5 \frac{\text{кГц}}{\text{град}},$$

при резонансній частоті ЯКР

$$F_{\text{ЯКР}} = (28 \pm 1) \text{ МГц.}$$

Спроекований ЯКР термометр не має аналогів в Україні та СНД і може бути виготовлений лише на замовлення, так як серійно не випускається.

Ремонт приладу може бути виконаний лише виробником або спеціалістом у даній галузі, що має спеціальну підготовку [8].

**Огляд існуючих методів вимірювання.** Найпоширенішим методом детектування ЯКР є використання аналогового LC генератора. Він використовується у схемах

автодинного детектора резонансу [2]. Схема ЯКР термометра на базі LC генератора представлена на рис. 1.

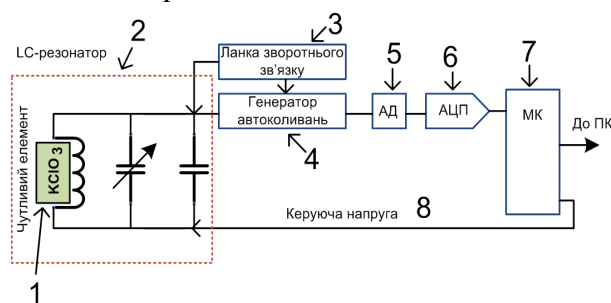


Рис.1. Схема ЯКР термометра на базі LC генератора (1-чутливий елемент, 2-LC – резонатор, 3-ланка зворотнього зв'язку, 4-генератор автоколиваний, 5-амплітудний детектор, 6-аналого - цифровий перетворювач, 7-мікропроцесор, 8-керуюча напруга)

Принцип роботи цієї схеми аналогічний принципу роботи гетеродинного індикатора резонансу. Чутливий елемент KClO<sub>3</sub>, у вигляді порошку чи монокристалу поміщається в індуктивну котушку. LC генератор задає коливання відповідної частоти. Перестройка частоти забезпечується зміною ємності LC контура. Для цього використовується варикап (варистор) на який подається нова керуюча напруга (головна ланка зворотнього зв'язку) з мікропроцесора (МК). Коли система, і відповідна котушка LC контура, працюють у резонансному режимі з чутливим елементом, відбувається зменшення амплітуди коливаний системи, яка фіксується амплітудним детектором (АД). Це явище зумовлене тим, що при переході ядер <sup>35</sup>Cl на вищий енергетичний рівень відбувається поглинання енергії від коливального контура [8]. Результати вимірювання амплітуди і частоти подаються на мікропроцесор. При зміні температури, змінюється резонансна частота чутливого елемента, що призводить до зміни амплітуди коливаний коливального контура або системи. Ця зміна фіксується амплітудним детектором і дані передаються на мікропроцесор. Мікропроцесор обробивши ці дані змінює керуючу напругу, щоб налаштувати коливальний контур на нову резонансну частоту.

Основні недоліки схеми ЯКР термометра на базі LC генератора:

1. Нестабільність в часі параметрів коливань.
2. Чутливість до впливу довкілля.
3. Конструктивна складність.
4. Високий рівень шумів.
5. Наявність нелінійних спотворень зумовлених використанням варисторів (варикапів).

Загалом ці недоліки є типовими для всіх аналогових LC генераторів. Тому в багатьох галузях широкого застосування набули генератори на основі цифрових систем.

Основною метою роботи є аналіз можливості використання цифрового синтезатора для побудови ЯКР термометра.

**Прямий цифровий синтез.** Прямий цифровий синтез (DDS) - відносно новий метод синтезу частоти, який появився в 70-х роках минулого століття. Всі методи синтезу доступні розробникам вже десятиліття, але тільки в останній час DDS надається пильна увага. Поява дешевих мікросхем повних DDS і зручних засобів розробки робить сьогодні їх привабливими для різних сфер застосування.

DDS унікальні своєю цифровою визначеністю: сигнал який згенерований DDS, синтезується з притаманною цифровим системам точністю. Частота, амплітуда і фаза сигналу в любий момент часу відомі і підконтрольні. Єдиним елементом який володіє властивим аналоговим схемам нестабільністю є цифро – аналоговий перетворювач (ЦАП). Все це являється причиною того, що в останній час DDS витісняють звичайні аналогові синтезатори частот (наприклад RLC контур).

Основні переваги DDS:

1. Цифрове управління частотою і фазою вихідного сигналу.
2. Дуже висока роздільна здатність по частоті і фазі.
3. Екстремально швидкий перехід на іншу частоту (фазу), переналаштування частоти без розриву фази, без викидів і інших аномалій, зв'язаних з часом встановлення.
4. Архітектура, яка базується на DDS, по причині малого кроку переналаштування по частоті, виключає необхідність використання точної підстройки опорної час-

тоти, а також забезпечує можливість параметричної температурної компенсації.

5. Цифровий інтерфейс дозволяє легко реалізувати мікроконтролерне управління.
6. Для квадратурних синтезаторів в наявності є DDS з I і Q виходами, які працюють узгоджено.

Частотна роздільна здатність DDS складає сотні і навіть тисячні долі герца при вихідній частоті порядку десятків мегагерц. Така роздільна здатність недоступна для інших методів синтезу. Іншою характерною особливістю DDS є дуже висока швидкість переходу на іншу частоту.

Як видно з представлених характеристик, DDS являють собою одну з найкращих схем для реалізації ЯКР термометра.

**Метод побудови ЯКР термометра на основі прямого цифрового синтезу.** Як було вказано раніше, на даний момент найбільшого поширення набули цифрові схеми прямого цифрового синтезу. Схема ЯКР на основі DDS представлена на рис. 2.

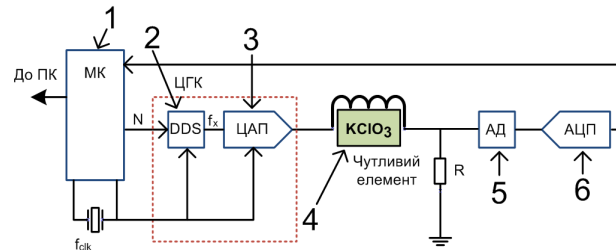


Рис. 2. Схема ЯКР на основі DDS

(1-мікроконтролер, 2-DDS,

3-цифро-аналоговий перетворювач,

4-чутливий елемент, 5-амплітудний де-

тектор, 6- аналого-цифровий перетворювач)

Управління і взаємодія з персональним комп'ютером (ПК) може здійснюватись за допомогою мікроконтролера (МК). DDS формує синусоїдний сигнал в цифровому вигляді заданої частоти. Ця частота задається мікроконтролером. Оскільки резонанс хлорату калію відбувається на частоті  $(28 \pm 1)$  МГц, тому потрібно використовувати високошвидкісний ЦАП (частота дискретизації повинна бути в десятки, сотні разів більша ніж частота резонансу.) Робота ЦАП, DDS і МК синхронізується зовнішнім кварцовим резонатором стабільної частоти ( $f_{clk}$ ), що забезпечує високу точність роботи сис-

теми в часі. Для забезпечення належної чутливості коливання на виході ЦАП підводиться до термочутливої речовини  $\text{KClO}_3$  за допомогою RL ланки (так, як і у випадку гетеродинної схеми описаної вище). АД визначає амплітуду коливаний, яка подається на МК. При зміні температури, МК на основі одержаних даних переналаштовує частоту синтезатора і забезпечує роботу системи на резонансній частоті. Як і у випадку гетеродинної схеми, функція МК полягає у забезпеченні глобального зворотнього зв'язку, тобто МК виконує роль слідкуючої системи.

**Висновки.** Здійснено огляд і проаналізовано існуючі методи ЯКР детекції, запропоновано структуру ЯКР на базі DDS. Даний метод побудови ЯКР термометрів може використовуватись у сучасних метрологічних системах, так як він показує такі переваги в порівнянні з аналоговим методом побудови:

1. Очікується суттєве зменшення впливу шумів, що є основним джерелом похибок існуючих систем.
2. Стабільна форма сигналу.
3. Вища точність частоти.
4. Спрощується будова ЯКР термометра, що відкриває можливість його виготовлення як частково – інтегральної схеми (котушку індуктивності замінити не можливо).
5. Оскільки частота задається з високою точністю то в схемі не використовується частотомір.

Наведені висновки свідчать про доцільність використання прямого цифрового син-

тезу при побудові ЯКР термометра та подальші можливості його удосконалення.

#### **Список використаної літератури:**

1. Dehmelt, H. G. & Kruger, H. Kurze Originalmitteilungen. Kernquadrupolfrequenzen in festem Diehloräthylen. Naturwiss. 37, 111-112. 1950.
2. В. С. Гречишкин, А. А. Шпилевой. Косвенные методы изучения ядерных квадрупольных взаимодействий в твердых телах. Успехи физических наук, т. 166, ном. 7. 1996.
3. Bryan H. Suits. Nuclear Quadrupole resonance spectroscopy. Physics Department, Michigan Technological University, Houghton, MI, USA. 2005.
4. В. С. Гречишкин. Ядерный квадрупольный резонанс. Успехи физических наук, т. LXIX, вып. 2., 189-216. 1959.
5. Joel B. Miller and Geoffrey A. Barrall. Explosives Detection with Nuclear Quadrupole Resonance. American Scientist, Volume 93, 50-57. 2005.
6. Bayer, H. Zur Theorie der Spingitterrelaxation in Molekülkristallen. Z. Physik 130, 227-238. 1951.
7. C. Dean and R. V. Pound. The Temperature Dependence of the Chlorine Quadrupole Coupling in Solid Benzene Compounds. J. Chem. Phys. 20, 195. 1952.
8. А. М. Леновенко, Ядерно – квадрупольный резонансный термометр ЯКРТ-5М. – Львів. – 2007.

Отримано 05.10.2012

# РЕЦЕНЗІЯ

на статтю

## МЕТОД ПОБУДОВИ ЯДЕРНО-КВАДРУПОЛЬНОГО РЕЗОНАНСНОГО ТЕРМОМЕТРА НА ОСНОВІ ЦИФРОВИХ СИНТЕЗАТОРІВ

© Ростислав Волицький

У статті ґрунтовно розглянуто недоліки і переваги традиційних методів детектування ядерно-квадрупольного резонансу та запропоновано новий підхід до розроблення його вимірювального каналу, побудованого на основі цифрових синтезаторів та цифрових елементів. Також було розглянуто недоліки і переваги даних методів.

Стаття може бути інформативною для спеціалістів різних напрямків, що займаються дослідницькою роботою у царині температурних досліджень.

науково-виробниче об'єднання  
«Термоприлад» ім. В. Лаха.  
Голова правління-генеральний директор

Олександр Петрович Гук