

А. СЮГИС

ТЕОРИЯ СПИНОВЫХ СТАБИЛИЗАТОРОВ ДЛЯ СПЕКТРОМЕТРОВ ЯМДР. ЧАСТОТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

С развитием спектроскопии ядерного магнитного двойного резонанса (ЯМДР) повышаются требования к стабилизаторам, обеспечивающим выполнение резонансного условия. Наиболее полно отвечают этим требованиям быстродействующие спиновые стабилизаторы (СС). Значительно уступает им комбинация медленного СС со стабилизатором потока [1]. Быстродействие СС может быть обеспечено наилучшим образом подстройкой частоты, которая иногда сопровождается медленной подстройкой поля [2], что, однако, может быть излишним [1, 3]. Наибольшим быстродействием обладают СС, использующие НЧ сигнал стабилизатора для модуляции аналитического образца (в дальнейшем: стабилизация модуляцией — СМ). Это — спиновые генераторы на боковой полосе (СГ на БП) с подстройкой или без подстройки частоты (или поля). СМ возможна и в пассивном СС (работающем от линии дисперсии) при условии достаточно быстродействующей подрегуловки.

В известных нам работах по теории СГ получены выражения для статического эффекта затягивания [4, 5], которые необходимо дополнить сведениями о переходных процессах по частоте. Теория пассивного СС с подрегуловкой поля дана в [6], а его комбинации со стабилизатором потока — в [7]. В настоящей работе предлагается объединенная теория быстродействующих СС — СГ с фазовой и частотной автоподстройкой (ФАП и ЧАП), а также пассивного СС.

1. Объединенная блок-схема

Для различных видов СС используются одни и те же конструктивные блоки, что позволяет составить одну блок-схему для всех разновидностей СС. Система (рис. 1) может работать в следующих режимах: 1) СГ без подстройки (с изменяющейся частотой БП); 2) пассивного СС; 3) СГ и ФАП (т. е. фазово-синхронизированного СГ); 4) СГ с ЧАП. Сопряжение СС со спектрометром (способы получения ВЧ полей, развертка, компоновка аналитического и стабилизирующего образцов) может быть различным и несущественно при рассмотрении работы самого СС.

2. Спиновый генератор без подстройки

2.1. Предположения. При составлении эквивалентной схемы для расчета характеристик СГ сделаны следующие предположения: 1) СГ работает всегда около центральной части линии ЯМР; 2) отсутствует смещение резонансного условия на БП из-за ВЧ поля H_1 (смещение Блоха—Зигерта) [8, 9]; 3) помехи поля ΔH_0 в месторасположе-

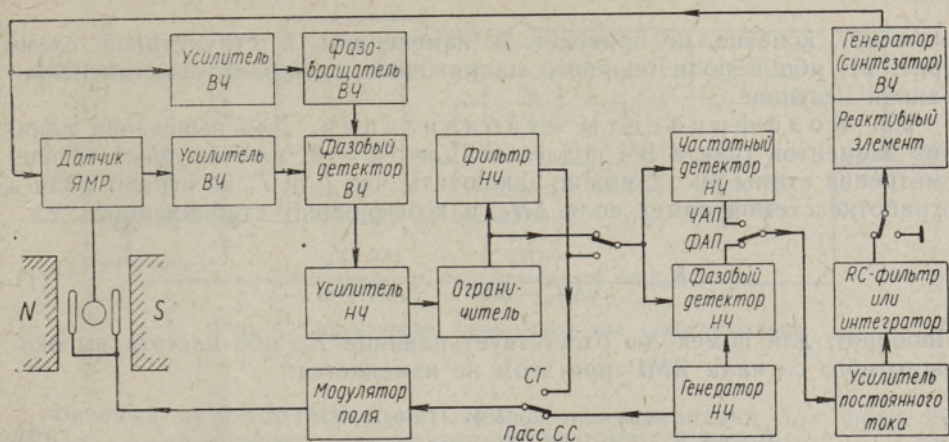


Рис. 1. Блок-схема спиновых стабилизаторов.

ниях стабилизирующего и аналитического образцов совпадают (о значении дифференциальной помехи для внешнего СС см. [1]); 4) отсутствует насыщение образца.

2.2. Структурная схема. Первое предположение позволяет заменять элементы ВЧ тракта (включая линию ЯМР) эквивалентными низкочастотными [10], а четвертое — применять операторный метод. Схема (рис. 2) составлена для частоты, т. е. отклонения «напряжения» на эквивалентной схеме соответствуют отклонениям частоты на исходной схеме. T_c — эффективная постоянная времени контуров ВЧ в датчике до образца ЯМР, а T_a и T_r — то же для ВЧ усилителей сигнала ЯМР и опорного напряжения. T_n и T_m — две основные постоянные времени цепей НЧ, например фильтра фазового детектора ВЧ и резонансного контура НЧ.

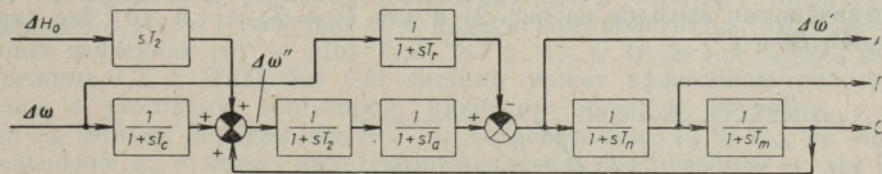


Рис. 2. Структурная схема спинового генератора без подстройки.

ВЧ передаточная функция линии ЯМР для изменения ВЧ ($\Delta\omega''$) может быть заменена ее низкочастотным аналогом — передаточной функцией RC-цепочки $1/(1+sT_2)$, где $1/T_2$ — техническая полуширина линии ЯМР. Изменения же частоты сигнала ЯМР для помех поля ΔH_0 описываются с помощью передаточной функции CR-цепочки $sT_2/(1+sT_2)$. Эти изменения аналогичны изменениям частоты входного напряжения или параметра резонансного контура.

Однако для помех частоты ВЧ генератора $\Delta\omega$ из-за разветвления напряжения через опорный канал на фазовый детектор ВЧ при предположении $T_2 \gg T_c, T_a, T_r$ передаточная функция CR-цепочки $1/(1+sT_2) - 1 = -sT_2/(1+sT_2)$. Таким образом, в данной системе помехи поля ΔH_0 и частоты генератора $\Delta\omega$ имеют одинаковые характеристики. Отсутствие отдельного опорного канала (амплитудное детекти-

рование), конечно, не приведет к изменениям в структурной схеме (рис. 2), ибо в роли опорного напряжения выступает нескомпенсированная несущая.

2.3. Коэффициенты стабилизации. Для выяснения влияния элементов тракта ВЧ полагаем $T_n = T_m = 0$. Уже из простого рассмотрения схемы рис. 2 можно заключить, что T_c и T_r не играют роли в обработке схемой помех поля ΔH_0 , и коэффициент стабилизации

$$K_{(s)} = \frac{\gamma \Delta H_0}{\gamma \Delta H_0 - \Delta \omega'} = \frac{1 + sT_a}{T_a/T_2 + sT_a} \quad (1)$$

Наоборот, для помех $\Delta \omega$ отсутствует влияние T_a , ибо частота высокочастотного сигнала ЯМР при этом не изменяется:

$$K_{(s)} = \frac{\Delta \omega}{\Delta \omega - \Delta \omega'} = \frac{1 + s(T_c + T_r) + s^2 T_c T_r}{(T_c - T_r)/T_2 + sT_r + s^2 T_c T_r} \quad (2)$$

Влияние элементов тракта НЧ одинаково для помех ΔH_0 и $\Delta \omega$. Допуская $T_a = T_c = T_r = 0$, в зависимости от точки съема информации получаем:

$$\text{выход A: } K_{(s)} = \frac{1 + s(T_n + T_m) + s^2 T_n T_m}{(T_n + T_m)/T_2 + sT_n T_m/T_2} \quad (3)$$

$$\text{выход B: } K_{(s)} = \frac{1 + s(T_n + T_m) + s^2 T_n T_m}{(T_n + T_m)/T_2 + sT_n + s^2 T_n T_m} \quad (4)$$

$$\text{выход C: } K_{(s)} = \frac{1 + s(T_n + T_m) + s^2 T_n T_m}{(T_n + T_m)/T_2 + s(T_n + T_m) + s^2 T_n T_m} \quad (5)$$

Для ΔH_0 , если $T_a \neq 0$ и $T_n = 0$, в формулах (4) и (5) T_n можно заменить на T_a . В качестве примера на рис. 3 показаны частотные характеристики коэффициента стабилизации $K_{(i\omega)}$ для случая $T_2 = 0,3$ сек, $T_n = 3 \cdot 10^{-6}$ сек и $T_m = 3 \cdot 10^{-3}$ сек (кривые A, B и C в соответствии с обозначениями выходов на рис. 2) и для $T_n = T_m = 1,5 \cdot 10^{-3}$ сек (кривые A', B' и C').

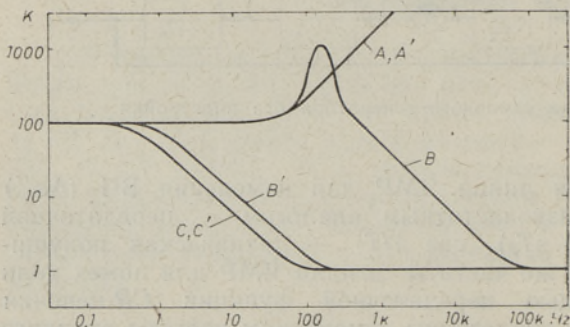


Рис. 3. Частотные характеристики коэффициента стабилизации спинового генератора без подстройки.

3. Спиновые стабилизаторы

3.1. Структурная схема. Составление эквивалентной схемы в части цепей ВЧ и линии ЯМР обсуждалось в разделе 2.1. Здесь оставлены только наиболее важные постоянные времени — T_2 и T_m (см. рис. 4).

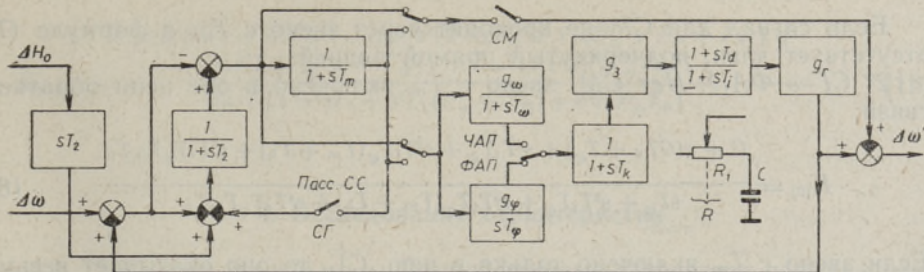


Рис. 4. Структурная схема спиновых стабилизаторов.

Фазовый детектор НЧ имеет коэффициент передачи для фазы g_{φ} (в/рад), а для частоты — передаточную функцию g_{ω}/sT_{φ} , где $T_{\varphi} = 1$ сек — постоянная времени фазового детектора. Частотный детектор (дискриминатор) НЧ обладает статическим коэффициентом передачи g_{ω} (в · сек/рад) и постоянной времени T_{ω} , обусловленной НЧ контурами частотного детектора. T_k — постоянная времени фильтра того или иного детектора, а g_3 — коэффициент усиления усилителя постоянного тока. За усилителем следует пропорционально-интегрирующая RC-цепочка, от параметров которой сильно зависят характеристики СС. Для этого звена $T_i = RC$, $T_d = R_1C$ и $q = T_d/T_i = R_1/R$. RC-цепочка может быть заменена электронным интегратором с аналогичными T_i , T_d и q . В этом случае R и C — элементы интегрирующей цепи, R_1 включен в цепь обратной связи последовательно с C , а в выражении передаточной функции отсутствует единица в знаменателе. Наконец, g_r (рад/сек · в) обозначает крутизну реактивного элемента.

Наличие ограничителя в схеме обеспечивает независимость работы схемы от интенсивности ЯМР сигнала и усиления ВЧ и НЧ трактов до ограничителя. Уровень ограничения учтен в g_{φ} или g_{ω} . Итак, статические коэффициенты усиления (открытой) петли обратной связи $G = g_{\varphi}g_3g_r/T_{\varphi}$ ($T_{\varphi} = 1$ сек) или $G' = g_{\omega}g_3g_r$. Предполагается, что в полученных формулах (6) — (15) $T_2, T_i \gg T_m, T_k$; $G, G' \gg 1$ и $GT_2/T_{\varphi} \gg 1$. В режиме СГ с ЧАП без СМ система может эффективно работать только с частотным детектором, имеющим большую крутизну, т. е. если T_{ω} того же порядка, что и T_2 , и, следовательно, $T_{\omega} \gg T_m, T_k$. Хотя уменьшение g_{ω} и может быть скомпенсировано увеличением g_3 , все же такая система обладает низкой помехоустойчивостью и высоким дрейфом. Для СГ с ЧАП и с СМ можно без снижения стабильности использовать и широкополосный частотный детектор ($T'_{\omega} \ll T_2, T_i$).

3.2. Коэффициенты стабилизации спиновых стабилизаторов.

1° Пассивный СС. Нет СМ:

$$K_{(s)} = \frac{GT_2/T_{\varphi} + s(GT_dT_2/T_{\varphi} + T_i + T_2) + s^2T_iT_2 + s^3T_iT_2(T_m + T_k) + s^4T_iT_2T_mT_k}{1 + s(T_i + T_2) + s^2T_iT_2 + s^3T_iT_2(T_m + T_k) + s^4T_iT_2T_mT_k}. \quad (6)$$

Во всех формулах члены, подчеркнутые волнистой линией, отсутствуют при применении интегратора (звено с T_i).

Есть СМ, но сигнал для СМ проходит через звено с T_m :

$$K_{(s)} = \frac{GT_2/T_{\varphi} + s(GT_dT_2/T_{\varphi} + T_i + T_2) + s^2T_iT_2 + s^3T_iT_2(T_m + T_k) + s^4T_iT_2T_mT_k}{1 + sT_i + s^2T_i(T_m + T_k) + s^3T_iT_2T_m + s^4T_iT_2T_mT_k}. \quad (7)$$

Если сигнал для СМ не проходит через звено с T_m , в формуле (7) отсутствует член, подчеркнутый прямой линией.

2° СГ с ФАП. Нет СМ; звено с T_m включено в обе цепи обратной связи:

$$K(s) = \frac{G + s(GT_d + T_\varphi) + s^2T_iT_\varphi + s^3T_iT_\varphi(T_m + T_h) + s^4T_iT_\varphi T_m T_h}{sT_\varphi + s^2T_iT_\varphi + s^3T_iT_\varphi(T_m + T_h) + s^4T_iT_\varphi T_m T_h}. \quad (8)$$

Если звено с T_m включено только в цепь СГ, то оно оказывает весьма незначительное влияние на $K(s)$, и более точную формулу с членами до четвертого порядка можно заменить формулой (8) при $T_m = 0$.

Есть СМ, но сигнал для СМ проходит через звено с T_m , включенное в обе цепи обратной связи:

$$K(s) = \frac{G + s(GT_d + T_\varphi) + s^2T_iT_\varphi + s^3T_iT_\varphi(T_m + T_h) + s^4T_iT_\varphi T_m T_h}{T_m/T_2(sT_\varphi + s^2T_iT_\varphi + s^3T_iT_\varphi T_2 + s^4T_iT_\varphi T_2 T_h)}. \quad (9)$$

Сигнал для СМ не проходит через звено с T_m , включенное только в цепь обратной связи СГ:

$$K(s) = \frac{G + s(GT_d + GT_m + T_\varphi) + s^2(GT_d T_m + T_i T_\varphi) + s^3T_iT_\varphi(T_m + T_h) + s^4T_iT_\varphi T_m T_h}{T_m/T_2(sT_\varphi + s^2T_iT_\varphi + s^3T_iT_\varphi T_h)}. \quad (10)$$

3° СГ с ЧАП. Нет СМ; звено с T_m включено в обе цепи обратной связи:

$$K(s) = \frac{G' + s(G'T_d + T_i + T_\omega) + s^2T_iT_\omega + s^3T_iT_\omega(T_m + T_h) + s^4T_iT_\omega T_m T_h}{1 + s(T_i + T_\omega) + s^2T_iT_\omega + s^3T_iT_\omega(T_m + T_h) + s^4T_iT_\omega T_m T_h}. \quad (11)$$

Если звено с T_m включено только в цепь СГ, то, как и в случае ФАП, пригодна формула (11) при $T_m = 0$.

Есть СМ, но сигнал для СМ проходит через звено с T_m , включенное в обе цепи обратной связи:

$$K(s) = \frac{G' + s(G'T_d + T_i + T_\omega) + s^2T_iT_\omega + s^3T_iT_\omega(T_m + T_h) + s^4T_iT_\omega T_m T_h}{T_m/T_2[1 + s(T_i + T_\omega + T_2) + s^2(T_iT_\omega + T_iT_2 + T_\omega T_2) + s^3T_iT_\omega T_2 + s^4T_iT_\omega T_2 T_h]}. \quad (12)$$

Сигнал для СМ не проходит через звено с T_m , включенное только в цепь обратной связи СГ:

$$K(s) = \frac{G' + s(G'T_d + G'T_m + T_i + T_\omega) + s^2(G'T_d T_m + T_i T_\omega) + s^3T_iT_\omega(T_m + T_h) + s^4T_iT_\omega T_m T_h}{T_m/T_2[1 + s(T_i + T_\omega) + s^2T_iT_\omega + s^3T_iT_\omega T_h]}. \quad (13)$$

СГ с ЧАП, использующий частотный детектор с малой крутизной, т. е. $T'_\omega \ll T_i, T_2$, эффективен только в случае применения СМ; способ включения звена с T_m для (14) и (15) такой же, как и для (12) и (13) соответственно:

$$K(s) = \frac{G' + s(G'T_d + T_i) + s^2T_i(T'_\omega + T_m + T_h) + s^3T_i(T'_\omega T_m + T'_\omega T_h + T_m T_h) + s^4T_iT'_\omega T_m T_h}{T_m/T_2[1 + s(T_i + T_2) + s^2T_iT_2 + s^3T_iT_2(T'_\omega + T_h) + s^4T_iT'_\omega T_2 T_h]}; \quad (14)$$

$$K(s) = \frac{G' + s(G'T_d + G'T_m + T_i) + s^2[G'T_dT_m + T_i(T'_\omega + T_m + T_k)] + s^3T_i(T'_\omega T_m + T'_\omega T_k + T_m T_k) + s^4T_iT'_\omega T_m T_k}{T_m/T_2[1 + sT_i + s^2T_i(T'_\omega + T_m) + s^3T_iT'_\omega T_k]} \quad (15)$$

4. Исследование характеристик

4.1. Анализ режимов. Данной системе четвертого порядка присуща потенциальная возможность самовозбуждения на двух наборах постоянных времени. Аналитически это соответствует двум парам комплексных корней характеристического уравнения (числитель в формулах

Режим	Величина	Пассивный СС	СГ с ФАП	СГ с ЧАП
O_1	$q >$	$\frac{T_m + T_k}{T_i}$ $-\frac{T_\varphi}{G} \left(\frac{1}{T_2} + \frac{1}{T_i} \right)$	$\frac{T_m + T_k}{T_i} - \frac{T_\varphi}{G T_i}$	$\frac{T_m + T_k}{T_i}$ $-\frac{T_\varphi}{G'} \left(\frac{1}{T_\omega} + \frac{1}{T_i} \right)$
	$\Omega_1^2 =$	$\frac{1/T_2 + 1/T_i}{T_m + T_k - T_d}$	$\frac{1/T_i}{T_m + T_k - T_d}$	$\frac{1/T_\omega + 1/T_i}{T_m + T_k - T_d}$
L_1	$T_i >$	$2T_2(2GT_2/T_\varphi - 1)$	Всегда колебательно	$2T_\omega(2G' - 1)$
	$\tau_1 =$	$\frac{2T_i T_2}{GT_d T_2/T_\varphi + T_i + T_2}$	—	$\frac{2T_i T_\omega}{G'T_d + T_i + T_\omega}$
O_2	$q <$	$\frac{T_\varphi}{G} \left(\frac{1}{T_m} + \frac{1}{T_k} \right)$		$\frac{T_\omega}{G'} \left(\frac{1}{T_m} + \frac{1}{T_k} \right)$
	$\Omega_2^2 =$		$\frac{1}{T_m T_k}$	
L_2	$q <$	$\frac{T_\varphi}{9G} \left(\frac{1}{T_k} + \frac{1}{3T_m} \right)$		$\frac{T_\varphi}{9G'} \left(\frac{1}{T_k} + \frac{1}{3T_m} \right)$
	$\tau_2 =$		$3T_k$	

Примечания. 1. При условии $q < [3G(T_m + T_k)]^{-1}$. 2. Для $T_k > T_m$; для $T_k < T_m$ поменять местами T_k и T_m .

Подчеркнутые волнистой линией члены отсутствуют при применении интегратора.

для $K_{(s)}$. Для не слишком малого T_i обе пары корней при изменении отношения $q = T_d/T_i$ станут независимо друг от друга чисто мнимыми. Уменьшение q может сопровождаться «нижним» самовозбуждением (см. таблицу, режим O_1) на более низкой частоте Ω_1 , увеличение q — «верхним» самовозбуждением на более высокой частоте (режим O_2 , частота Ω_2). При достаточном удалении от границы самовозбуждения возникает режим лимитационного движения по данному виду колебаний ($L_{1,2}$), что соответствует двум совпадающим корням характеристического уравнения. В таблице для этого случая приведены и постоянные времени ($\tau_{1,2}$) переходного процесса, который имеет вид $\Delta\omega'(t) \sim 1 - (1 - t/\tau) \exp(-t/\tau)$. Наличие СМ, конечно, не влияет на режим СС. Для СГ и ЧАП по формулам (14) и (15) и частотным детектором с малой крутизной проблема самовозбуждения значительно менее остра и не рассматривается.

В процессе «нижнего» самовозбуждения не участвует член с s^4 и поэтому поведение системы при $T_m = 0$ (система третьего порядка) аналогичное. Однако для «верхнего» самовозбуждения необходим член с s^4 (не участвует член без s) и поэтому при уменьшении T_m граница самовозбуждения быстро продвигается «вверх».

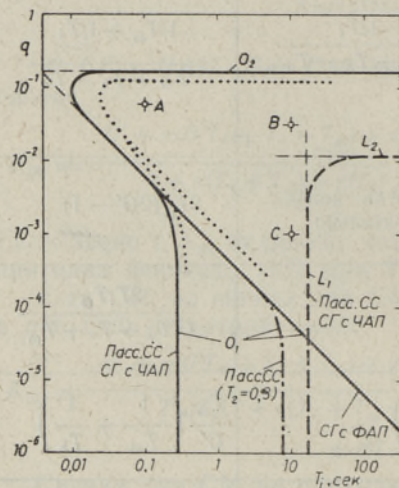


Рис. 5. Диаграмма границ устойчивости и критического затухания.

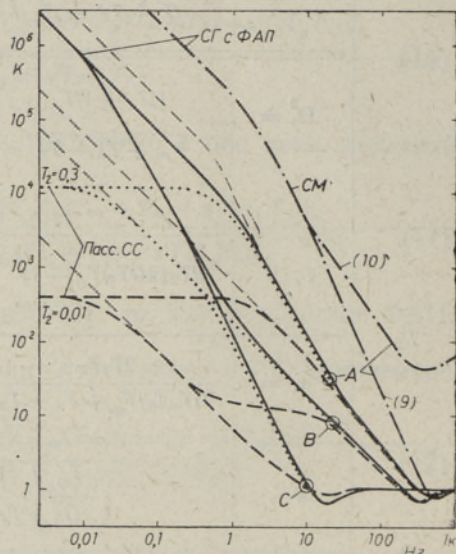


Рис. 6. Частотные характеристики коэффициента стабилизации спинных стабилизаторов.

4.2. Примеры и сравнение с экспериментом. Границы режимов самовозбуждения ($O_{1,2}$) и критического затухания ($L_{1,2}$) графически изображены на рис. 5 для случая $G = 4 \cdot 10^4$, $T_m = T_k = 3 \cdot 10^{-4}$ сек, $T_2 = 0,01$ сек (для СГ с ФАП или ЧАП T_2 не имеет значения). Для СГ с ЧАП кривые совпадают с кривыми для пассивного СС при $G' = GT_2 = 400$ и $T_\omega = T_2 = 0,01$ сек. Показано также изменение «нижней» границы для пассивного СС при $T_2 = 0,3$ сек. Разница между кривыми для случая RC-цепочки или интегратора (звено с T_i) составляет только 5% и на рис. 5 не показана. Экспериментально определенная граница самовозбуждения при тех же самых параметрах обозначена точечной кривой. Более узкая область устойчивой работы объ-

является не учитываемыми теорией несколькими дополнительными постоянными времени ($< 3 \cdot 10^{-5}$ сек).

На рис. 6 показаны частотные характеристики коэффициента стабилизации $K = |K_{(i\omega)}|$ для трех режимов, обозначенных на рис. 5 точками А, В и С для случая RC-цепочки. Тонкие штриховые линии соответствуют случаю пассивного СС с интегратором. Экспериментальные кривые совпадают с вычисленными для $K > 1$, но имеют больший выброс в сторону $K < 1$, ибо реальная система находится ближе к границе самовозбуждения. Показано также влияние использования СМ (пунктирные кривые) в соответствии с формулами (9) и (10).

5. Выводы

1. Быстродействие спиновых стабилизаторов (СС), а также спинового генератора определяется постоянными времени схемных элементов. Максимально достигаемое быстродействие не зависит от ширины линии ЯМР.

2. Максимальное быстродействие одинаково для всех видов СС. Использование НЧ сигнала стабилизатора для модуляции аналитического образца позволяет повышать быстродействие также всех видов СС. Улучшение стабилизации при использовании этого сигнала для модуляции было обнаружено экспериментально в датчике спектрометра ЯМДР с кольцевым образцом для СС [11] даже в случае максимально быстрой подстройки частоты.

3. Выражения для коэффициента стабилизации с членами до четвертого порядка описывают правильно все существенные особенности данных видов СС.

ЛИТЕРАТУРА

1. Sūgis A., Alla M., Изв. АН ЭССР, Физ. Матем., 17, № 4, 426 (1968).
2. Data Sheet for Spin Decoupler V-6058A, Varian Ass., USA, 1967.
3. Сюгис А., Липпмаа Э., Изв. АН ЭССР, Физ. Матем., 16, № 1, 81 (1967).
4. Веселаго В. Г., Косичкин Ю. В., Радиотехника и электроника, 8, № 7, 1165 (1963); Умарходжаев Р. М., Изв. вузов, Радиофизика, 7, № 6, 1207 (1964); Иевская Н. М., Умарходжаев Р. М., Электричество, № 7, 57 (1965); Морозов А. А., в сб. ЯМР, № 1, Лен. ун-т, 1965, 138.
5. Earl Law Sloan III, Ganssen A., LaVier E. C., Appl. Phys. Lett., 4, No. 6, 109 (1964).
6. Müller-Warmuth W., Servoz-Gavin P., Nucl. Instr. Meth., 4, No. 2, 90 (1959); Sasaki Y., Jap. J. Appl. Phys., 2, No. 10, 641 (1963).
7. Drescher K., Garte D., Exp. Tech. Phys., 11, Nr. 2, 109 (1963).
8. Anderson W. A., Rev. Sci. Instr., 33, No. 11, 1160 (1962).
9. Любимов А. Н., Померанцев Н. М., ЖТФ, 38, № 12, 2054 (1968).
10. Евтянов С. И., Радиотехника, 3, № 4, 26 (1948).
11. Сюгис А., Алла М., Изв. АН ЭССР, Физ. Матем., 18, № 2, 252 (1969).

Институт кибернетики
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
28/1 1969

A. SUGIS

TMTR-SPEKTROMEETRITE SPINSTABILISATORITE TEOORIA. SAGEDUSKARAKTERISTIKAD

Esitatakse ühtne struktuuri skeem ja stabilisatsioonikoefitsiendi avaldised kolme liiki spinstabilisaatorite jaoks.

*A. SÜGIS***THEORY OF SPIN STABILIZERS FOR NMDR SPECTROMETERS.
FREQUENCY RESPONSE**

NMDR spectrometers require the usage of very fast-acting stabilizers. For that reason, stabilizers with frequency regulation are considered. An integrated block diagram (Fig. 1) has been composed for passive spin stabilizer, for spin generator with automatic phase control, and for spin generator with automatic frequency control. On the basis of structural diagrams (Figs 2 and 4), expressions of the coefficients of stabilization have been derived for spin generator without control (1)—(5) and for the kinds of spin stabilizers mentioned above (6)—(15). An analysis of the conditions of self-excitation and critical damping has been carried out (see Table). Plots of the critical conditions (Fig. 5) and frequency dependence of the coefficients of stabilization (Figs 3 and 6) have been presented.