

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ «ЛЬВІВСЬКА ПОЛІТЕХНІКА»

САМІЛА АНДРІЙ ПЕТРОВИЧ



УДК 621.373.52:539.1.078

**СТРУКТУРНИЙ ТА ФУНКЦІОНАЛЬНИЙ СИНТЕЗ
РАДІОЕЛЕКТРОННИХ ЗАСОБІВ ІМПУЛЬСНОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ
МАТЕРІАЛІВ З КВАДРУПОЛЬНИМИ ЯДРАМИ АТОМІВ**

05.12.13 – радіотехнічні пристрої та засоби телекомунікацій

АВТОРЕФЕРАТ
дисертації на здобуття наукового ступеня
доктора технічних наук

Львів – 2018

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана у Чернівецькому національному університеті імені Юрія Федьковича Міністерства освіти і науки України.

Науковий консультант: доктор технічних наук, професор
Політанський Леонід Францович,
Чернівецький національний університет імені
Юрія Федьковича,
завідувач кафедри радіотехніки та інформаційної
безпеки.

Офіційні опоненти: доктор технічних наук, професор
Дружинін Володимир Анатолійович,
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря
Сікорського»,
професор кафедри радіоприймання
та оброблення сигналів;

доктор технічних наук, доцент
Полікаровських Олексій Ілліч,
Хмельницький національний університет,
професор кафедри телекомунікацій
і комп'ютерно-інтегрованих технологій;

доктор технічних наук, професор
Голяка Роман Любомирович,
Національний університет «Львівська
політехніка»,
професор кафедри електронних засобів
інформаційно-комп'ютерних технологій.

Захист дисертації відбудеться “02” березня 2018 р. о 12³⁰ год. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.052.10 у Національному університеті «Львівська політехніка» за адресою: 79013, м. Львів, вул. Степана Бандери, 12, ауд. 226 головного навчального корпусу.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Національного університету «Львівська політехніка» за адресою: 79013, м. Львів, вул. Професорська, 1.

Автореферат розісланий “31” січня 2018 р.

*Учений секретар
спеціалізованої вченої ради*



І.В. Демидов

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Швидкий розвиток інтегральної електроніки та високопродуктивних алгоритмів обробки інформаційних повідомлень стимулює прогрес в області фізичного експерименту. Це особливо спостерігається в галузях радіофізики, хімії, медицини, біології та інших.

Методи імпульсної Фур'є та релаксаційної спектроскопії ядерного квадрупольного резонансу набувають актуальності при дистанційному виявленні резонансних сигналів ізотопу ^{14}N в твердих речовинах (наркотичні та вибухові речовини в неметалевих контейнерах). Отримані з допомогою ЯКР результати також є унікальними при вивченні складних мультиплетних спектрів, що є характерними для шаруватих напівпровідників внаслідок політипних модифікацій їх кристалічної структури.

Роботи закордонних науковців охоплюють широкий спектр досліджень в галузі ЯКР спектроскопії: розроблення експериментальних методів та апаратури спостереження ЯКР, розвиток апаратно-програмних засобів цифрового оброблення сигналів спінової індукції в реальному часі, дослідження внутрішньомолекулярної структури речовин та їх фізико-хімічних властивостей, розроблення ЯКР детекторів вибухівки і наркотичних речовин, ЯКР-томографія тощо. Це підтверджує актуальність теми дисертаційної роботи. Великий внесок у розвиток теоретичних засад та науково-технічної бази резонансної спектроскопії ЯКР зробили вчені R.T. Pound, F.N.H. Robinson, Michael S. Adler, Tara P. Das, В.С. Гречішкін. Експериментальними розробками інтенсивно займаються науково-дослідні центри в США, Німеччині, Японії, Китаї, Росії.

Аналіз існуючих методів ЯКР спектроскопії показав, що серійне обладнання для ЯКР аналізу представлено лише декількома провідними корпораціями – SpinCore, Tectag, Bruker, Varian та ін. Вартість таких вимірювальних комплексів досягає сотень тисяч умовних одиниць, що в певній мірі ускладнює їх використання в науково-дослідних центрах України. Незначну кількість наукових робіт з тематики розроблення апаратних методів ЯКР-радіоспектроскопії у дослідженнях вітчизняних науковців (Леновенко А.М., Яценко А.В., Хандожко О.Г.) можна пояснити складністю апаратури спостереження та реєстрації ядерних резонансних процесів.

Перспективним в даному напрямку є розроблення недорогих портативних спектрометрів з інтегрованим обчислювальним ядром, що базуються на нових алгоритмах інформаційних перетворень сигналу спаду вільної індукції в передавально-приймальному тракті та візуалізації спектрів ЯКР.

При цьому значну увагу варто приділити підвищенню значення відношення сигнал/шум, що забезпечується спектрометром, до необхідного рівня для безпомилкового детектування сигналу ЯКР у досліджуваних речовинах малого об'єму з масою від десятих долей до декількох грам та розробленню високоєфективних методів формування спеціальних багатоімпульсних послідовностей наносекундних часових інтервалів для стохастичної методики ЯКР.

Актуальність теми дисертаційної роботи значною мірою визначається варіативністю прикладного застосування методу ЯКР. Висока точність та ін-

формативність даного методу уможливило його ефективне впровадження в різних галузях науки і техніки – матеріалознавство (дослідження симетрії, структури, фазових переходів та аналіз дефектності кристалів); твердотільна електроніка (контроль структури напівпровідників при створенні на їх основі радіаційно-стійких пристроїв); боротьба з тероризмом та національна безпека (дистанційне виявлення вибухових на наркотичних речовин).

Науково-прикладною проблемою, розв'язанню якої присвячена дисертаційна робота, є покращення сигнальних характеристик (чутливості, точності, ширини реєстрованого спектру) із одночасним збереженням енергетичних характеристик (інтенсивності радіочастотного випромінювання) радіоелектронних засобів імпульсної спектроскопії ЯКР шляхом синтезу їх структурних, конфігураційних та принципівих електричних схем.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.

Дослідження, результати яких представлені у дисертаційній роботі, проводились у відповідності до поточних та перспективних планів наукової роботи кафедри радіотехніки та інформаційної безпеки Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича: «Фізико-технологічні проблеми радіотехнічних пристроїв та засобів телекомунікацій і інформаційних технологій» (2014-2015 рр., номер державної реєстрації №0111U000183); «Методи та засоби передавання, оброблення і зберігання інформації в інфокомунікаційних системах» (2016-2017 рр., номер державної реєстрації №0116U001433) та держбюджетної тематики «Розробка портативного цифрового багатоімпульсного спектрометра ЯКР для дослідження сенсорних властивостей, структури, дефектності шаруватих та органічних напівпровідників» (2017 р., номер державної реєстрації №0117U001148), у якій автор задіяний як відповідальний виконавець.

Мета та задачі дослідження. Метою дисертаційної роботи є синтез структурних, конфігураційних та принципівих електричних схем радіоелектронних засобів імпульсної спектроскопії ядерного квадрупольного резонансу із покращеними сигнальними та енергетичними характеристиками.

Для досягнення мети необхідно було вирішити наступні завдання:

1. Провести аналіз існуючих експериментальних методів спостереження ядерного квадрупольного резонансу в діапазоні частот від ~ 2 до 1000 МГц;
2. Синтезувати базову структуру портативного когерентного однокотушкового спектрометра ЯКР, що забезпечує виявлення імпульсним методом мікрвольтних сигналів спаду вільної індукції в діапазоні частот 1 – 50 МГц;
3. Розробити імітаційну модель імпульсного методу спостереження ЯКР та провести дослідження перетворень сигналу вільної індукції в радіочастотних трактах радіоспектрометра при синусоїдальному та шумовому збудженні резонансу, що надасть змогу виявити шляхи оптимізації імпульсного методу для спостереження широкосмугових мультиплетних спектрів ЯКР;
4. Забезпечити ефективне загасання перехідного процесу в приймальній котушці коливального контуру та приймальному тракту радіоспектрометра для імпульсного спостереження ЯКР у досліджуваних зразках малого об'єму за рахунок надійного закривання приймального тракту в паузах між імпульсами

зондування (до 100 дБ для частоти-носія);

5. Шляхом рознесення опорної частоти синхронного детектора і частоти заповнення імпульсу збудження та використання синхронізації їх початкових фаз підвищити точність відтворення форми широкосмугових спектрів ЯКР та послабити вплив на приймальний тракт спектрометра паразитної завади, частота якої дорівнює частоті імпульсу зондування;

6. Розробити метод формування когерентних із частотою-носієм цифрового синтезатора частот імпульсів збудження з довільними часовими інтервалами в діапазоні від 100 нс до 10 с з метою адаптації методів релаксаційної та імпульсно-резонансної спектроскопії для вимірювання динамічних характеристик і дефектів кристалічної ґратки структур шаруватих напівпровідників;

7. Синтезувати віртуальний інструмент візуалізації і оброблення сигналів ядерної спінової індукції для проведення радіофізичних експериментів у галузях ШПФ-ЯКР та релаксаційної спектроскопії;

8. Розробити метод експрес-ідентифікації спектрів ЯКР з виявленням окремих спектральних складових на заздалегідь невідомих частотах квадрупольного резонансу;

9. Розробити метод підвищення енергетичної ефективності високочастотного передавача імпульсного радіоспектрометра ЯКР шляхом оптимізації режимів роботи його активних елементів;

10. Провести експериментальні випробування лабораторного макету портативного радіоспектрометра з покращеними сигнальними та енергетичними характеристиками шляхом дослідження якості та вивчення сенсорних властивостей напівпровідникових монокристалів шаруватої структури.

Об'єктом дослідження дисертаційної роботи є процес реєстрації та обробки сигналів спаду спінової індукції в функціональних вузлах імпульсного Фур'є радіоспектрометра ядерного квадрупольного резонансу.

Предметом дослідження є принципи, методи і структури радіоелектронних засобів імпульсної спектроскопії ядерного квадрупольного резонансу.

Методи дослідження. В дисертаційній роботі використано методи й основні положення теорії радіотехнічних систем (для розроблення наукових основ конструювання радіочастотного тракту спектрометра), теорії цифрових автоматів (для синтезу машини станів ядра системи керування спектрометром), методи параметричної комп'ютерної ідентифікації (при моделюванні сигнальних перетворень сигналу вільної індукції та спінової луни в радіочастотних трактах імпульсного радіоспектрометра), методи синтаксису моделювання динамічних режимів структур (при розробленні конфігураційних структур ПЛІС), методи числового моделювання (при моделюванні топології напруженості високочастотного поля в робочій зоні прийомо-передавальної колушки спектрометра), методи графічного об'єктно-орієнтованого програмування (при розробленні конфігураційних структур ПЛІС та синтезі віртуального інструмента СЗД), методи радіоспектроскопії ядерного квадрупольного резонансу (при ідентифікації експериментальних спектрів ЯКР та інтерпретації результатів досліджень напівпровідникових кристалів), методи експериментальних досліджень та статистичної обробки результатів.

Наукова новизна роботи:

1. Вперше запропоновано метод підвищення точності відтворення форми широкосмугових спектрів ЯКР шляхом пригнічення до 100 дБ перехідного процесу в приймальній котушці вхідного пристрою спектрометра, який, на відміну від існуючих, забезпечує послаблення впливу на приймальний тракт паразитної завади з частотою імпульсів зондування, що уможливило синтез структури портативного когерентного радіоспектрометра ЯКР.

2. Вперше запропоновано високочутливий метод реєстрації сигналів ЯКР, що відрізняється від існуючих рознесенням опорної частоти синхронного детектора і частоти заповнення імпульсу збудження із забезпеченням синхронізації їх початкових фаз, що забезпечило синтез конфігураційної структури програмованого кристалу для реалізації чутливого цифрового приймача сигналів ЯКР з шириною смуги до 1 МГц та амплітудами меншими 10 мкВ у діапазоні частот ЯКР 0,5 – 50 МГц.

3. Вперше запропоновано метод формування когерентних із частотою-носієм синтезатора імпульсів збудження з довільними часовими інтервалами в діапазоні від 100 нс до 10 с за рахунок формування послідовностей кодів миттєвої лінійно-змінної фази сигналу 48-бітним акумулятором фази, який відрізняється від відомих мінімізацією часу затримки сигналу до 20 нс в структурі програмованого кристалу, що уможливило синтезування структури формувача імпульсних послідовностей для радіоспектроскопічних та релаксаційних методик в ЯКР.

4. Вперше запропоновано метод керування імпульсним спектрометром ЯКР, що відрізняється від відомих перехідними та вихідними функціями синтезованої машини кінцевих станів цифрового апаратно-програмного ядра. Це надає змогу автоматизувати радіофізичні експерименти за рахунок формування та передавання інформаційних пакетів даних на пристрої виконання портативного імпульсного радіоспектрометра за допомогою зовнішнього інтерфейсу зі швидкістю до 10 Мбіт/с.

5. Вперше запропоновано метод експрес ідентифікації спектрів ЯКР, який відрізняється від відомих застосуванням шумового збудження та проведенням статистичного кореляційного аналізу усереднених ітерацій крос-кореляційних функцій псевдовипадкових послідовностей і сигналів спаду вільної індукції за Пірсоном, що дало змогу покращити ймовірності безпомилкової реєстрації імпульсного відгуку ядерної системи.

6. Набула подальшого розвитку модель однокотушкового когерентного Фур'є-радіоспектрометра в якій ЯКР-підсистема описується передавальною функцією, що є Фур'є-образом імпульсного відгуку мультирезонансної коливної системи. Це дало змогу вперше здійснити параметричну ідентифікацію перетворень сигналу вільної індукції в радіочастотному тракті імпульсного Фур'є-радіоспектрометра при синусоїдальному та шумовому збудженнях ЯКР у матеріалах з квадрупольними ядрами атомів.

7. Набув подальшого розвитку метод підвищення енергетичної ефективності високочастотного широкосмугового передавача радіоспектрометра за

рахунок забезпечення режиму імпульсного зміщення активних елементів проміжного і вихідного каскадів, внаслідок чого потужності розсіювання для радіоімпульсів шпаруватістю $10 \leq S \leq 1000$ знизилися на 45,8 – 98,39 %.

8. Набув подальшого розвитку метод сканування ЯКР у видовжених зразках із застосуванням передавально-приймальної котушки сідлоподібної форми, який відрізняється від відомих обмеженням робочої зони сканування зразків до 28,12% від повного об'єму котушки. Це дало змогу зменшити об'єм сканування монокристалічних злитків до $12 \times 18 \times 10$ мм³.

9. Вперше встановлено, що в напівпровідникових кристалах *GaSe* та *InSe* спостерігається лінійні залежності частоти ЯКР від температури в інтервалі 20 – 130 °С (з точністю $\pm 0,05$ °С) та одновісного тиску в напрямку оптичної вісі *c* в діапазоні 50 – 100 кг/см². Також досліджено можливість визначення напрямку дії та оцінки величини індукції слабкого (0 – 10 Гс) зовнішнього магнітного поля унаслідок розщеплення резонансних ліній ЯКР ⁶⁹Ga та ¹¹⁵In. Це уможливило розроблення чутливих і високоточних ЯКР сенсорів на основі запропонованого портативного радіоспектрометра з покращеними сигнальними та енергетичними характеристиками.

Практичне значення одержаних результатів. За рахунок результатів досліджень, отриманих у даній роботі набув подальшого розвитку імпульсний метод виявлення сигналів ЯКР із застосуванням швидкого перетворення Фур'є сигналів спінової індукції.

1. Запропонований метод експрес-ідентифікації спектрів ЯКР, що полягає у збудженні резонансу короткими імпульсами з шумовим заповненням та статистичному обробленні крос-кореляційних функцій ПВП та СВІ, може ефективно застосовуватись в імпульсних спектрометрах ЯКР з ШПФ на частотах, що не виходять за межі робочого діапазону частот приймача спектрометра.

2. Розроблені принципова схема та конфігураційна структура ПЦСЧ на базі ПЛІС EP4CE15E22C8 та цифро-аналогового перетворювача AD9772AST із вбудованими інтерполяційними фільтрами уможливають виготовлення функціонально завершених генераторів гармонічних сигналів у діапазоні частот до 75 МГц з низьким рівнем спектральних складових вищих порядків для радіотехнічних та телекомунікаційних пристроїв і систем.

3. Алгоритм функціонування та структура формувача імпульсних послідовностей на базі ПЛІС EP4CE15E22C8 будуть використані при розробленні нових багатоімпульсних методик для систем реєстрації подвійних ЯКР-ЯМР і ЯКР-ЯКР резонансів, багатовимірної ЯКР спектроскопії, а також ЯКР-томографії напівпровідникових приладів твердотільної електроніки.

4. Лабораторний макет енергоефективного ширококутового передавача з робочим діапазоном частот 1 – 50 МГц та середньою вихідною потужністю 400 – 500 Вт може бути використаним при розробленні ЯКР детекторів вибухових та наркотичних речовин. Крім того, елементи конструкції та застосована елементна база запропонованого передавача уможливають його інтеграцію в портативні телекомунікаційні системи бездротового наземного зв'язку

КХ та УКХ діапазонів як альтернативи більш дорогим закордонним аналогам.

5. Цифрова система керування імпульсним Фур'є радіоспектрометром ЯКР лабораторного типу з реалізацією її головних функціонально-алгоритмічних методів на базі ПЛІС Cyclone EP1C12F324 може бути застосована як універсальна апаратна база для розроблення інтерактивних меню та користувальницьких інтерфейсів радіотехнічних пристроїв категорії «Смарт» шляхом модифікації структури машинного автомату та інтеграції необхідних функціональних модулів.

6. Запропонована апаратно-програмна реалізація компактної СЗД для імпульсного спектрометра ЯКР, апаратні рішення якої базуються на основі мультипротокового USB–245FIFO перетворювача, забезпечує передавання даних зі швидкістю до 480 Мб/с по двох незалежних каналах в одному апаратному інтерфейсі, що дозволяє її використання у вимірювальній системі на ПК з обмеженим числом USB портів (ноутбук, планшетний ПК).

7. Синтезовано віртуальний інструмент LabVIEW для візуалізації та оброблення даних сигналів ядерної спінової індукції на базі засобів графічного об'єктно орієнтованого програмування. Застосування запропонованої СЗД в портативних радіоспектрометрах ЯКР дає змогу суттєво знизити вартість лабораторного обладнання для проведення радіофізичних експериментів у галузях ШПФ-ЯКР та релаксаційної спектроскопії.

8. Формування синхроімпульсу запуску уможливорює використання розробленої СЗД у режимі багатократного експерименту з метою цифрового накопичення і усереднення даних. Показником високої інформативності запропонованої СЗД є візуалізація складних мультиплетних спектрів ЯКР з шириною смуги до 7,5 МГц та роздільною здатністю за частотою ≈ 200 Гц.

9. Використовуючи розроблені засоби імпульсної спектроскопії експериментально встановлено, що в напівпровідникових кристалах *GaSe* та *InSe* спостерігаються лінійні залежності частоти ЯКР від температури в інтервалі 20 – 130 °С (з точністю $\pm 0,05$ °С) та одновісного тиску в напрямку оптичної вісі *c* в діапазоні 50 – 100 кг/см². Також досліджено можливість визначення напрямку дії та оцінки величини індукції слабкого (0 – 10 Гс) зовнішнього магнітного поля унаслідок розщеплення резонансних ліній ЯКР ⁶⁹Ga та ¹¹⁵In. Це уможливорює розроблення чутливих і високоточних ЯКР сенсорів на основі запропонованого портативного радіоспектрометра з покращеними сигнальними та енергетичними характеристиками.

Представлені автором в дисертаційній роботі наукові та практичні результати впроваджені: у Львівському Науково-виробничому підприємстві “Карат” для дослідження структури кристалів напівпровідникових матеріалів та епітаксійних структур при розробленні технологій отримання новітніх матеріалів; в Чернівецькому відділенні Інституту проблем матеріалознавства імені І.М. Францевича Національної академії наук України для визначення за допомогою спектрів ЯКР співвідношення політипів у кристалах *InSe* і *GaSe* при розробленні технологій модифікації напівпровідникових кристалів A³B⁶; в Чернівецькому національному університеті імені Юрія Федьковича у навчальних

курсах «Генерування і формування сигналів» та «Засоби передавання інформації в системах технічного захисту інформації».

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 46 наукових праць. З них 1 монографія у співавторстві; 15 статей у наукових журналах та збірниках наукових праць, що включені до Переліку наукових фахових видань України; 8 статей у наукових періодичних виданнях інших держав; 19 тез та матеріалів доповідей на конференціях. 5 наукових статей та 3 тезисні доповіді проіндексовано у міжнародній наукометричній базі WEB OF SCIENCE, 8 наукових статей та 3 тезисні доповіді проіндексовано у міжнародній наукометричній базі Scopus, 6 наукових статей проіндексовано у міжнародній наукометричній базі Index Copernicus. Отримано три патенти України на корисну модель. Аналіз внеску автора в публікації з питань, висвітлених у дисертації, показав, що внесок А.П. Саміли є вирішальним.

Особистий внесок здобувача. Основні наукові результати дисертаційної роботи отримано автором самостійно. У працях, опублікованих у співавторстві, авторові належать:

[1] – розроблення теоретичних основ удосконалених методів релаксаційної та імпульсно-резонансної спектроскопії кристалічних структур на основі шаруватих та органічних напівпровідників, глибина проблемної постановки ґрунтується на дослідженні якості напівпровідникових монокристалів шаруватої структури та вивченні їх сенсорних властивостей із застосуванням лабораторного макету радіоспектрометра ЯКР, реалізованого на основі багатофункціонального програмно-керованого цифрового обчислювального ядра; [2, 4] – вирішення проблеми енергоефективності високочастотного передавача портативного ЯКР спектрометра при імпульсному збудженні резонансу шумовими сигналами, моделювання та розроблення схемотехніки пристрою; [5, 27] – застосування удосконаленого методу імпульсного ЯКР для визначення якості напівпровідникового кристалу шаруватої структури; [6, 28, 34] – розроблення алгоритмів формування багатоімпульсних послідовностей, конфігураційної структури ПЛІС та схемних і конструкторсько-топологічних рішень цифрового обчислювального ядра спектрометра; [8, 10, 33, 35, 44, 45] – застосування розроблених методів релаксаційної та імпульсно-резонансної спектроскопії для реєстрації температури на основі монокристалів селеніду галію та індію; [9, 24, 29, 30, 39] – участь у дослідженнях сенсорних властивостей шаруватих напівпровідників, комп'ютерне оброблення експериментальних даних; [11] – вивчення ефективності теоретико-числового базису алгоритмів синтезу цифрових періодичних сигналів, розвиток наукових основ побудови генератора періодичних сигналів на основі вбудованих апаратних систем; [13, 26] – розроблення засобів послаблення проникнення паразитного сигналу з частотою зондуючого імпульсу у приймальний тракт спектрометра; [15, 31, 38] – автором запропоновано реалізувати універсальну апаратно-програмну платформу для відлагодження та проектування систем з великим ступенем інтеграції на програмованому кристалі; [16, 32] – розроблено метод реалізації, алгоритми функціонування, конфігураційну структуру ПЛІС та схемні рішення цифрової системи керування імпульсним спектрометром ЯКР; [17] – розроблення стру-

ктурної схеми та конфігураційної структури ПЛІС для ПЦСЧ з мінімальним вмістом спектральних складових вищих порядків; [18, 36] – запропоновані схемотехнічні рішення імпульсного когерентного спектрометра ЯКР з ефективним придушенням перехідного процесу в приймальному тракті; [19, 37] – розрахунок температурної залежності частоти ЯКР ^{63}Si в Si_2O від температури; [20] – постановка завдання дослідження та співставлення результатів детектування ЯКР методами неперервного та імпульсного спостереження; [21, 40, 41, 46] – постановка завдання та схемотехнічне моделювання високочастотного тракту синхронного детектування слабких сигналів; [22] – розроблення методу пригнічення синхронної завади, створеної зміною полярності магнітного поля; [23] – запропоновано математичні основи аналізу шумових та сигнальних характеристик детектора сигналів ЯКР; [25] – розроблення імітаційної моделі методу імпульсного спостереження ядерного квадрупольного резонансу на основі представлення ЯКР-підсистеми спектрометра узагальненою передавальною характеристикою у випадку збудження умов резонансу коротким одиничним δ -імпульсом; [42, 43] – дослідження спектрів ЯКР ^{115}In у шаруватій сполуці *InSe*.

Апробація результатів дисертації. Результати досліджень, що приведені в дисертації, були представлені на 19 наукових та науково-практичних конференціях: міжнародна наукова конференція «Актуальные проблемы физики твердого тела» ФТТ-2011 (Мінськ, НАН Республіки Білорусь, ІФТТ, 2011); 2-а, 3-а та 4-а міжнародна науково-практична конференція «Фізико-технологічні проблеми радіотехнічних пристроїв, засобів телекомунікацій, нано- та мікроелектроніки» PREDT (Чернівці, ЧНУ ім. Ю. Федьковича, 2012, 2013, 2014); 15-а та 16-а відкрита науково-технічна конференція ІТРЕ НУЛП з проблем електроніки та інфокомунікаційних систем (Львів, НУ «Львівська політехніка», 2012, 2013); науково-практична конференція «Інформаційно-вимірні технології та системи» (Київ, НАУ, 2013); 11-а, 12-а міжнародна SPIE конференція «International Conference on Correlation Optics» (Чернівці, ЧНУ ім. Ю. Федьковича, 2013, 2015); 13-а міжнародна науково-технічна конференція «Вимірні та обчислювальні техніки в технологічних процесах» ВОТТІ-13 (Одеса-Затока, ОНАЗ ім. О.С. Попова, ХНУ, 2014); 12-а та 13-а міжнародна IEEE конференція «Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications, and Computer Science» (TCSET) (Львів-Славське, НУ «Львівська політехніка», 2014, 2016); 5-а міжнародна науково-практична конференція «Фізико-технологічні проблеми передавання, оброблення та зберігання інформації в інфокомунікаційних системах» PREDT (Чернівці, ЧНУ ім. Ю. Федьковича, 2016).

Структура та обсяг роботи. Робота складається з переліку умовних скорочень, вступу, шести розділів, висновків, списку використаних джерел і 5 додатків. Загальний обсяг роботи складає 330 сторінок друкарського тексту, із них 148 рисунків, 10 таблиць, список використаних джерел із 223 найменувань, 5 додатків на 33 сторінках. Додатки містять електричні принципові схеми, коди програмного забезпечення, акти впровадження результатів дисертаційної роботи, а також список праць автора.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі наведена загальна характеристика роботи, обґрунтовано актуальність теми досліджень, сформульовані мета та завдання досліджень, розкритий зв'язок роботи з науковими планами та програмами, вказана новизна та практична цінність отриманих результатів, відзначений особистий внесок автора, наведені дані про апробацію та практичне впровадження, публікації та структуру роботи.

У першому розділі – «Ядерний квадрупольний резонанс та методи неруйнівного контролю параметрів первинних матеріалів електронної техніки» – проведено аналіз сучасного стану розвитку методів радіоспектроскопії ядерного квадрупольного резонансу, серед широкого загалу яких під об'єкт дослідження дисертаційної роботи підпадають імпульсні методи, що базуються на основі перетворення Фур'є сигналів спаду вільної індукції.

Проведено аналіз праць вітчизняних та закордонних вчених, присвячених дослідженню процесів реєстрації та оброблення сигналів СВІ в функціональних вузлах імпульсного Фур'є радіоспектрометра ЯКР. Наукові праці охоплюють широкий сегмент імпульсної спектроскопії: розроблення експериментальних методів дослідження, розвиток програмно-апаратних засобів цифрового оброблення сигналів спаду вільної індукції, розробка детекторів вибухових та наркотичних речовин, резонансна комп'ютерна томографія та інше.

У імпульсній апаратурі для пошуку невідомих сигналів квадрупольного резонансу, необхідно зберігати постійними фазові співвідношення між сигналами спінової системи і опорним сигналом на будь-якій частоті робочого діапазону спектрометра. В спектрометрах когерентного типу можна застосовувати синхронне детектування сигналу з подаванням опорного сигналу безпосередньо на вхід приймального пристрою. При цьому основним джерелом фазових спотворень є тракт передавання. Забезпечення мінімальних фазових спотворень можливо шляхом зменшення числа каскадів у тракті та забезпечення їх широкосмуговості.

Метод подвійного ядерного квадрупольного резонансу в слабкому магнітному полі використовується у випадку, якщо чутливість прямих методів є недостатньою при розташуванні резонансних ліній поглинання в області низьких частот або при малій концентрації квадрупольних ядер у сполуці. Для підвищення чутливості детектування сигналів відклику вибухових речовин застосовується методи крос-релаксаційної спектроскопії. Перевагою методу подвійного резонансу з крос-релаксацією є можливість проведення досліджень при кімнатній температурі без радіочастотного опромінювання квадрупольної системи. В силу того, що в методі подвійного резонансу з крос-релаксацією спостерігається розширення резонансних ліній в магнітному полі, його застосування для дослідження мультиплетних широкосмугових спектрів є практично неможливим.

Двочастотні методи ядерного квадрупольного резонансу забезпечують суттєве підвищення інформативності резонансних спектрів та хорошу роздільну здатність, однак чутливість 2М-експериментів не може перевищувати чутливість 1М-експериментів при однакових вихідних умовах. Необхідну розділь-

ну здатність для широкосмугового спектру можна отримати і при використанні прямого імпульсного детектування, тому цей метод представляє найбільший інтерес в багатьох практичних застосуваннях.

Розроблення нових методів прямого імпульсного детектування представляє значний інтерес науковців за рахунок можливості досягнення чутливості експерименту, співставної з методом подвійного резонансу при збереженні високої точності та інформативності спектрів. Відсутність котушок магнітної модуляції та застосування сучасної компонентної бази забезпечить зниження вартості та масо-габаритних показників обладнання і уможливить його ефективне впровадження в різні галузі науки та виробництва, а саме:

- матеріалознавство (дослідження симетрії, структури та фазових переходів у кристалах, аналіз дефектності кристалів);
- твердотільна електроніка (контроль структури шаруватих та органічних напівпровідників, створення на їх основі радіаційно-стійких пристроїв);
- боротьба з тероризмом та національна безпека (дистанційне виявлення вибухових та наркотичних речовин);
- радіотехніка та комунікаційні технології (алгоритми формування і оброблення інформаційних сигналів на основі програмованих логікових інтегральних схем) і т. ін.

У другому розділі – «**Моделі радіотехнічних систем імпульсного когерентного спектрометра ЯКР та параметрична ідентифікація сигнальних перетворень в його трактах**» – розглядається моделювання функціональних систем для імпульсного спостереження ЯКР, пропонуються нові принципи побудови радіочастотних трактів спектрометра та метод ідентифікації багатокомпонентних спектрів при гармонійному та шумовому збудженні резонансу.

Математична модель сигналу СВІ для k -ї резонансної частоти, що реєструється на контурі спектрометра ЯКР після дії радіочастотного 90° -го імпульсу збудження має наступний вигляд:

$$y(t) = A \sum_{k=1}^d K_k e^{-[\beta_k + i\omega_k(T)]t} + n(t), \quad (1)$$

де A – загальна амплітуда, величина якої визначається потужністю сигналу збудження; K_k – масштабний коефіцієнт для амплітуди k -ї компоненти; β_k – коефіцієнт загасання сигналу, що залежить від тривалості релаксаційних процесів у спіновій системі; $\omega_k(T)$ – резонансна частота ЯКР при температурі T ; $n(t)$ – шумова складова сигналу СВІ.

Для моделювання сигнальних перетворень у радіочастотних трактах спектрометра розроблено імітаційну модель прямого імпульсного методу спостереження ЯКР в програмному середовищі MATLAB Simulink (рис. 1). Модель, яка включає високочастотний передавач, тракт приймання та блок вимірювання побудована за принципом реалізації однокотушкового когерентного радіоспектрометра ЯКР без перетворення частоти-носія.

Формула (2) відображає математичну модель мультисегментної квадрупольної луни, що реєструється на контурі спектрометра ЯКР при збудженні зразка m -тим 180° -м імпульсом. Після дії 180° -го імпульсу фази обертання ядерних

спінів зміняться на протилежні. Внаслідок цього в момент часу t_g після збудження виникає сигнал луни, що зменшується з часом за законом $\exp(-t/T_2)$. В результаті збудження спін-луни послідовністю, що складається з 1-го 90° -го та серії з m 180° -х імпульсів сигнал відгуку описується наступною функцією:

$$y^m(t) = A \sum_{k=1}^d K_k e^{-\eta_k(T)(t+m \cdot 2t_g)} e^{-\beta_k |t-m \cdot 2t_g + t_g| + i\omega_k(T)t} + n(t), \quad (2)$$

де $\eta_k(T)$ – коефіцієнт загасання сигналу луни, що залежить від величини T_2 зразка; t_g – часовий інтервал між першим та другим імпульсами збудження; $2t_g$ – часовий інтервал після дії другого імпульсу збудження.

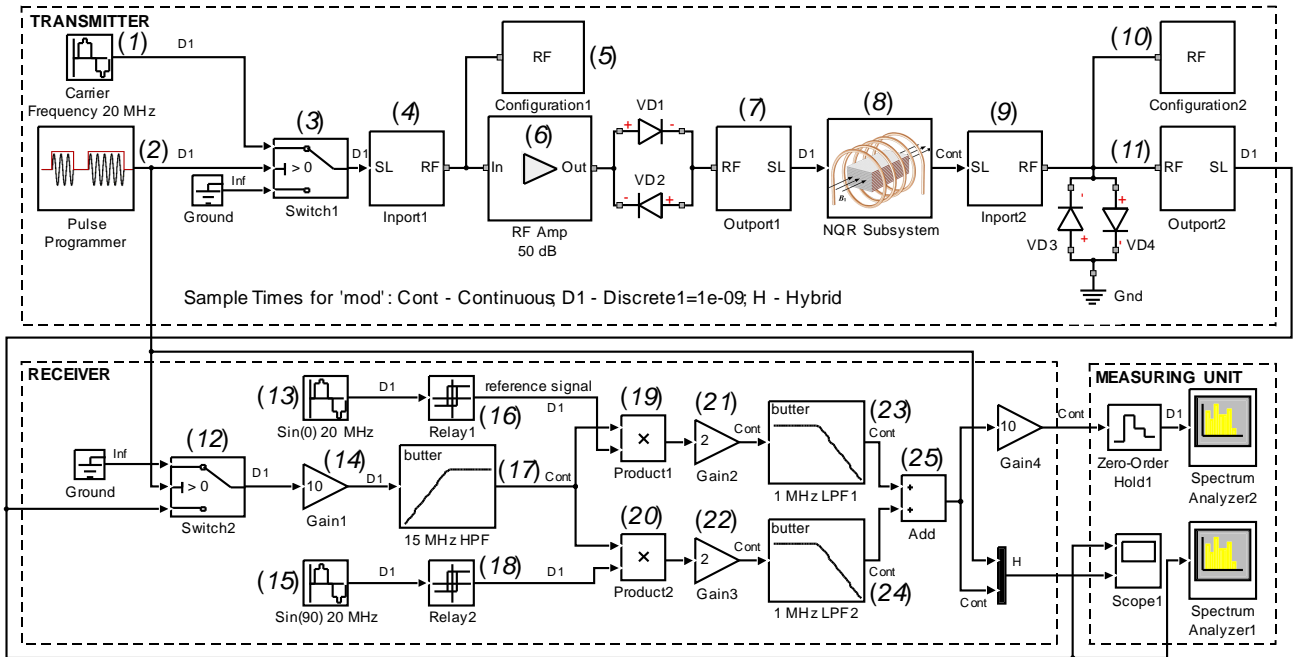


Рис. 1. Імітаційна модель методу прямого імпульсного спостереження ЯКР, реалізована в середовищі MATLAB Simulink: 1 – синтезатор частот; 2 – програматор імпульсних послідовностей; 3 – керований ключ; 4,7,9,11 – блоки узгодження; 5,10 – блоки конфігурування; 6 – вихідний підсилювач; 8 – ЯКР-підсистема; 12 – ключ стробування; 13,15 – джерела опорних сигналів; 14 – малoshумлячий підсилювач; 16,18 – компаратори; 19,20 – балансні змішувачі; 21,22 – підсилювачі узгодження; 23,24 – фільтр нижніх частот; 25 – суматор.

У випадку збудження резонансу коротким одиничним δ -імпульсом сигнал відгуку є імпульсною функцією:

$$s(t) = y(t) + y^m(t).$$

Тому в запропонованій імітаційній моделі ЯКР-підсистема може бути представлена узагальненою передавальною характеристикою:

$$H(p) = \frac{Y(p)}{X(p)},$$

де $X(p) = L\{x(t)\}$ та $Y(p) = L\{s(t)\}$ – зображення за Лапласом оригіналів сигналів збудження та відгуку ЯКР:

$$Y(p) = L\{s(t)\} = \int_0^{\infty} s(t)e^{-pt} dt,$$

$$X(p) = L\{x(t)\} = \int_0^{\infty} x(t)e^{-pt} dt.$$

Для отримання математичної моделі відгуку ЯКР-підсистеми спектрометра у вигляді імпульсної характеристики представимо спінову систему ядра коливною ланкою з передавальною функцією:

$$W(p) = \frac{k}{T^2 p^2 + 2\xi Tp + 1}, \quad 0 < \xi < 1, \quad (3)$$

де k – безрозмірний коефіцієнт підсилення (для ідеальної коливальної ланки $k = 1$), T – постійна часу, ξ – коефіцієнт демпфірування.

Імпульсна характеристика є реакцією системи на ідеальний імпульсний вхідний вплив, математичною моделлю якого є дельта-функція $x(t) = \delta(t)$. Тоді імпульсна характеристика відгуку ЯКР-підсистеми матиме вигляд:

$$g(t) = L^{-1}\{W(p)\} = L^{-1}\left\{\frac{k}{T^2 p^2 + 2\xi Tp + 1}\right\} = \frac{k}{\beta T^2} \cdot e^{-\alpha t} \sin \beta t.$$

У випадку дослідження зразків із складними мультиплетними спектрами в моделі ЯКР-підсистеми спінову систему ядра представимо у вигляді n паралельно з'єднаних коливальних ланок:

$$W(p) = \sum_{i=1}^n H_i(p) = \frac{Y_1(p) + Y_2(p) + \dots + Y_n(p)}{X(p)}.$$

На рис. 2 зображено s -модель ЯКР-підсистеми радіоспектрометра у якій блок «Transfer Fcn0» моделює відгук коливного контуру LC , блоки «Transfer Fcn1 – Transfer Fcn12» моделюють відгук спінових коливальних систем мультиплетного спектру ЯКР (сигнал СВІ). Моделлю джерела шумових сигналів слугує блок «Band-Limited White Noise».

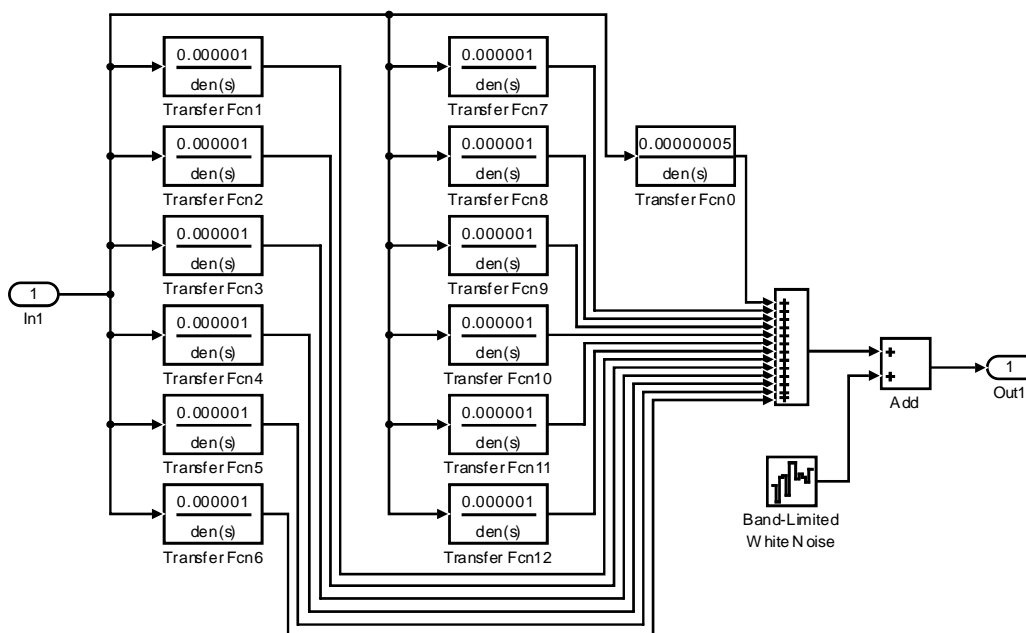


Рис. 2. Імітаційна модель ЯКР-підсистеми імпульсного спектрометра

Комплексний спектр сигналу СВІ $G(j\omega)$ отримують прямим перетворенням Фур'є після забезпечення методами накопичення і усереднення значень відношення сигнал/шум, необхідних для безпомилкового детектування ЯКР. В імпульсній Фур'є-спектроскопії спектр ЯКР отримують перетворенням Фур'є сигналу СВІ, математичною моделлю якого є вирази (1) або (2):

$$G(j\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} y(t) e^{j\omega t} dt. \quad (4)$$

Перспективним розв'язанням проблеми експрес ідентифікації частот ЯКР є застосування сигналів, ширина частотної смуги яких не залежить, або слабо залежить від тривалості імпульсу збудження. Для дослідження імпульсним методом ЯКР речовин із малою концентрацією квадрупольних ядер необхідно формувати імпульси збудження високої потужності ($P_{ВНХ} \approx 1000$ Вт), що можливо при значеннях коефіцієнту підсилення високочастотного передавача ЯКР спектрометра не менших 50 дБ. Розглянемо структуру запропонованого широкосмугового передавача, використовуючи приведену на рис. 3 його імітаційну модель.

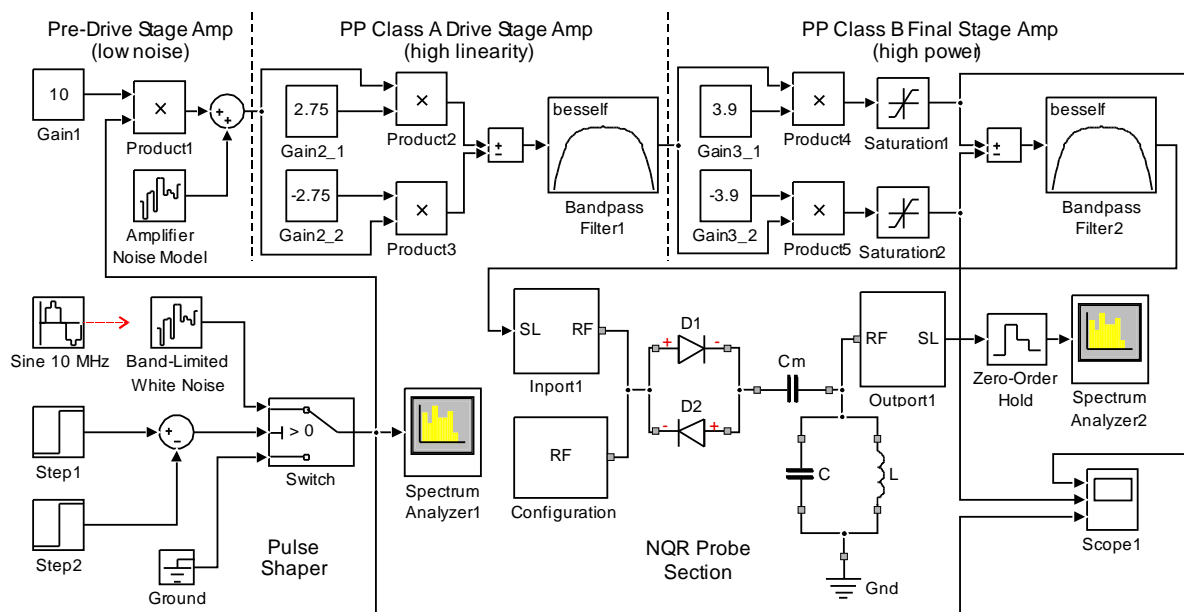


Рис. 3. Імітаційна модель ВЧ передавача імпульсного спектрометра ЯКР

Для відтворення умов реального експерименту, смуга пропускання передавача забезпечувалася в діапазоні $\Delta F_{TX} = 0,5 - 50$ МГц шляхом використання конфігураційних блоків «Bandpass Filter». Залежність ширини спектру сигналу Δf на виході передавача від тривалості імпульсів збудження $\Delta\tau = 1 - 100$ мкс із синусоїдальним та шумовим заповненнями приведені на рис. 4 (криві 1 та 2, відповідно). При цьому максимальна ширина спектру обмежувалась заданою смугою пропускання приймального каналу радіоспектрометра $\Delta F_{RX} = 1$ МГц з центральними частотами 20 МГц та 50 МГц, відповідно.

Із залежності отриманої для імпульсних сигналів з шумовим заповненням (рис. 4, крива 2) можна зробити наступний висновок. При малій тривалості імпульсу зондування ($\tau \sim 1$ мкс) із шумовим заповненням та смугою ΔF_{TX} його енергетичний спектр (рис. 5,а) є усередненою характеристикою частотних влас-

тивостей обмеженої на інтервалі часу τ малої кількості реалізацій випадкового сигналу. В даному випадку в приймальному каналі зі смугою ΔF_{RX} спостерігається залежність $\Delta f(\tau)$, притаманна імпульсним сигналам із синусоїдальним заповненням. При зростанні тривалості імпульсу зондування ($\tau \rightarrow 100$ мкс), заповненого шумом з обмеженою до ΔF_{TX} смугою, внаслідок збільшення кількості реалізацій енергетичний спектр є більш рівномірним (рис. 5,б). Тому має місце зростання $\Delta f(\tau)$ до фактично обмежених смугою пропускання приймача радіоспектрометра ($\Delta F_{RX} = 1$ МГц) значень 600 – 700 кГц.

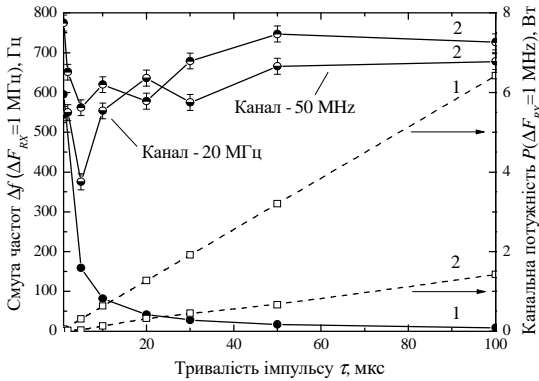


Рис. 4. Залежності ширини спектру сигналу на виході передавача від тривалості імпульсів зондування при збудженні радіоімпульсами (1) та шумовими імпульсами (2)

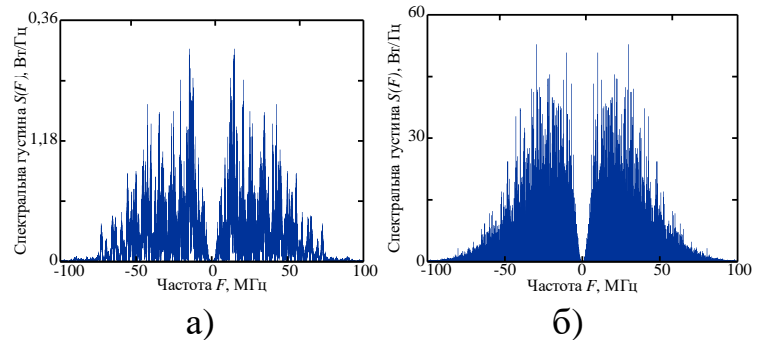


Рис. 5. Енергетичні спектри сигналу на виході передавача у випадку збудження шумовими імпульсними сигналами при тривалості імпульсу зондування 1 мкс (а) та 100 мкс (б)

Для передавача оптимальним є граничний режим роботи, в якому форма імпульсів ВЧ коливань є мінімально спотвореною, а корисна потужність і коефіцієнт корисної дії приймають максимальні значення. З врахуванням параметрів використаних транзисторів на основі рівняння енергетичного балансу проведено розрахунок факторів, що визначають енергоефективність передавача при заданих T і τ . Враховуючи розсіювані транзисторами обох каскадів потужності ($P'_{розс}$ і $P''_{розс}$) та шпаруватість S , середнє значення потужності розсіювання для імпульсного режиму передавача можна записати наступним чином:

$$P_{сер} = \frac{1}{S} (P'_{розс} + P''_{розс}) + P_{зм}.$$

Суттєвою складовою середньої потужності розсіювання $P_{сер}$ активними елементами передавача є потужність розсіювання в режимі спокою $P_{зм}$:

$$P_{зм} = P'_{зм} + P''_{зм},$$

де $P'_{зм}$ і $P''_{зм}$ – потужності розсіювання в режимі спокою для обох каскадів.

Для зменшення $P_{зм}$ реалізовано імпульсне керування зміщенням робочих точок транзисторів. Транзистори входять в робочий режим за короткий часовий інтервал $\tau_{дод} = 0,5 - 1$ мкс, що випереджає момент початку дії імпульсу збудження. При імпульсному зміщенні середня потужність, розсіювана транзисторами протягом тривалого проміжку часу може бути визначена наступним чином:

$$P_{зм.імп} = \frac{1}{S} (P'_{розс} + P''_{розс}) + \frac{\tau + \tau_{дод}}{T} (P'_{зм} + P''_{зм}). \quad (5)$$

Із (5) випливає, що $P_{\text{зм.імп}}$ можна суттєво знизити при роботі лінійного підсилювача в імпульсних режимах зміщення зі шпаруватістю $S > 10$. В режимі імпульсного зміщення при $\tau_{\text{дод}} = 1$ мкс для радіоімпульсів шпаруватістю $S \in [10; 1000]$ розсіювана потужність зменшується на 45,8 – 98,39 %.

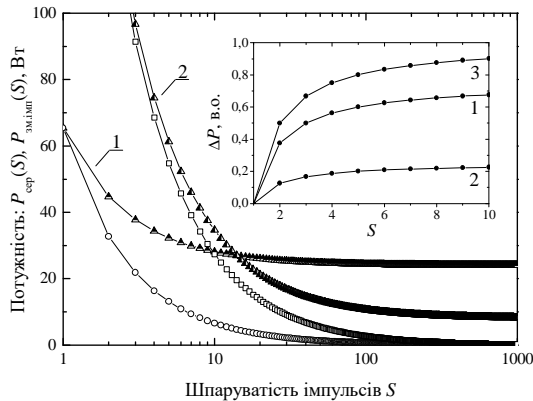


Рис. 6. Результати моделювання енергетичних характеристик передавача (3) при неперервному (\blacktriangle) та імпульсному (\square) зміщенні проміжного (1) та вихідного (2) каскадів

На рис. 7 представлено модель ВЧ приймача імпульсного спектрометра ЯКР, квадратурний детектор якої з системою фільтрації та пригнічення квадратурних відбивань реалізований за технологією радіозв'язку з програмованими параметрами компонентів. В основу приймача покладений принцип прямого оцифрування сигналу, що дозволило істотно скоротити довжину його аналогового тракту і, як наслідок, зменшити зашумленість сигналу СВІ та асиметричність параметрів детектованих сигналів. В експериментальному макеті спектрометра використано високошвидкісний 12-розрядний аналого-цифровий перетворювач AD9230BCPZ (швидкість перетворення 170 MSPS) для оцифрування сигналу відгуку в діапазоні резонансних частот 1 – 50 МГц.

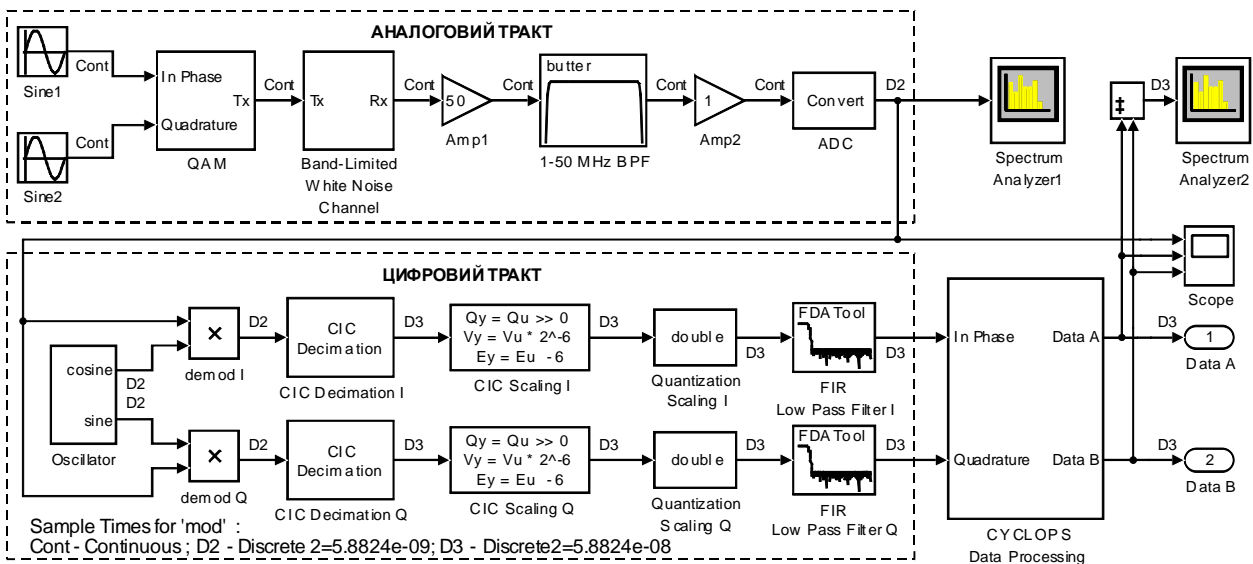


Рис. 7. Імітаційна модель запропонованого приймача спектрометра ЯКР

Для моделювання приймального тракту спектрометра синтезовано тестовий радіосигнал, що є носійним коливанням із частотою 30 МГц, огинаюча якого є сумою двох гармонік з частотами 400 кГц та 800 кГц. Кінцеве рівняння для синтезу радіосигналу має вигляд:

$$s(t) = \text{Re}[z(t)] = I(t)\cos(\omega_0 t) - Q(t)\sin(\omega_0 t). \quad (6)$$

В цифровому тракті приймача забезпечується виділення комплексної огинаючої радіосигналу $z_m(t)$ шляхом перемноження (6) на $\exp(-j\omega_0 t)$. Отриманий в результаті детектування сигнал можна представити наступним чином: $z_d(t) = s(t)\exp(-j\omega_0 t) = A(t) + jB(t)$, де:

$$\begin{aligned} A(t) &= \frac{1}{2}I(t) + \frac{1}{2}I(t)\cos(2\omega_0 t) - \frac{1}{2}Q(t)\sin(2\omega_0 t), \\ B(t) &= \frac{1}{2}Q(t) - \frac{1}{2}Q(t)\cos(2\omega_0 t) - \frac{1}{2}I(t)\sin(2\omega_0 t). \end{aligned} \quad (7)$$

Процес оброблення компонент (7) сигналу СВІ полягає у зниженні частоти їх дискретизації та відфільтруванні складових із частотою $2\omega_0$. Оскільки вихідні сигнали помножувачів мають високі значення частоти дискретизації (170 МГц), а для отримання спектрів ЯКР з максимальною шириною спектрального діапазону $\Omega = 1$ МГц можливі на порядок нижчі значення, то в цифровому тракті приймача застосовано НІХ фільтри, що забезпечують зниження частоти дискретизації до 17 МГц. Крім того, в результаті помноження збільшується розрядність даних вихідних сигналів, для зменшення якої до 16 біт в модель приймача введені модулі «Quantization Scaling». Модулі «FIR Low Pass Filter» слугують для компенсації кривизни АЧХ. Застосування СІХ фільтрів забезпечує достовірне детектування сигналів СВІ з наперед заданими початковими фазами в широкому діапазоні частот резонансу.

Для підтвердження ефективності шумового збудження ЯКР проведено комп'ютерне моделювання з використанням накопичення і усереднення отриманих результатів. Із рис. 8,а випливає, що при шумовому збудженні ЯКР отримані реалізації сигналу СВІ в кожному наступному експерименті відрізняються від реалізацій, отриманих в попередньому експерименті. Проте, застосування цифрового накопичення із усередненням отриманих даних забезпечує зростання взаємної кореляції між сусідніми ітераціями (рис. 8,б), що підтверджується результатами статистичного кореляційного аналізу (рис. 9). Застосування цифрового усереднення даних починаючи з 50-ї ітерації забезпечило зростання коефіцієнту кореляції до 0,8 – 0,92 після десяти наступних ітерацій.

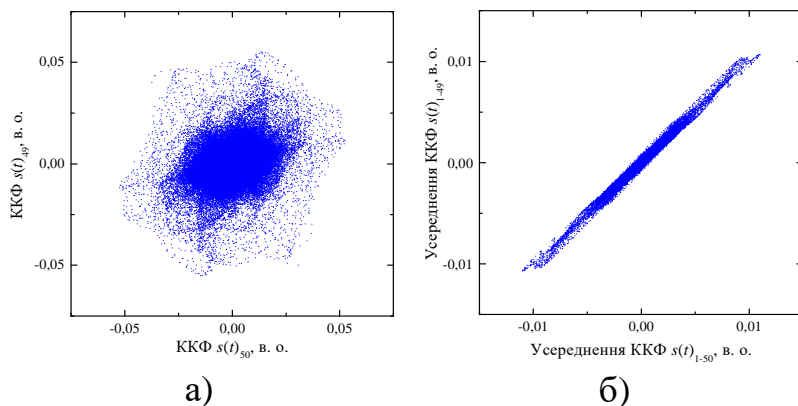


Рис. 8. Діаграми розсіювання для сигналу СВІ: між 49-ю і 50-ю ітерацією без усереднення (а) та між усередненими сигналами за 1–49 і 1–50 ітерацій (б)

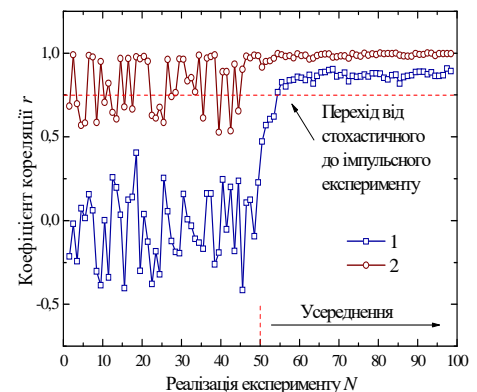


Рис. 9. Результати статистичного кореляційного аналізу: для сигналів СВІ (1) та для спектрів ЯКР (2)

Алгоритм запропонованого експрес-методу має наступну послідовність операцій: 1) збудження резонуючого ядра 1-м імпульсом зондування з шумовим заповненням; 2) реєстрація сигналу СВІ; 3) збудження ядра, що резонує N -м імпульсом зондування; 4) усереднення даних від N ітерацій; 5) обчислення коефіцієнту кореляції r між усередненими сигналами за $N - 1$ та N ітерацій; 6) у випадку, якщо $r \geq 0,75$ – дія імпульсів збудження припиняється, а до отриманого результату усереднення застосовується ШПФ; 7) визначення ширини $2\Delta\omega_s$ та центральної частоти отриманого спектру ЯКР; 8) автоматичне встановлення синтезатором частоти ($\omega_0 = \omega_s$) опорного сигналу для детектора приймача спектрометра; 9) збудження ядра, що резонує радіочастотним імпульсом з частотою ω_s ; 10) здійснення більш точної реєстрації ЯКР шляхом перенесення спектру в низькочастотну область.

На рис. 10 представлено спектрограму, отриману в результаті аналізу процесу збудження ЯКР імпульсами зондування з шумовим заповненням. На протязі інтервалу часу тривалістю 6 мс здійснювалось шумове збудження з наступним цифровим усередненням накопичених результатів дослідження. Розріз спектрограми в часовій площині відображає зміну спектральної густини потужності окремої лінії « α » змінної в часі мультиплетного спектру ЯКР. При проведенні усереднення на протязі наступних 3 мс розкид спектральної густини потужності, що відповідає лінії « α » зменшується до необхідного рівня, що уможлиблює попередню ідентифікацію частоти резонансу. Аналогічна картина спостерігається для інших ліній мультиплетного спектру. Розріз спектрограми в частотній площині вздовж лінії « L » візуалізує спектр ЯКР ^{115}In , розташування якого відповідає моменту часу $t_4 = 18$ мс. Тривалість імітаційного експерименту з шумовим збудженням ЯКР на протязі 0,02 с склала ~ 72 хв.

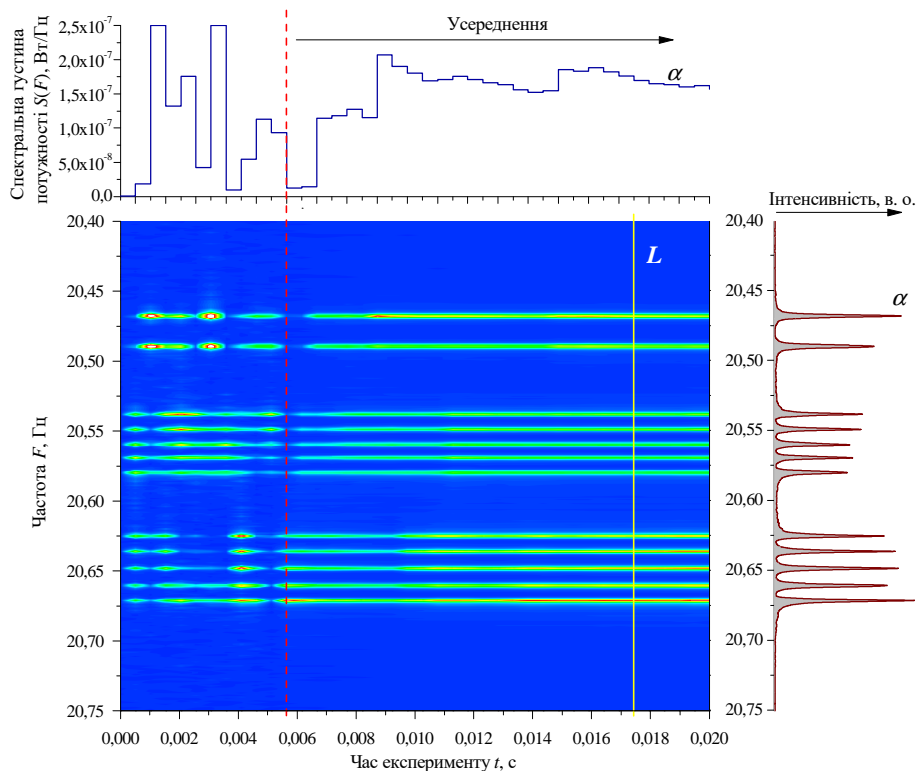


Рис. 10. Спектрограма ЯКР ^{115}In , отримана при збудженні резонансу імпульсами зондування з шумовим заповненням

Для забезпечення мінімальних розмірів зони сканування досліджуваного зразка та більш ефективної взаємодії радіочастотного поля з кристалом доцільно збудження і приймання сигналу спінової індукції здійснювати з використанням приймально-передавальної котушки спектрометра сідлоподібної форми (рис. 11), вектор напруженості магнітного поля \mathbf{H}_1 в якій спрямований нормально до напрямку росту кристалу. Відношення сигнал/шум для радіочастотної котушки можна представити виразом:

$$S/N \approx \frac{\mathbf{H}_1 V \sqrt{Q}}{\sqrt{\Delta\omega}},$$

де \mathbf{H}_1 – вектор напруженості магнітного поля в котушці при одиничному струмі в ній; V – об'єм зони збудження; Q – добротність радіочастотної системи; $\Delta\omega$ – смуга робочих частот.

Величина \mathbf{H}_1 визначає чутливість котушки. Тому необхідно максимально збільшувати відносний робочий об'єм котушок таким чином, щоб їх провідники перебували якомога ближче до досліджуваного об'єкта.

Враховуючи вихідні геометричні розміри досліджуваних зразків, розроблено модель фізичної конструкції сідлоподібної котушки довжиною 25,2 мм, радіусом 10 мм та радіальним кутом дугових ділянок 120° . Встановлено, що для одновиткової сідлоподібної котушки із вказаними геометричними параметрами рекомендований розмір досліджуваних методом ЯКР зразків становить $12 \times 18 \times 10 \text{ мм}^3$ (28,12% від повного об'єму котушки).

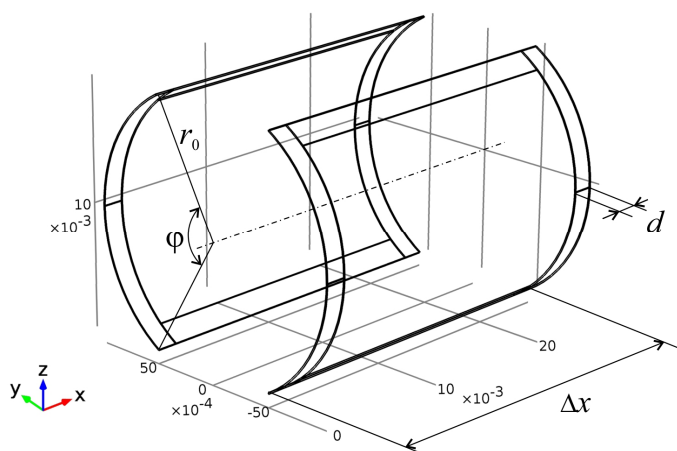


Рис. 11. Об'ємне зображення фізичної моделі сідлоподібної котушки, розробленої в середовищі COMSOL Multiphysics

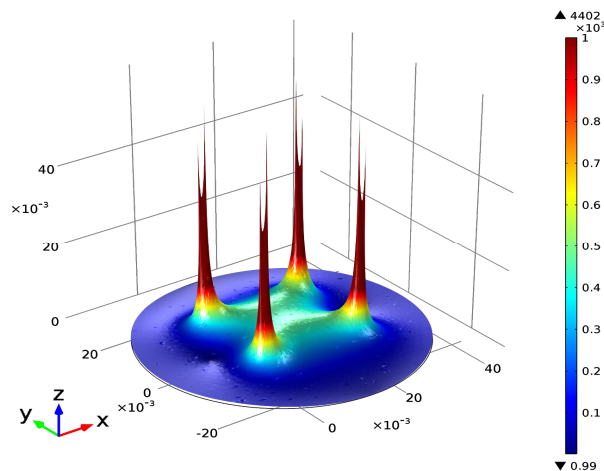


Рис. 12. Тривимірна топологія напруженості магнітного поля в площині XY сідлоподібної котушки

У третьому розділі – «Методи програмних модулів для конфігурування пристроїв на основі синтаксису моделювання динамічних режимів логікових структур» – представлено конфігураційні структури розроблених на основі програмованих логікових інтегральних схем цифрового обчислювального ядра та системи керування радіоспектрометром, розглянуто особливості генерування гармонічних коливань для синтезу цифрових сигналів на основі вбудованих апаратних систем.

Частота генерованого числовим методом вихідного сигналу ПЦСЧ залежить від частоти дискретизації f_d та від приросту фази Δ :

$$F = \Delta \frac{f_d}{2^i}; \Delta \leq N / 2,$$

де i – розрядність даних таблиці перекодування. При цьому, мінімальний крок вибірки визначається розмірністю таблиці перекодування $N = 2^i$.

Якщо $\Delta = 1$, то табличні значення коливальної функції зчитуються послідовно з частотою дискретизації f_d . Для генерування періодичних сигналів з довільними значеннями частот в діапазоні $f_d/2^i - f_d/2$ необхідно, щоб значення приросту фази Δ були як цілочисельними, так і дробовими. Як правило, дробові значення призводять до суттєвого зростання нелінійних спотворень у спектрі сигналу генерованого ПЦСЧ. Крім того, значення нелінійних спотворень залежить також від помилок квантування, розмірності таблиці перекодування N та розрядності числа вибірок n , а нехтування молодшими розрядами фази з метою зменшення об'єму ПЗП призводить до похибок апроксимації, усунення яких неможливе.

При дробовому Δ для синтезу коливань з меншим рівнем спотворень необхідно до табличних значень застосовувати інтерполяційний метод. У випадку лінійної інтерполяції проміжні значення амплітуди генерованого сигналу обчислювалися за виразом:

$$s(n)_x = mx + \sin\left(\frac{2\pi(n-1)}{N}\right),$$

де $0 < x < 1$ – дробова частина приросту фази Δ , а m – тангенс кута нахилу апроксимаційної прямої.

Отримання правильних результатів розрахунку можливе при оцінюванні усередненого значення коефіцієнту нелінійних спотворень для повного циклу коливань. В залежності від Δ при прямому табличному методі синтезу повний цикл може складатися з декількох періодів коливань. Якщо $\Delta = A/B$, де A і B – прості числа, то мінімальне число вибірок повного циклу становить $N' = BN$. Дослідження гармонічних спотворень проводилось для дискретизованого за точками, лінійно інтерпольованого з кроком Δ та апроксимованого за алгоритмом CORDIC сигналів (50 ітерацій). При цьому $N = 256$ дискретних значень функції \sin представлялись як числами подвійної точності з плаваючою крапкою, так і відліками 24-бітних чисел з фіксованою крапкою. При всіх інших однакових умовах, застосування таблиці подвійної точності забезпечує суттєве зниження нелінійних спотворень у випадку цілочисельних Δ . При дробових значеннях Δ застосування лінійної інтерполяції забезпечує зниження розкиду абсолютних значень КНС з 10^{-3} до 10^{-5} (див. рис. 13).

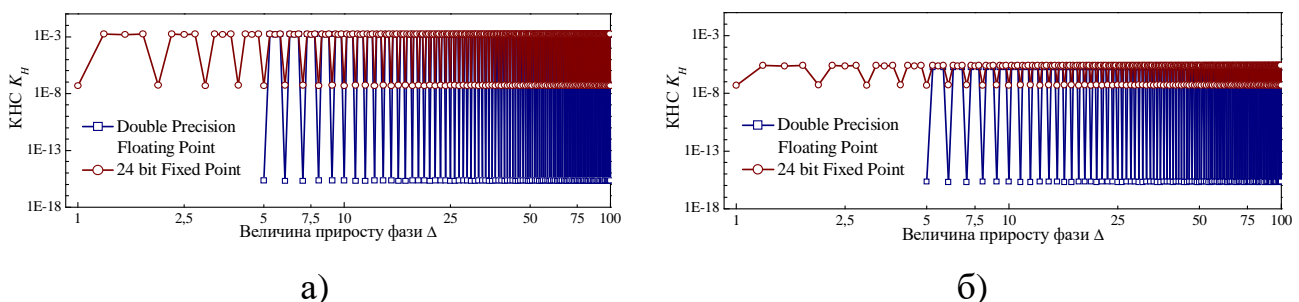


Рис. 13. Залежність КНС від приросту фази: прямий синтез (а), синтез із лінійною інтерполяцією (б)

Розроблення форми сигналу для ПЦСЧ з покращеною спектральною чистотою ініціює вибір оптимальної розмірності N таблиці перекодування. При зміні N від 2^5 до 2^{26} рівень спектральних складових вищих порядків зменшується і знаходиться в інтервалі $2 \times 10^{-2} - 5 \times 10^{-8}$ при дробових приростах фази Δ та прямій дискретизації за точками (рис. 14,а), а при застосуванні лінійної інтерполяції – в інтервалі $2 \times 10^{-3} - 5 \times 10^{-8}$ (рис. 14,б). Збільшення розмірності таблиці N покращує спектральну чистоту вихідного сигналу, проте вимагає суттєвого зростання об'єму внутрішньої енергонезалежної пам'яті ПЦСЧ. Однак, існує критерій оптимальності для розмірності таблиці перекодування N_{OPT} , подальше зростання якого істотно не впливає на зміну величини КНС вихідного сигналу синтезатора. Із результатів моделювання випливає, що у випадку прямої дискретизації за точками N_{OPT} становить 2^{25} , а при синтезі з лінійною інтерполяцією даних N_{OPT} дорівнює 2^{13} . Застосування інтерполяції значень функції \sin , представлені дискретними відліками на інтервалі $0 - 2\pi$ забезпечило зменшення об'єму ПЗП цифрового синтезатора з 768 Мбіт до 192 кбіт. Зростання КНС не перевищувало 5 %.

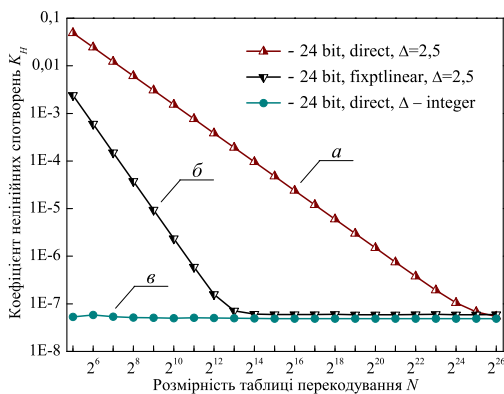


Рис. 14. Залежність КНС від розмірності таблиці перекодування

Формувач багатоімпульсних послідовностей спектрометра забезпечує формування імпульсів збудження ЯКР у відповідності з наперед заданим алгоритмом. На рис. 15 приведена запропонована структурна схема конфігураційної структури ПЛІС, що є необхідною для розроблення формувача імпульсних послідовностей на основі синтезатора частот з програмним керуванням.

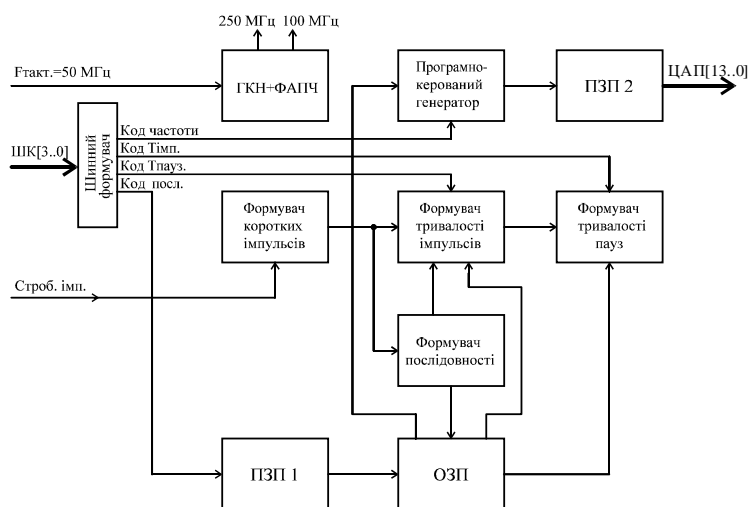


Рис. 15. Структурна схема формувача багатоімпульсних послідовностей на основі синтезатора частот з програмним керуванням

Особливістю запропонованого методу формування багатоімпульсних послідовностей є його реалізація на основі багатофункціонального програмно керованого цифрового синтезатора частоти з можливістю швидкісної частотної та фазової модуляцій (рис. 16). Крім формування неперервних коливань, що заповнюють імпульси зондування у діапазоні резонансних частот ЯКР (від 2 МГц до 50 МГц), запропонований синтезатор слугує також джерелом опорних сигналів для квадратурного детектора.

Основою запропонованого синтезатора є 48-бітний акумулятор фази «altaccumulate0», що формує послідовність кодів миттєвої лінійно-змінної фази генерованого сигналу. Значення відліків вихідного сигналу синтезатора частоти записані в таблицю пам'яті «DDS_rom» – ПЗП2. Додаткові модулі запропонованої структури ПЦСЧ «phase_mux», «phase_adder» і «phase_reg» слугують для здійснення фазової маніпуляції несучої частоти вихідного сигналу.

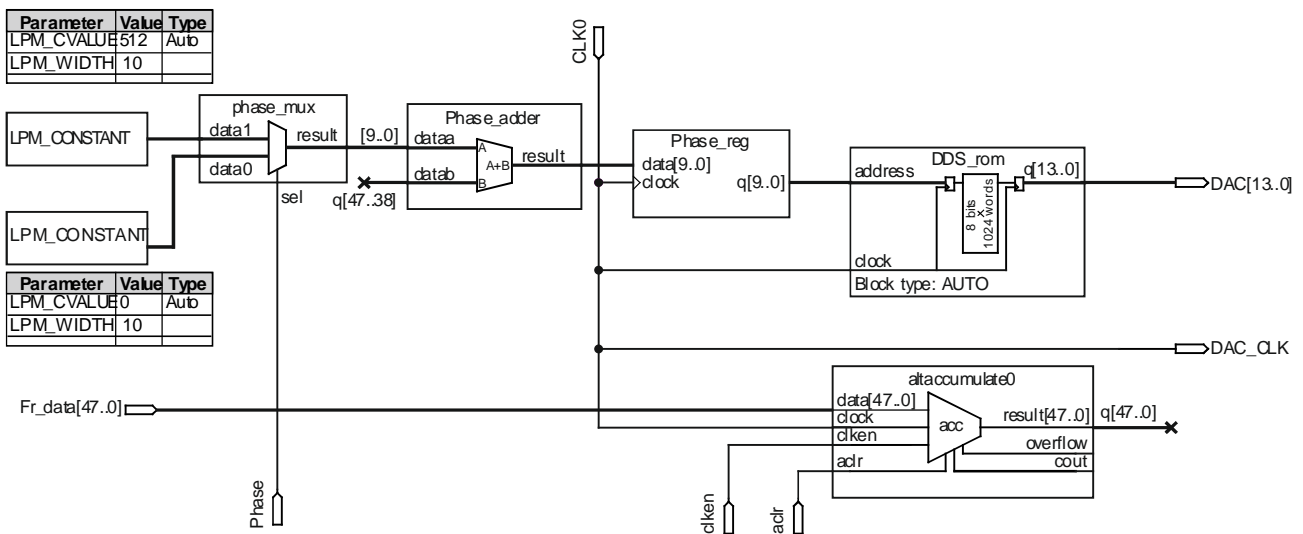


Рис. 16. Конфігураційна структура ПЦСЧ, розроблена у програмному середовищі ALTERA Quartus II Web Edition

Схема формування імпульсних послідовностей у програмному редакторі ALTERA Quartus II Web Edition приведена на рис. 17. Помножувач «mult 1» забезпечує можливість введення вхідного коду частоти у вигляді числової константи у відповідності з передбачуваним значенням частоти генерованого сигналу шляхом помноження вхідного коду частоти K_1 на константу $K_2 = 11258999$, що задає крок перебудови синтезатора величиною $\Delta f = 10$ Гц.

Залежність частоти сигналу $f_{\text{вих}}$ на виході генератора з числовим управлінням від опорної тактової частоти $f_{\text{такт}}$, розрядності акумулятора фази M та коду частоти K визначається наступним виразом: $f_{\text{вих}} = K \times f_{\text{такт}} / 2^M$. При цьому, крок перебудови частоти дорівнює: $\Delta f_{\text{вих}} = f_{\text{такт}} / 2^M$.

У нашому випадку робоча частота акумулятора фази «altaccumulate0» розрядністю $M = 48$ біт дорівнює $f_{\text{такт}1} = 250$ МГц. Таким чином, крок перебудови частоти становитиме $\Delta f_{\text{вих}} \approx 1 \times 10^{-6}$ Гц. Отже, для формування сигналу з частотою $f_{\text{вих}}$ на вхід «Fr_data[47..0]» синтезатора необхідно подавати 24-бітний код частоти, що визначається наступним виразом:

$$K_1 = \frac{2^M}{f_{\text{ТАКТ}} K_2} = 25 \times 10^6 \frac{f_{\text{ВИХ}}}{f_{\text{ТАКТ}}}$$

Формування послідовності розпочинається синхронно із вхідним імпульсом стробування на вході «Start». Значення частоти несінного коливання, тривалості 90°-го імпульсу, тривалості паузи між імпульсами та дані про тип послідовності надходять із блоку керування спектрометром через шину керування. Тривалість 90°-го імпульсу задається в діапазоні 0,1 – 20 мкс з кроком 0,1 мкс. Проміжок між імпульсами регулюється у діапазоні 0,1 мкс – 1 с. Інші часові довжини, наприклад в послідовності Карра-Паррселла, довжина 180°-их імпульсів і проміжків між ними встановлюється автоматично, згідно вибраної програми записаної у модулі ПЗП1. Кількість імпульсів у серії задається в межах 1 – 30.

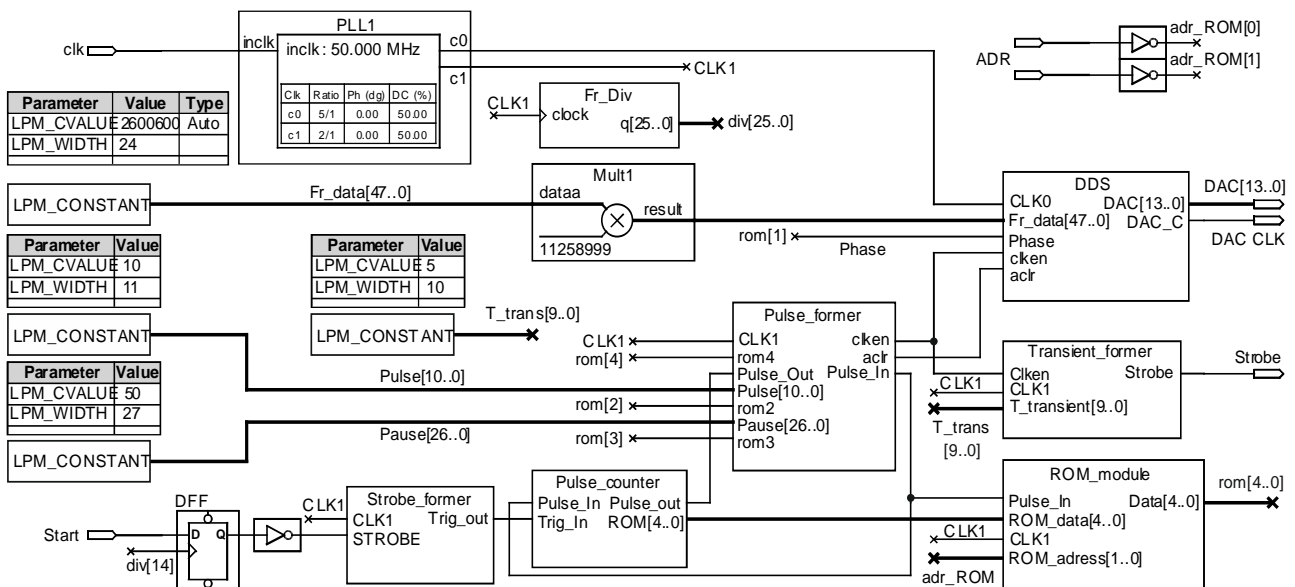


Рис. 17. Конфігураційна структура формувача імпульсних послідовностей, розроблена у програмному середовищі ALTEra Quartus II Web Edition

Для забезпечення оперативного контролю в процесі радіофізичного експерименту з використанням портативного спектрометра ЯКР і вибору його початкових умов необхідна гнучка система керування. Для реалізації наперед заданого алгоритму синтезовано автомат кінцевих станів, алфавіт вихідних послідовностей якого $Y = \{y_1, y_2[4:0], y_3\}$ визначається множиною станів машини $S = \{s_0, s_1, s_2, \dots, s_{32}\}$, а множина вхідних символів автомату задана алфавітом значень $X = \{x_1, x_2, \dots, x_{5M}\}$. Початковим є стан $s_0 \in S$. Під час оброблення вхідних символів машина спочатку переходить зі стану s_0 в $s_1 = f(s_0, x_1)$. Процес триває до досягнення стану $s_{32} = f(s_2 \vee s_3 \vee s_4 \vee s_5 \vee s_6, x_{10})$. Така послідовність переходів формує вихідний алфавіт. Символ $y_1 = g(s_0)$ відповідає переходу з s_0 в s_1 . Множина символів $y_2[4:0] \in Y$ відповідає переходам між s_1 та s_{31} . Символ $y_{32} = g(s_2 \vee s_3 \vee s_4 \vee s_5 \vee s_6)$ відповідає переходу машини в стан s_{32} . На рис. 18 зображено фрагмент діаграми станів машини у вигляді орієнтованого мультиграфа. Функції переходів $f: S \times X \rightarrow S$ та функції виходів $g: S \rightarrow Y$ автомату описані на мові VHDL.

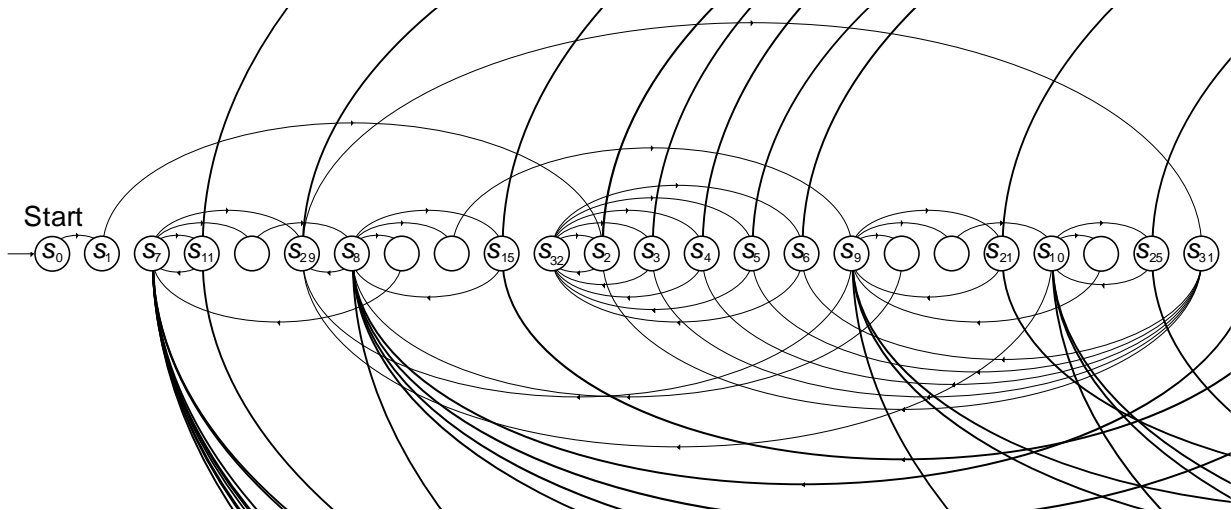


Рис. 18. Діаграма станів синтезованого автомату кінцевих станів програми керування спектрометром ЯКР

У четвертому розділі – «Схемотехнічна реалізація моделей функціональних модулів радіоспектрометра та їх експериментальні дослідження» – розглянута практична реалізація апаратних модулів радіоспектрометра та результати їх експериментальних досліджень, що підтверджують основні теоретичні положення роботи.

Вхідна частина спектрометра забезпечує подання на протязі проміжку часу 1 мкс – 20 мкс потужного радіоімпульсу з високочастотним заповненням на котушку із зразком та прийом сигналу спінової індукції квадрупольних ядер після дії імпульсу. При цьому існує проблема усунення перевантажень приймального тракту під час дії імпульсу зондування та придушення вільних коливань після її закінчення. Останнє обумовлено залишковими затухаючими коливаннями в коливальному контурі та може істотно збільшити «мертву» зону прийому сигналу індукції або навіть унеможливити його приймання та підсилення. Для усунення даної проблеми запропоновано варіант вузла приймання, спрощена принципова схема якого приведена на рис. 19. Надійне закривання тракту приймання до 100 дБ для несівної частоти в паузах між імпульсами зондування забезпечується трьома однотипними каскадами на двозатворних польових транзисторах BF998 з низьким коефіцієнтом шуму.

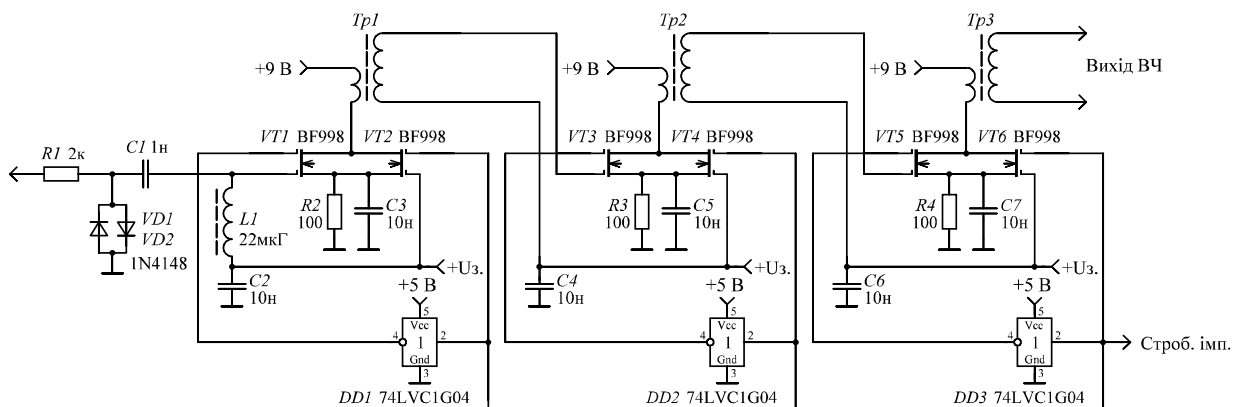


Рис. 19. Попередній підсилювач сигналу спінової індукції з трансформаторним зв'язком між каскадами

Розроблення приймача радіоспектрометра за технологією РППК забезпечило спрощення структури його аналогового тракту. Для регулювання коефіцієнту підсилення використаний реалізований на мікросхемі AD8369ARU керований кодом підсилювач. Діапазон зміни коефіцієнту підсилення та смуга пропускання становлять 0 – 40 дБ та 0 – 600 МГц, відповідно. Зміна коефіцієнту підсилення з кроком 3 дБ забезпечується шляхом подавання відповідного коду з ПЛІС на шину керування. Для ослаблення вібраційних завад, шумів типу $1/f$ та паразитних гармонік введений побудований за схемою зв'язаних контурів смуговий фільтр зі смугою пропускання, що може зміщуватися за частотою в межах 1 – 50 МГц. Головним чином, смуга пропускання фільтра визначається шириною спектрів резонансних сигналів досліджуваних речовин. Основою каскаду узгодження є високочастотний операційний підсилювач AD8138 зі смугою пропускання 320 МГц. Кінцевою ланкою аналогового тракту є АЦП AD9230BCPZ.

На основі результатів імітаційного моделювання розроблено базову структуру широкопasmового ВЧ передавача імпульсного ЯКР спектрометра (рис. 20), що містить вхідний, проміжний і кінцевий каскади підсилення, а також елементи узгодження вхідного, вихідного і міжкаскадних імпедансів. Застосування трикаскадної схеми зумовлено необхідністю підсилення слабких сигналів, рівень потужності яких становить близько -2 дБм.

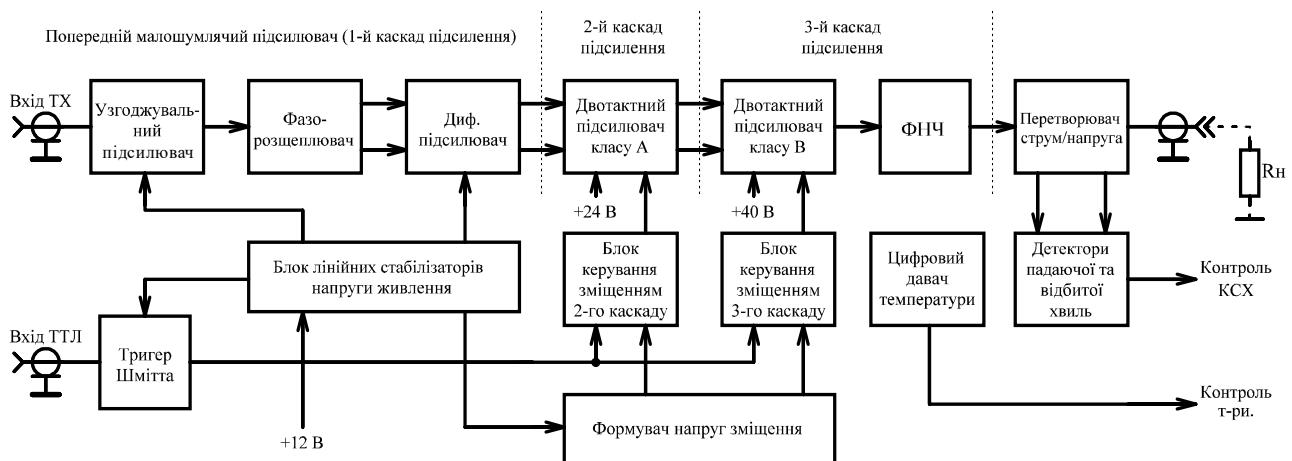


Рис. 20. Функціональна схема запропонованого широкопasmового передавача

Попередній підсилювач і схема керування режимами роботи транзисторів конструктивно об'єднані і виконані у вигляді уніфікованого екранованого модуля (рис. 21, нижня сторона плати).

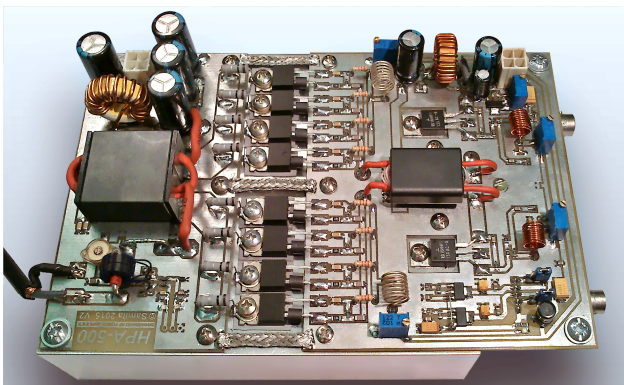


Рис. 21. Лабораторний макет передавача спектрометра ЯКР

Із приведеної АЧХ передавача (рис. 22, крива 1) випливає, що в діапазоні частот 2 – 38 МГц нерівномірність становить ± 1 дБм. Вирівнювання частотної характеристики із збереженням нерівномірності на рівні близько $\pm 0,4$ дБм в діапазоні 2 – 38 МГц (рис. 22, крива 2) здійснювалося корекцією рівня вхідного сигналу при калібруванні параметрів передавача програмно-апаратними засобами системного модуля радіоспектрометра. Передавач з корекцією АЧХ забезпечує в зазначеному діапазоні середню вихідну потужність 400 – 500 Вт. Дослідження фазо-частотної характеристики показали, що фазовий зсув $\Delta\varphi$ є пропорційним частоті підсилюваного сигналу практично у всьому діапазоні робочих частот Δf .

Осцилограми вихідного сигналу та сигналу керування приведені на рис. 23. Час затримки вихідного сигналу та час встановлення імпульсу становив близько 100 нс та 350 нс, відповідно. При проведенні досліджень видимі викиди напруги на виході передавача не спостерігалися, що вказує на відсутність коливань в процесі встановлення імпульсу. З отриманих експериментальних результатів можна зробити висновок, що сумарний час наростання обвідної переднього фронту радіоімпульсу для розробленого передавача не перевищував 500 нс.

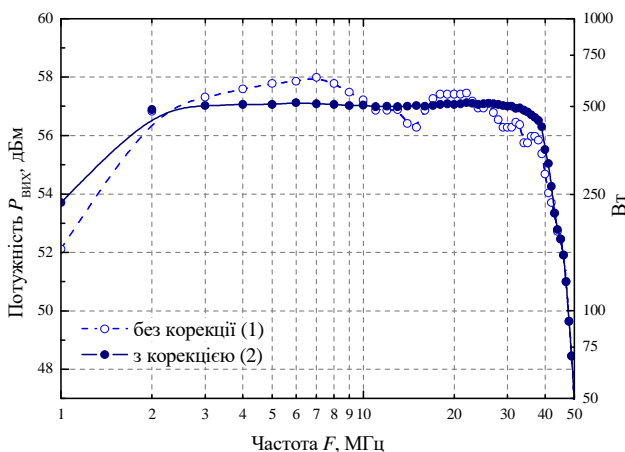


Рис. 22. Результати експериментальних досліджень АЧХ запропонованого передавача в робочому діапазоні частот 1 – 50 МГц

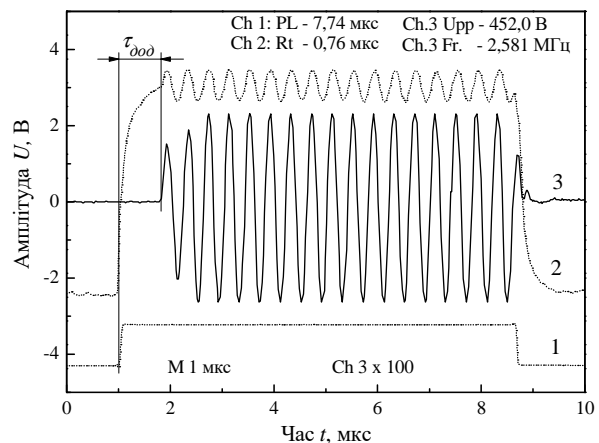


Рис. 23. Осцилограми напруг в режимі імпульсного зміщення: сигнал керування (1), напруга затвор-витік на транзисторах вихідного каскаду (2), сигнал на виході передавача (3)

Вивчення температурного поля плати передавача проводились із застосуванням тепловізора Testo-875. Температурні поля плати при роботі в режимі неперервного та імпульсного зміщення ($P'_{\text{вих}} \approx 500$ Вт, серія із 5 імпульсів загальною тривалістю 100 мкс, час роботи 10 хв) приведені на рис. 24,а та рис. 24,б, відповідно. Із отриманих результатів випливає, що в режимі імпульсного зміщення нагрів плати є значно меншим. Зокрема, для транзисторів вихідного каскаду середня поверхнева температура знизилась на ~ 20 °С, а для транзисторів проміжного каскаду – майже на 10 °С. Це вказує на можливість роботи ВЧ передавача в запропонованому режимі від автономних джерел живлення та без примусового повітряного охолодження.

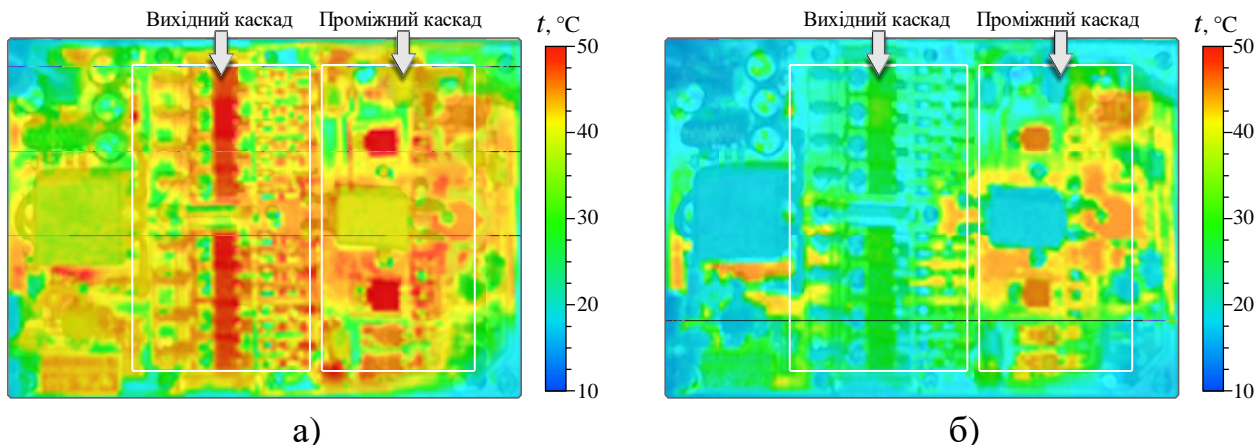


Рис. 24. Розподіл поверхневої температури плати передавача під час роботи в режимі неперервного зміщення (а) та в режимі імпульсного зміщення (б)

Для апаратної реалізації цифрового обчислювального ядра імпульсного ЯКР-спектрометра розроблена системна плата, що містить цифро-аналоговий та аналогово-цифровий перетворювачі, фільтр нижніх частот, узгоджувальні та буферні підсилювачі, схеми конфігурації та живлення, а також інші функціональні елементи (рис. 25). Основою запропонованої розробки є ПЛІС EP4CE15E22C8 сімейства Altera Cyclone IV. Фото лабораторного макету системної плати імпульсного спектрометра зображене на рис. 26.

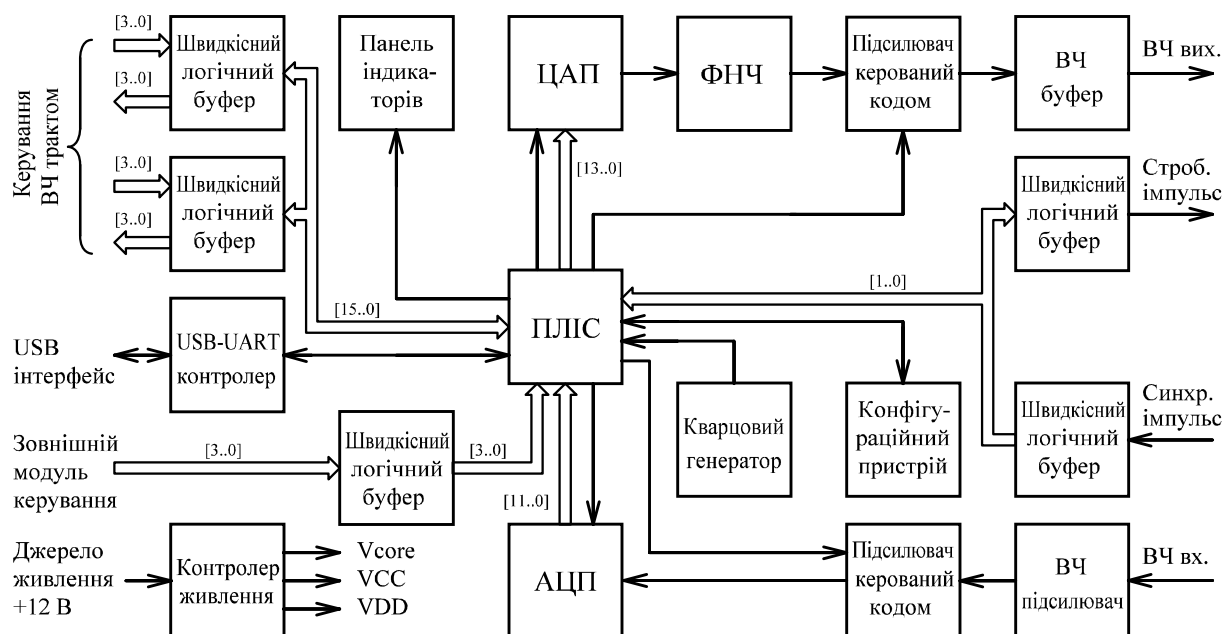


Рис. 25. Структурна схема системної плати спектрометра ЯКР

В енергонезалежній пам'яті ПЛІС записано алгоритми формування тридцяти різних типів імпульсних послідовностей, застосування яких забезпечує реалізацію низки радіоспектроскопічних та релаксаційних методик в ЯКР для визначення часів релаксації T_1 і T_2 (послідовність типу CPMG), забезпечення накопичення слабких сигналів ЯКР (послідовності SSFP і SLSE) при швидкій та повільній релаксаціях, усереднення неоднорідного розширення спектральних ліній із застосуванням послідовності чергування фаз імпульсів (PAPS) та нутаційної спектроскопії.

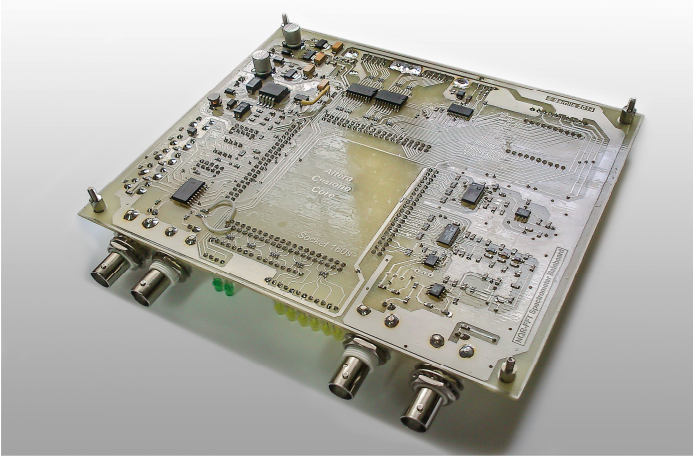


Рис. 26. Лабораторний макет системної плати спектрометра ЯКР

Дослідження роботи розробленого пристрою проводились в одно- та в багато-імпульсному режимах. Осцилограми напруги на виході пристрою при формуванні найбільш поширених в ЯКР послідовностей приведені на рис. 27. Діапазон робочих частот розробленого пристрою становить 1 – 50 МГц, що обмежується частотами ЯКР актуальних ядер ізотопів ^{14}N , ^{35}Cl , ^{63}Cu , ^{69}Ga , ^{71}Ga , ^{113}In , ^{115}In та інших.

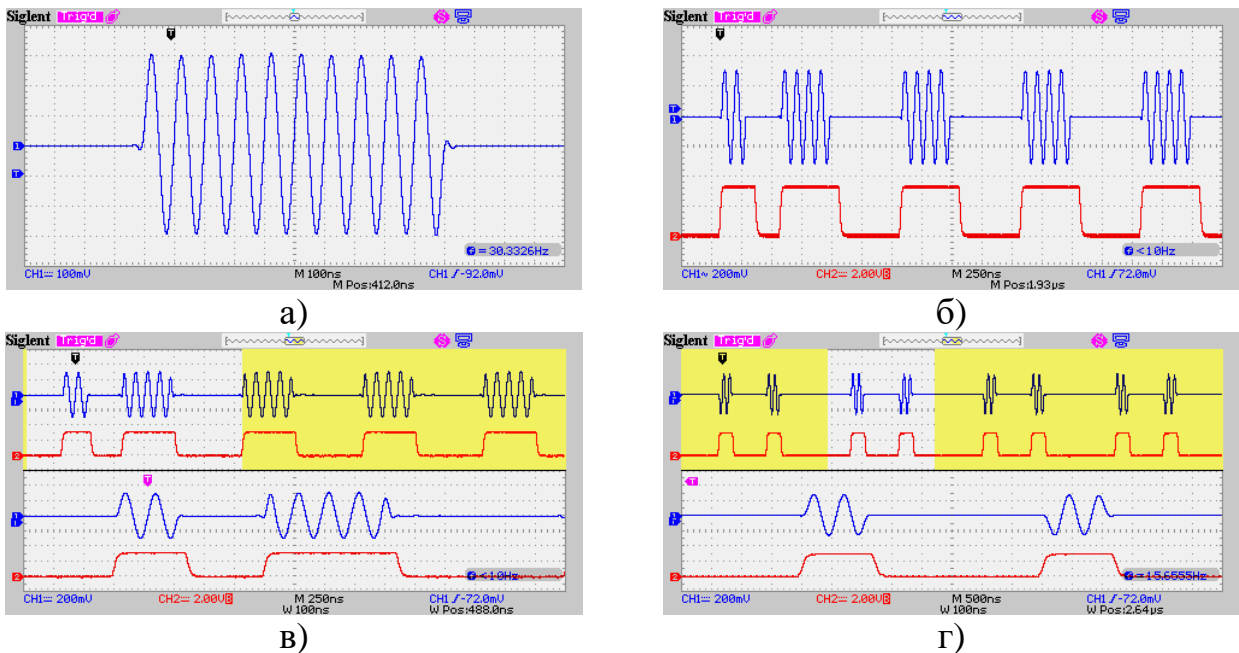


Рис. 27. Осцилограми напруг на виході формувача імпульсних послідовностей: одиничний імпульс (а), послідовність Карра-Паррселла (б), послідовність Мейбума-Гілла (в), послідовність MREV-8 (WANUNA) (г)

У п'ятому розділі – «Апаратно-програмна реалізація системи збору даних для імпульсного спектрометра ЯКР» – розглянуто структуру та принцип реалізації системи збору даних радіоспектрометра. З використанням засобів графічного об'єктно-орієнтованого програмування синтезований віртуальний інструмент LabVIEW візуалізації та оброблення сигналів ядерної спінової індукції.

Важливою умовою організації та проведення радіофізичного експерименту є наявність зручної системи збору даних. Невід'ємною складовою СЗД є уні-

версальний інтерфейс зв'язку з персональним комп'ютером. Для реалізації СЗД вибрана мікросхема мультипротокольного двонаправленого USB↔245FIFO перетворювача FT2232H, що забезпечує передавання даних зі швидкістю до 480 Мб/с.

Завдання візуалізації та оброблення даних радіофізичного експерименту розв'язувалось шляхом створення програмного забезпечення на базі системи автоматизованого проектування National Instruments LabVIEW. На рис. 28 приведена структурна схема підпрограми ВІ, що забезпечує оброблення отриманого від реального об'єкта масиву даних з використанням USB-інтерфейсу на базі FT2232H та зовнішнього аналогово-цифрового перетворювача з подальшою візуалізацією сигналу СВІ. Застосування синхронізованого циклу *Timed Loop* дозволило реалізувати режим багатократного експерименту для цифрового усереднення даних.

До операторів процедур програмування FTDI входять: GDI – зчитування опису, ODD – надання доступу, RD – скидання, T/R – вибір пам'яті, GQS – зчитування числа байтів в буфері, RBD – зчитування байту даних, CD – завершення доступу.

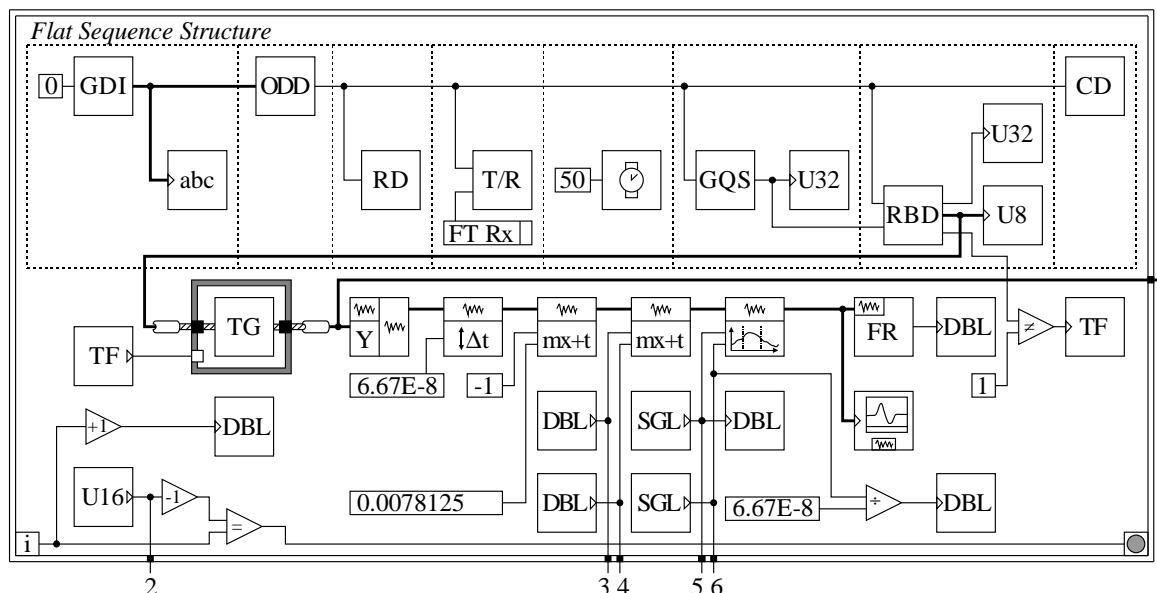


Рис. 28. Структурна схема підпрограми ВІ для зчитування та оброблення масиву експериментальних даних: abc – термінал ASCII, DBL – термінал чисел подвійної точності, FR – блок визначення частоти-носія, SGL – термінал чисел одинарної точності, TF – термінал логікових даних, TG – блок синхронізації, U8(U16) – термінал беззнакових цілих.

Для реалізації ШПФ, що забезпечує візуалізацію усередненого сигналу СВІ в частотній області та аналізу окремих складових спектру ЯКР запропонована підпрограма ВІ СЗД (рис. 29). Структурна схема, основою якої є модулі *FFT* та *PS/PSD*, дозволяє застосовувати алгоритми віконного цифрового оброблення спектральних характеристик сигналів СВІ, та уможлиблює відображення енергетичного спектру ЯКР.

Аналогічно інтервалу дискретизації в часовій області, існує інтервал між спектральними компонентами з роздільною здатністю за частотою:

$$\Delta f = \frac{f_0}{N},$$

де N – кількість комплексних точок.

Сигнал СВІ оцифровується з частотою дискретизації $f_0 = 15$ МГц, що забезпечує значення інтервалу між N вибірками рівне близько $6,67 \times 10^{-8}$ с. При постійній f_0 інтервал Δf для $N = 65536$ складає 229 Гц і зростає до 0,9 кГц при зменшенні N до 16384 (випадок реєстрації мультиплетних спектрів ЯКР, тривалість СВІ ≈ 650 мкс).

Інформація, що передається сигналом СВІ, може бути накопичена шляхом проведення багатократного експерименту. Наявність шумів у тракці спектрометра призводить до похибки вимірювання, що може бути зменшена використанням усереднення періодично повторюваного сигналу. Така процедура є оптимальною за критерієм максимальної правдоподібності у випадку, якщо корисний сигнал приймається на фоні адитивного шуму з нормальним розподілом.

Усереднення в часі може здійснюватися за алгоритмами звичайного лінійного або нормованого підсумовування з поступовим виведенням результатів. В основу алгоритму лінійного усереднення покладено формулу:

$$M = \sum_{k=1}^n x(t_k + iT_0),$$

де t_k – початок відліку; T_0 – інтервал часу між вибірками дискретних значень розгортки $x(t)$; n – число розгортки (число циклів накопичення); i – поточне значення вибірки; k – поточне значення розгортки; $x(t_k + iT_0)$ – дискретне значення реалізації на i -ій вибірці.

Блок-схема підпрограми, що реалізує запропонований алгоритм приведена на рис. 30. Алгоритму лінійного усереднення притаманний суттєвий недолік, обумовлений наявністю постійної складової в шумовому спектрі та неперервним переміщенням базової лінії вгору за інтенсивністю разом із корисним сигналом. Цей недолік можна усунути нормованим усередненням за формулою:

$$M_k^i = M_{k-1}^i + \frac{f(t_k + iT_0) - M_{k-1}^i}{2^q},$$

де N – кількість повторень розгортки; M_k^i , M_{k-1}^i – поточне значення середнього за результатами k та $k - 1$ проходів; k – поточне значення розгортки, яке змінюється від 0 до n ; q – значення степені, яке дорівнює 0 або 1, якщо $k = 1$ або 2, інші q вибираються з нерівності: $3 \cdot 2^{q-2} - 1 < k < 3 \cdot 2^{q-1}$.

Блок-схема підпрограми, що реалізує алгоритм нормованого усереднення, приведена на рис. 31.

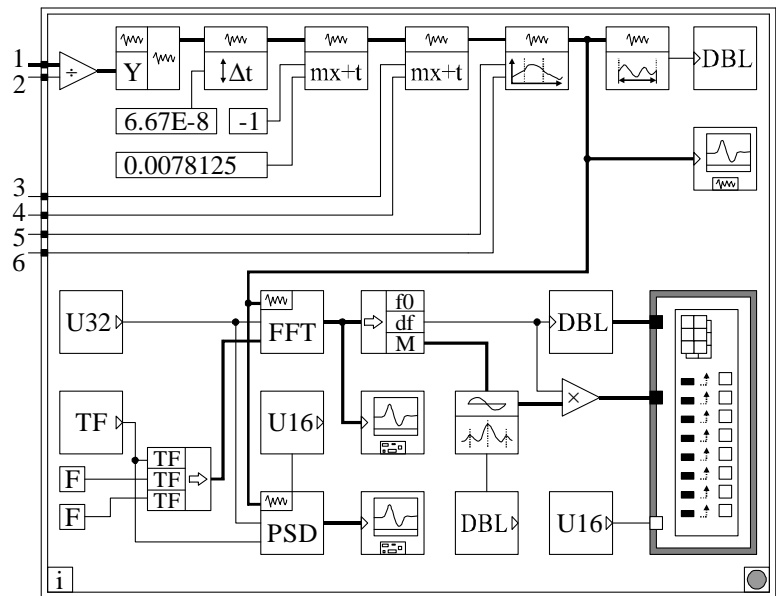


Рис. 29. Структурна схема підпрограми VI для спектрального аналізу СВІ

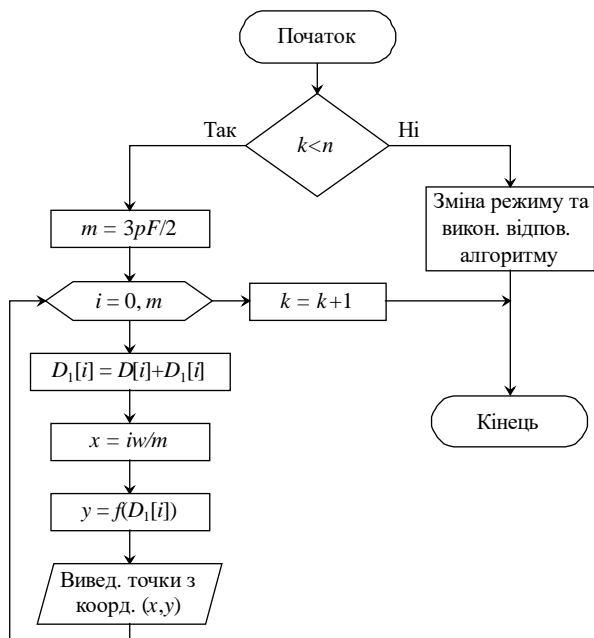


Рис. 30. Блок-схема підпрограми лінійного усереднення

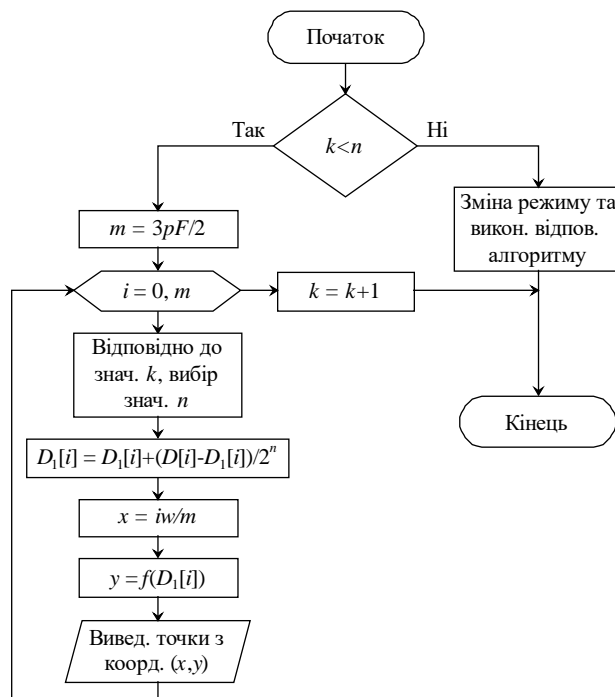


Рис. 31. Блок-схема підпрограми нормованого усереднення

У шостому розділі – «Апробація радіоелектронних засобів імпульсної спектроскопії шляхом експериментальних досліджень ЯКР у шаруватих напівпровідниках» – приведені результати експериментальних досліджень властивостей шаруватих напівпровідникових кристалів *GaSe* та *InSe*, отриманих з використанням розроблених методів імпульсної радіоспектроскопії ЯКР.

В ЯКР-термометрії значення температури визначається частотою найбільш інтенсивної лінії резонансного спектру. В спектрі ЯКР ізотопу ^{69}Ga (рис. 32) частота резонансу при температурі $20\text{ }^\circ\text{C}$ становить 19110 кГц та 19162 кГц для ліній «а» та «б», відповідно. Із температурної залежності частоти ліній спектру (рис. 33) випливає, що вона є лінійною з крутизною перетворення $1,54\text{ кГц/град}$ в інтервалі $250 - 400\text{ }^\circ\text{K}$.

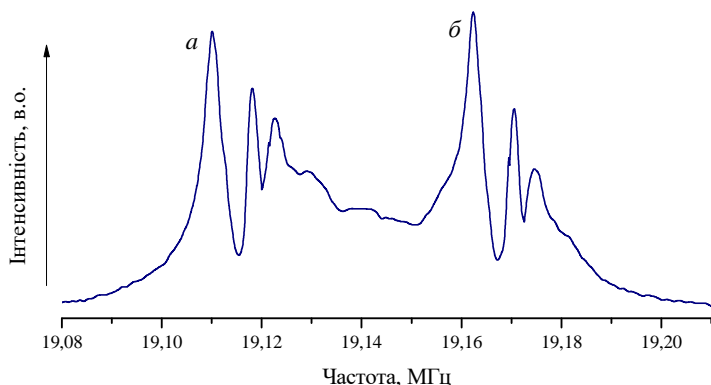


Рис. 32. Спектр ЯКР для ізотопу ^{69}Ga в *GaSe*: інтенсивність резонансних ліній на шкалі резонансних частот

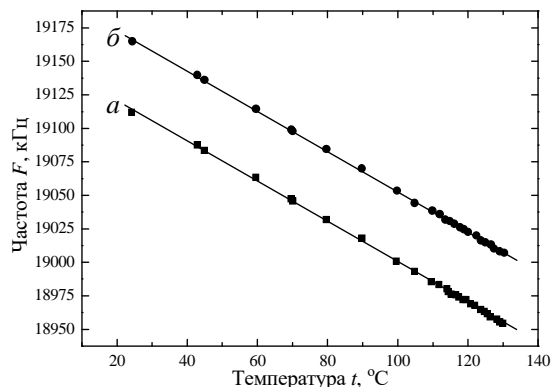


Рис. 33. Температурна залежність частоти для ліній «а» і «б» спектру ЯКР ізотопу ^{69}Ga в *GaSe*

Для напівпровідникової сполуки *InSe* характерними є складні мультиплетні спектри ЯКР, що розташовані в 4-х діапазонах із середніми частотами $10,25$;

20,5; 30,75 і 41 МГц. На рис. 34 приведений спектр ЯКР ізотопу ^{115}In в InSe , отриманий швидким перетворенням Фур'є спаду ядерної індукції, викликаного імпульсом збудження тривалістю 3 мкс та потужністю 250 Вт на частоті 20,5 МГц при температурі 20 °С.

Температурна залежність частоти ЯКР ^{115}In досліджувалась в області 0 – 100 °С (рис. 35). Залежність спостерігалась для двох інтенсивних ліній «а» і «б» в спектрі ЯКР. Було встановлено, що в даному інтервалі температур залежність резонансної частоти від температури для InSe , на відміну від інших сполук (наприклад, KClO_3 , NaClO_3), є близькою до лінійної. Відносно високий коефіцієнт перетворення «частота-температура» (2,35 кГц/град) дозволяє застосувати напівпровідникову сполуку InSe в якості термометричної речовини, що уможливило створення еталонного термометра на основі ЯКР з точністю вимірювання не гіршою 0,05 °С.

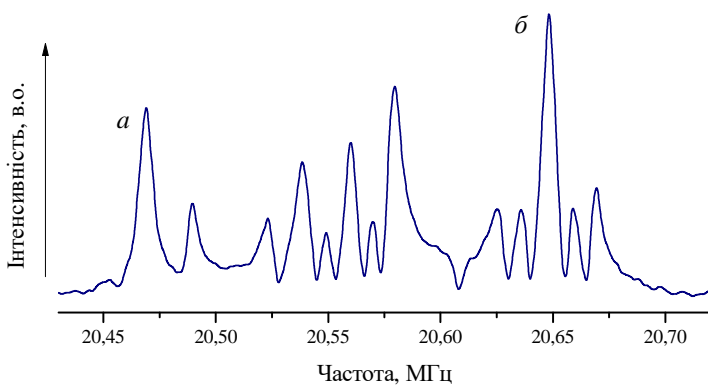


Рис. 34. Спектр ЯКР для ізотопу ^{115}In в InSe для спінового переходу на частоті 20,5 МГц

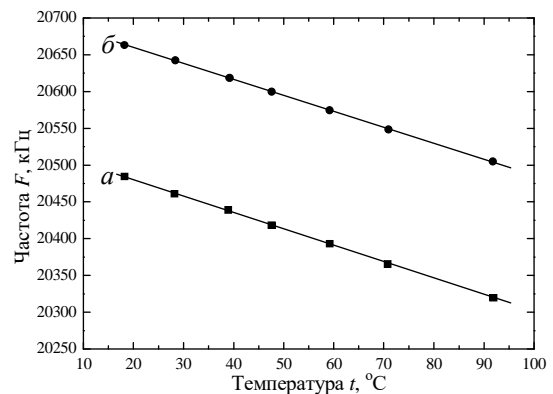


Рис. 35. Температурна залежність частоти для ліній «а» і «б» спектру ЯКР для ізотопу ^{115}In в InSe

Послідовне спостереження спектрів ЯКР ^{115}In для спінового переходу $3/2 \leftrightarrow 5/2$ в зонах монокристалічного злитка InSe n-типу провідності проводилося за допомогою сідлоподібних котушок. Спектри реєструвалися при переміщенні вирощеного злитку з заданим кроком відносно приймально-передавальної котушки (рис. 36). Максимальна інтенсивність резонансного сигналу спостерігається при орієнтації кристалу – $B_1 \perp c$. Порівняння спектрів, зареєстрованих у різних зонах злитка, дозволяє визначати однорідність кристалічної структури сполуки.

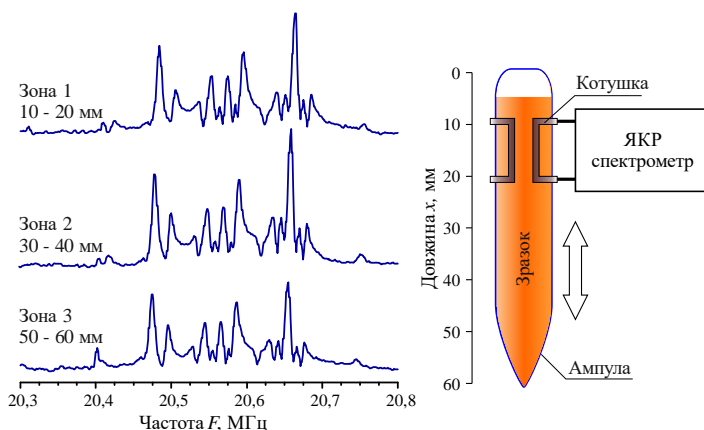


Рис. 36. Реєстрація спектрів ЯКР в режимі сканування монокристалічного злитку InSe у напрямку росту кристалу з розплаву

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ РОБОТИ ТА ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі представлено розв'язання науково-прикладної проблеми покращення сигнальних характеристик (чутливості, точності, ширини реєстрованого спектру) із одночасним збереженням енергетичних характеристик (інтенсивності радіочастотного випромінювання) радіоелектронних засобів імпульсної спектроскопії ЯКР шляхом синтезу їх структурних, конфігураційних та принципових електричних схем. Основні результати роботи можливо сформулювати так:

1. На основі проведеного аналізу існуючих експериментальних методів спостереження ЯКР в діапазоні частот $\sim 2 - 1000$ МГц можна зробити висновок, що розроблення нових методів прямого імпульсного детектування з чутливістю близькою до чутливості подвійного резонансу викликає значний інтерес науковців. Це обумовлено тим, що відсутність котушок магнітної модуляції та застосування сучасної компонентної бази забезпечить зниження вартості та масо-габаритних показників обладнання і уможливить його ефективне впровадження в різні галузі науки та народного господарства України.

2. Запропоновано імітаційну модель однокотушкового когерентного Фур'є спектрометра ЯКР та досліджено головні етапи інформаційних перетворень сигналу СВІ. Розвинуто концепцію побудови тракту передавання портативного імпульсного ЯКР спектрометра та проведено імітаційне моделювання його роботи. Встановлено, що при малій тривалості шумового імпульсу зондування (~ 1 мкс) в приймальному каналі з шириною смуги пропускання 1 МГц спостерігається залежність притаманна δ -подібним радіочастотним імпульсам, а при збільшенні тривалості до 100 мкс – ширина смуги зростає до значень 600 – 700 кГц. Її подальше зростання обмежене смугою пропускання приймального каналу.

3. Запропоновано рознесення частоти синхронного детектора і частоти заповнення імпульсу збудження шляхом застосування в Фур'є-спектрометрі ЯКР розділених прямих цифрових синтезаторів частоти. Це забезпечує коректне відтворення форми спектрів ЯКР, а також унеможливорює вплив на приймальний тракт спектрометра паразитної завади, частота якої дорівнює частоті імпульсу зондування. Синхронізація початкової фази імпульсу зондування із початковою фазою опорної частоти синхронного детектора забезпечила рівномірне збудження спінової індукції при реєстрації резонансних спектрів з шириною смуги до 0,5 МГц в діапазоні частот ЯКР 10 – 50 МГц.

4. Розроблено структуру та MATLAB Simulink модель цифрового квадратурного приймача сигналів ЯКР. Проведено синтез компенсаційних фільтрів та комп'ютерне моделювання сигнальних перетворень в приймальному тракті радіоспектрометра. Встановлено, що застосування прямого оцифровування сигналу СВІ дозволяє істотно скоротити кількість каскадів аналогової частини приймача, а отже – зменшити рівень шумів та позасмугових спектральних складових.

5. Представлено метод і алгоритм експрес-ідентифікації спектрів ЯКР, що полягають у збудженні резонансу короткими імпульсами з шумовим заповненням та цифровому обробленні отриманих даних. У результаті статистичного кореляційного аналізу на прикладі моноселеніду індію встановлено, що при застосуванні цифрового накопичення і усереднення даних сигналу СВІ, взаємна кореляція між $N-1$ -ю та N -ю ітераціями зростає. Коефіцієнт кореляції Пірсона досягає значень 0,8 – 0,92, що вказує на коректну ідентифікацію резонансного сигналу.

6. Досліджено топологію напруженості високочастотного поля в робочій зоні приймально-передавальної котушки сідлоподібної форми для спектрометра ЯКР. З

метою визначення топології магнітного поля створено модель фізичної конструкції сідлоподібної котушки у середовищі COMSOL Multiphysics. За результатами проведених розрахунків та отриманих карт полів визначено мінімально можливі відносні значення об'єму робочої зони котушки (28,12 % від її повного об'єму). Рекомендований розмір досліджуваних зразків становить $12 \times 18 \times 10 \text{ мм}^3$.

7. Проведено параметричне оцінювання ефективності алгоритмів генерування цифрових періодичних сигналів на основі вбудованих апаратних систем. Встановлено, що при зміні розмірності таблиці перекодування від 2^5 до 2^{26} рівень спектральних складових вищих порядків зменшується. При дробових значеннях приросту фази та прямій дискретизації КНС змінюється в інтервалі $2 \times 10^{-2} - 5 \times 10^{-8}$, а при застосуванні лінійної інтерполяції цей інтервал становить $2 \times 10^{-3} - 5 \times 10^{-8}$. Застосування інтерполяції значень функції \sin , представлені дискретними відліками на часовому інтервалі $0 - 2\pi$ забезпечило зменшення об'єму ПЗП з 768 Мбіт до 192 кбіт при значеннях КНС, що не перевищують 5 %.

8. Для проведення досліджень із застосуванням радіоспектроскопічних та релаксаційних методик в ЯКР запропоновано формувач імпульсних послідовностей, відмінною особливістю якого є його реалізація із застосуванням багатфункціонального програмно керованого синтезатора частоти із можливістю швидкісної амплітудної та фазової маніпуляції. Формувач забезпечує фазову прив'язку височастотного заповнення відео імпульсів до їх фронтів. Розроблено синтезатор частот на основі програмованої логікової інтегральної схеми з використанням методу прямого цифрового синтезу сигналів. Діапазон робочих частот становить 1 – 50 МГц а мінімальна тривалість формованого радіоімпульсу – 100 нс.

9. Розроблено цифрову систему керування імпульсним Фур'є радіоспектрометром ЯКР лабораторного типу, головні функціонально-алгоритмічні методи якої реалізовані в програмованій логіковій інтегральній схемі. Створені засобами синтаксису моделювання динамічних режимів логікових структур на основі автомату кінцевих станів та функціональних модулів алгоритм запропонованої програми та конфігураційна структура ПЛІС передбачають налаштування усіх необхідних режимів роботи ЯКР спектрометра та здійснення оперативного контролю за проведенням радіофізичного експерименту.

10. Для імпульсного спектрометра ядерного квадрупольного резонансу з робочим діапазоном частот 1 – 50 МГц запропоновано широкосмуговий підсилювач із середньою вихідною потужністю 400 – 500 Вт. Підсилювач, що складається з трьох каскадів із загальним коефіцієнтом підсилення 58 дБ в області середніх частот і забезпечує низький рівень спотворень підсилюваного сигналу є окремим модулем імпульсного радіоспектрометра. Крім цього, підсилювач забезпечує режим імпульсного зміщення активних елементів проміжного і вихідного каскадів, внаслідок чого розсіювана потужність зменшується на 45,8 – 98,39 % для радіоімпульсів шпаруватістю $10 \leq S \leq 1000$.

11. Запропоновано апаратно-програмну реалізацію компактної системи збору даних для імпульсного спектрометра ЯКР, апаратні рішення якої базуються на основі мультипротокольного USB–245FIFO перетворювача і забезпечують передавання даних зі швидкістю до 480 Мб/с. Синтезовано віртуальний інструмент LabVIEW для візуалізації та оброблення сигналів СВІ на базі засобів графічного об'єктно-орієнтованого програмування. Показником високої інформативності розробленої системи є візуалізація складних мультиплетних спектрів ЯКР з шириною смуги до 7,5 МГц та роздільною здатністю за частотою $\approx 200 \text{ Гц}$.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

(наведено згідно чинного Наказу МОНМС України № 1112 від 17.10.2012, п. 2.1)

1. Григорчак І. І. Фізичні процеси у супрамолекулярних ансамблях та їх практичне застосування: монографія / І. І. Григорчак, Б. А. Лукіянець, А. Ю. Підлужна, Л. Ф. Політанський, Г. В. Понеділок, А.П. Саміла, О.Г. Хандожко. – Чернівці: Видавництво ЧНУ ім. Ю. Федьковича, 2016. – 536 с. (Монографія, ISBN 978-966-423-366-5)
2. Samila A. Energy efficiency increase of NQR spectrometer transmitter at pulse resonance excitation with noise signals / A. Samila, V. Khandozhko, L. Politansky // Solid State Nuclear Magnetic Resonance. – 2017. – Vol. 87. – P. 10-17. (Друковане іноземне наукове періодичне видання з напряму; індексується Scopus, WoS; ISSN 0926-2040; IF: 2.1)
3. Samila A. Peculiarities of using s-simulation for parametric identification of multiplet ^{115}In NQR spectra in InSe / A. Samila // Measurement. – 2017. – Vol. 106. – P. 109-115. (Друковане іноземне наукове періодичне видання з напряму; індексується Scopus, WoS; ISSN 0263-2241; IF: 2.4)
4. Саміла А. П. Широкополосный энергоэффективный усилитель мощности для импульсного я.к.р.-спектрометра / А. П. Саміла, Л. Ф. Політанський, В. А. Хандожко // Приборы и техника эксперимента. – 2016. – № 3. – С. 153-154. (Друковане іноземне наукове періодичне видання з напряму; індексується Scopus, WoS; ISSN 0032-8162; IF: 0.6)
5. Samila A. P. Prompt Quality Monitoring of InSe and GaSe Semiconductor Crystals by the Nuclear Quadrupole Resonance Technique / A. P. Samila, G. I. Lastivka, V. A. Khandozhko, and Z. D. Kovalyuk // Semiconductors. – 2016. – Vol. 50, No. 8. – P. 1034-1037. (Друковане іноземне наукове періодичне видання з напряму; індексується Scopus, WoS; ISSN 1063-7826; IF: 0.9)
6. Bobalo Yuriy. Implementation of pulsed radiospectroscopy methods of NQR based on FPGA / Yu. Bobalo, Z. Hotra, O. Hotra, L. Politans'kyu, A. Samila // Metrol. Meas. Syst. – 2015. – Vol. 22, Issue 3. – P. 363-370. (Друковане іноземне наукове періодичне видання з напряму; індексується Scopus, WoS; ISSN 0860-8229; IF: 1.6)
7. Samila A. Simulation of magnetic field topology in a saddle-shaped coil of nuclear quadrupole resonance spectrometer / A. Samila // Progress In Electromagnetics Research Letters. – 2015. – Vol. 56. – P. 83-88. (Друковане іноземне наукове періодичне видання з напряму; індексується Scopus; ISSN 1937-6480; IF: 0.7)
8. Ластівка Г. І. Температурна залежність спектрів ЯКР і параметрів кристалічної ґратки InSe / Г. І. Ластівка, А. П. Саміла, М. Д. Паранський, З. Д. Ковалюк, В. Н. Балазюк, В. О. Хандожко // Ж. нано- електрон. фіз. – 2017. – Т. 9, № 2. – С. 02023-1-4. (Наукове фахове видання; індексується Scopus, WoS; ISSN 2077-6772; IF: 0.4)
9. Саміла А. П. Вимірювання індукції магнітного поля із застосуванням ефекту Зеємана в ядерному квадрупольному резонансі сполук GaSe та InSe / А. П. Саміла, Г. І. Ластівка, В. О. Хандожко // Ж. нано- електрон. фіз. – 2016. – Т. 8, № 4. – С. 04081-1-4. (Наукове фахове видання; індексується Scopus, WoS; ISSN 2077-6772; IF: 0.4)
10. Саміла А. П. Ядерний квадрупольний резонанс і сенсорні властивості шаруватих напівпровідникових кристалів GaSe та InSe / А. П. Саміла, В. О. Хандожко, З. Д. Ковалюк // Ж. нано- електрон. фіз. – 2015. – Том 7, № 3. – С. 03024-1-5. (Наукове фахове видання; індексується Scopus, WoS; ISSN 2077-6772; IF: 0.4)
11. Саміла А. П. Генерація гармонічного коливання для синтезу цифрових си-

гналів на основі вбудованих апаратних систем / А. П. Саміла, Л. Ф. Політанський // Вісник Хмельницького національного університету. Технічні науки. – 2017. – №1(245). – С. 116-120. (Наукове фахове видання; індексується Index Copernicus; ISSN 2307-5732)

12. Саміла А. П. Апаратно-програмна реалізація системи збору даних для імпульсного спектрометра ЯКР / А. П. Саміла // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – 2017. – № 1-2. – С. 16-22. (Наукове фахове видання; індексується РИНЦ; ISSN 2225-5818)

13. Саміла А. П. Рознесення частот детектування та збудження в імпульсному спектрометрі ядерного квадрупольного резонансу / А. П. Саміла, Г. І. Ластівка, В. О. Хандожко // Вісник Хмельницького національного університету. Технічні науки. – 2016. – №5(241). – С. 231-234. (Наукове фахове видання; індексується Index Copernicus; ISSN 2307-5732)

14. Саміла А. П. Застосування статично-конфігурованої ПЛІС у цифровій системі керування радіоспектрометром ЯКР / А. П. Саміла // Телекомунікаційні та інформаційні технології. – 2016. – № 4(53). – С. 73-82. (Наукове фахове видання; ISSN 2412-4338)

15. Саміла А.П. Програмно-технічний комплекс проектування систем з великим ступенем інтеграції на програмованому кристалі / А.П. Саміла, Т.А. Каземірський // Международный научный журнал Acta Universitatis Pontica Euxinus. Специальный выпуск. – 2016. – С. 573-578. (Друковане іноземне наукове періодичне видання з напрямку; індексується Index Copernicus; ISSN 1312-1669)

16. Samila Andriy. A Control Unit for a Pulsed NQR-FFT Spectrometer / Andriy Samila, Alexander Khandozhko, Ivan Hryhorchak, Leonid Politans'kyu, Taras Kazemirskiy // IAPGOS. – 2015. – Vol. 5(4). – P. 55-58. (Друковане іноземне наукове періодичне видання з напрямку; індексується Index Copernicus; ISSN 2083-0157)

17. Саміла А. П. Разработка цифрового синтезатора частот на ПЛИС для импульсного Фурье-радио-спектрометра ЯКР / А. П. Саміла // Международный научно-исследовательский журнал. – 2013. – № 12(19). – С. 124-127. (Друковане іноземне наукове періодичне видання з напрямку; індексується РИНЦ; ISSN 2303-9868)

18. Хандожко А. Г. Импульсный радиоспектрометр ЯКР с эффективным подавлением переходного процесса / А. Г. Хандожко, В. А. Хандожко, А. П. Саміла // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. – 2013. – № 6/12(66). – С. 21-25. (Наукове фахове видання; індексується Index Copernicus, РИНЦ; ISSN 1729-3774)

19. Хандожко В. О. Спостереження ЯКР в термометричній речовині Cu_2O / В. О. Хандожко, Л. Ф. Політанський, А. П. Саміла // Сенсорна електроніка і мікросистемні технології. – 2013. – Т. 10, № 4. – С. 23-27. (Наукове фахове видання; індексується Index Copernicus, РИНЦ; ISSN 1815-7459)

20. Хандожко В. О. Порівняння результатів детектування ЯКР методами неперервного та імпульсного спостереження / В. О. Хандожко, Л. Ф. Політанський, А.П. Саміла // Вісник національного університету «Львівська політехніка». «Радіоелектроніка та телекомунікації». – 2013. – Вип. 766. – С. 35-40. (Наукове фахове видання; індексується Index Copernicus; ISSN 0421-0399)

21. Хандожко В. О. Детектування ультразвукових ехо-імпульсів у кристалах при низьких рівнях збудження / В. О. Хандожко, М. Д. Раранський, Л. Ф. Політанський, В. Н. Балазюк, А. П. Саміла // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. – 2012. – № 6/11(60). – С. 29-33. (Наукове фахове видання; індексується Index Copernicus, РИНЦ; ISSN 1729-3774)

22. Політанський Л. Ф. Подавлення синхронної помехи в ЯКР с модуляцією Зеємана / Л. Ф. Політанський, В. О. Хандожко, А. П. Саміла // *Технология и конструирование в электронной аппаратуре*. – 2012. – № 2. – С. 8-11. (Наукове фахове видання; індексується РИНЦ; ISSN 2225-5818)

23. Политанский Л. Ф. Анализ шумовых и сигнальных характеристик автодинного спин-детектора / Л. Ф. Политанский, В. А. Хандожко, А. П. Самила // *Вісник Національного технічного університету "Харківський політехнічний інститут". Збірник наукових праць. Тематичний випуск: Нові рішення в сучасних технологіях*. – Харків: НТУ "ХПІ". – 2012. – № 68. – С. 104-110. (Наукове фахове видання; індексується Index Copernicus; ISSN 2079-5459)

24. Хандожко О. Г. ЕПР і ЯКР У шаруватому кристалі GaSe:Gd / О. Г. Хандожко, Г. І. Ластівка, З. Д. Ковалюк, А. П. Саміла // *Вісник національного університету «Львівська політехніка». «Електроніка»*. – 2011. – Вип. 708. – С. 179-183. (Наукове фахове видання; індексується Index Copernicus; ISSN 0421-0399)

25. Samila Andriy. A Computational Model of Signal Transformations in Pulsed NQR Spectrometer / Andriy Samila, Galina Lastivka, Leonid Politansky // *The International Conference TCSET'2016 "Modern problems of radio engineering, telecommunications, and computer science"*. – Ukraine, Lviv-Slavske. – February, 2016. – P. 37-39. (Scopus)

26. Саміла А. П. Перенесення частоти детектування в спектрометрі з імпульсним збудженням ЯКР / А. П. Саміла, Г. І. Ластівка, В. О. Хандожко // *Фізико-технологічні проблеми передавання, оброблення та зберігання інформації в інфокомунікаційних системах, V Міжнародна науково-практична конференція*. – Чернівці, Україна. – Листопад, 2016. – С. 94-95.

27. Samila A. Quality assessment of layer-structured semiconductor single crystals by nuclear quadrupolesonance method / Andriy Samila, Alexander Khandozhko, Galina Lastivka, Leonid Politansky, Victor Khandozhko // *Proceedings of SPIE 9809, Twelfth International Conference on Correlation Optics*. – Ukraine, Chernivtsi. – 2015. – P. 980900–1-4. (Scopus)

28. Samila Andriy. FPGA-based Programmable Pulse Sequencer for NQR-FFT Spectrometer / Andriy Samila, Vladislav Andrushchak, Fedor Kuku // *The International Conference TCSET'2014 "Modern problems of radio engineering, telecommunications, and computer science"*. – Ukraine, Lviv-Slavske. – February-March, 2014. – P. 190-191. (Scopus)

29. Хандожко В. О. Вимірювання індукції магнітного поля із застосуванням ефекту Зеємана в ядерному квадрупольному резонансі / В. О. Хандожко, А. П. Саміла // *Матеріали XIII міжнародної науково-технічної конференції «Вимірювальна та обчислювальна техніка в технологічних процесах»*. – Одеса-Затока, Україна. – Червень, 2014. – С. 69-70.

30. Хандожко О. Г. Ефект Зеємана в ядерному квадрупольному резонансі сполук GaSe та InSe / О. Г. Хандожко, В. О. Хандожко, А. П. Саміла // *Фізико-технологічні проблеми радіотехнічних пристроїв, засобів телекомунікацій, нано- та мікроелектроніки, IV Міжнародна науково-практична конференція*. – Чернівці, Україна. – Жовтень, 2014. – С. 16-17.

31. Саміла А. П. Стенд лабораторний для проектування систем з великим ступенем інтеграції на програмованому кристалі / А. П. Саміла, В. Ю. Андрущак, Д. В. Воробець, Р. А. Янчишин // *Фізико-технологічні проблеми радіотехнічних пристроїв, засобів телекомунікацій, нано- та мікроелектроніки, IV Міжнародна науково-*

практична конференція. – Чернівці, Україна. – Жовтень, 2014. – С. 42.

32. Саміла А. П. Функціонально-алгоритмічні методи автоматизації імпульсної та релаксаційної спектроскопії ЯКР / А. П. Саміла, Т. А. Каземірський // Фізико-технологічні проблеми радіотехнічних пристроїв, засобів телекомунікацій, нано- та мікроелектроніки, IV Міжнародна науково-практична конференція. – Чернівці, Україна. – Жовтень, 2014. – С. 43-45.

33. Khandozhko V. Temperature and baric dependence of nuclear quadruple resonance spectra in indium and gallium monoselenides / V. Khandozhko, N. Raranskii, V. Balazjuk, Z. Kovalyuk, A. Samila // Proceedings of SPIE 9066, Eleventh International Conference on Correlation Optics. – Ukraine, Chernivtsi. – 2013. – P. 90661G–1-7. (Scopus)

34. Саміла А. П. Модуль керування та аналізу даних для імпульсного Фур'є-спектрометра ЯКР / А. П. Саміла, В. О. Хандожко // Науково-практична конференція «Інформаційно-вимірювальні технології та системи». – Київ, Україна. – Жовтень, 2013. – С.49.

35. Хандожко В. О. Термометричні властивості моноселеніда індію / В. О. Хандожко, М. Д. Раранський, А. П. Саміла // Науково-практ. конф. «Інформаційно-вимірювальні технології та системи». – Київ, Україна. – Жовтень, 2013. – С.56.

36. Хандожко О. Г. Імпульсний когерентний радіоспектрометр ЯКР / О. Г. Хандожко, В. О. Хандожко, А. П. Саміла // Фізико-технологічні проблеми радіотехнічних пристроїв, засобів телекомунікацій, нано- та мікроелектроніки, III Міжнародна науково-практична конференція. – Чернівці, Україна. – Жовтень, 2013. – С. 46-47.

37. Саміла А. П. Спостереження ЯКР в термометричній речовині Cu_2O / А. П. Саміла, В. О. Хандожко // Фізико-технологічні проблеми радіотехнічних пристроїв, засобів телекомунікацій, нано- та мікроелектроніки, III Міжнародна науково-практична конференція. – Чернівці, Україна. – Жовтень, 2013. – С. 48.

38. Каземірський Т. А. Програмно-апаратний комплекс для дослідження пружних та непружних властивостей моно- та полікристалів / Т. А. Каземірський, Є. І. Курек, А. В. Олійнич-Лисюк, А. П. Саміла // Фізико-технологічні проблеми радіотехнічних пристроїв, засобів телекомунікацій, нано- та мікроелектроніки, III Міжнародна науково-практична конференція. – Чернівці, Україна. – Жовтень, 2013. – С. 76.

39. Хандожко В. О. Вплив тиску на спектр ядерного квадрупольного резонансу в InSe / В. О. Хандожко, А. П. Саміла // Шістнадцята відкрита науково-технічна конференція ІТРЕ НУЛП з проблем електроніки та інфокомунікаційних систем. – Львів, Україна. – Квітень, 2013р. – С. 84.

40. Саміла А. П. Детектування ультразвукових ехо-імпульсів у кристалах при низьких рівнях збудження / А. П. Саміла, В. Н. Балазюк, М. Д. Раранський, В. О. Хандожко // П'ятнадцята відкрита науково-технічна конференція ІТРЕ НУЛП з проблем електроніки та інфокомунікаційних систем. – Львів, Україна. – Квітень, 2012. – С. 25.

41. Хандожко В. О. Установка для дослідження ультразвукових ехо-імпульсів у кристалах / В. О. Хандожко, М. Д. Раранський, Л. Ф. Політанський, В. Н. Балазюк, А. П. Саміла // Фізико-технологічні проблеми радіотехнічних пристроїв, засобів телекомунікацій, нано- та мікроелектроніки, II Міжнародна науково-практична конференція. – Чернівці, Україна. – Жовтень, 2012. – С. 69-70.

42. Хандожко О. Г. Особливості спектрів ЯКР з Фур'є перетворенням / О. Г. Хандожко, В. О. Хандожко, А. П. Саміла // Фізико-технологічні проблеми ра-

діотехнічних пристроїв, засобів телекомунікацій, нано- та мікроелектроніки, II Міжнародна науково-практична конференція. – Чернівці, Україна. – Жовтень, 2012. – С. 71-72.

43. Ластивка Г. И. Ориентационная зависимость спектра ЯКР в InSe / Г. И. Ластивка, А. Г. Хандожко, З. Д. Ковалюк, А. П. Саміла // Сборник докладов Международной научной конференции "Актуальные проблемы физики твердого тела" ФТТ-2011. – Т. 2. – Минск, Беларусь. – Октябрь, 2011. – С. 56-58.

44. Патент № 87571 UA, МПК(2014), G01N 24/00. Процес реєстрації температури на основі монокристалу селеніда галію / Ковалюк З. Д., Хандожко В. О., Балазюк В. Н., Раранський М. Д., Саміла А. П. Заявник ЧНУ імені Юрія Федьковича. – № u201310965; заявл. 13.09.13; опубл. 10.02.14, Бюл. № 3.

45. Патент № 84872 UA, МПК(2013.01), G01N 24/00. Застосування напівпровідникового кристала GaSe як термометричної речовини для термометра на основі ядерного квадрупольного резонансу / Хандожко В. О., Раранський М. Д., Ковалюк З. Д., Балазюк В. Н., Саміла А. П. Заявник ЧНУ імені Юрія Федьковича. – № u201302015; заявл. 18.02.13; опубл. 11.11.13, Бюл. № 21.

46. Патент № 82390 UA, МПК(2006) G01N 29/34. Процес реєстрації ультразвукових імпульсів у твердому тілі / Ковалюк З. Д., Хандожко В. О., Балазюк В. Н., Раранський М. Д., Саміла А. П. Заявник і власник ЧНУ ім. Ю.Федьковича. – №201303106; заявл.14.03.13; опубл. 25.07.13, Бюл. № 14.

АНОТАЦІЯ

Саміла А.П. Структурний та функціональний синтез радіоелектронних засобів імпульсної спектроскопії матеріалів з квадрупольними ядрами атомів. – На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук за спеціальністю 05.12.13 – радіотехнічні пристрої та засоби телекомунікацій. – Національний університет “Львівська політехніка” Міністерства освіти і науки України, м. Львів, 2018.

Дисертацію присвячено розробленню наукового базису та апаратно-програмній реалізації принципово нових рішень для впровадження експериментальних методів імпульсної Фур’є та релаксаційної спектроскопії ядерного квадрупольного резонансу.

Наукові дослідження і розробки, що представлені в дисертаційній роботі базуються на розв’язанні завдань аналізу, синтезу, оптимізації структурних та принципівих схем і режимів їх роботи. Це уможливило досягнення мети дослідження – апаратно-програмної реалізації портативного радіоспектрометра ядерного квадрупольного резонансу із покращеними сигнальними та енергетичними характеристиками шляхом схемного синтезу та оптимізації режимів роботи.

Розроблено імітаційну модель імпульсного методу спостереження ядерного квадрупольного резонансу на основі базової структури однокотушкового когерентного Фур’є-радіоспектрометра без перетворення несучої частоти. Проведено комп’ютерне моделювання сигнальних перетворень сигналу вільної індукції та спінової луни в радіочастотних трактах імпульсного радіоспектрометра при синусоїдальному та шумовому збудженні резонансу.

Проведено розрахунок та розроблено лабораторний макет енергоефективного ширококутвого передавача, що може бути використаний при вивченні ізотопів з квадрупольними моментами ^{14}N , ^{35}Cl , ^{63}Cu , ^{69}Ga , ^{71}Ga , ^{113}In , ^{115}In та інших.

На основі програмного та апаратного забезпечення фірми “Altera” та систем

автоматизованого проектування Quartus II і Altium Designer розроблено конфігураційні структури і принципові схеми синтезатора частот, програматора багатоімпульсних послідовностей, аналогових високочастотних модулів та системи керування радіоспектрометром.

З метою дослідження якості та вивчення сенсорних властивостей проведено експериментальні спостереження ядерного квадрупольного резонансу в малих об'ємах шаруватих напівпровідникових кристалів *GaSe* та *InSe* з використанням когерентного лабораторного радіоспектрометра на основі багатофункціонального програмно-керованого цифрового обчислювального ядра.

Ключові слова: спектрометр ядерного квадрупольного резонансу, імпульсне збудження, енергоефективний передавач, програмована логікова інтегральна схема, синтез частот, програматор послідовностей, система збору даних, віртуальний інструмент, сенсорні властивості, шаруваті напівпровідникові кристали.

АННОТАЦІЯ

Самила А.П. Структурный и функциональный синтез радиоэлектронных средств импульсной спектроскопии материалов с квадрупольными ядрами атомов. – На правах рукописи.

Диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук по специальности 05.12.13 – радиотехнические устройства и средства телекоммуникаций. – Национальный университет “Львівська політехніка” Министерства образования и науки Украины, г. Львов, 2018.

Диссертация посвящена разработке научного базиса и аппаратно-программной реализации принципиально новых решений для внедрения экспериментальных методов импульсной Фурье спектроскопии ядерного квадрупольного резонанса.

Научные исследования и разработки, представленные в диссертационной работе, базируются на решении алгоритмических, схемотехнических, конфигурационно-структурных задач, что позволило достичь цели исследования – реализации аппаратно-программной комплексной радиотехнической системы регистрации сигналов ядерного квадрупольного резонанса путем усовершенствования метода импульсного возбуждения и алгоритмов информационных преобразований сигналов спада спиновой индукции для решения проблемы точности исследования полупроводниковых структур малых объемов.

Разработана имитационная модель импульсного метода наблюдения ядерного квадрупольного резонанса на основе базовой структуры однокатушечного когерентного Фурье-радиоспектрометра без преобразования несущей. Проведено компьютерное моделирование сигнальных преобразований сигнала свободной индукции и спинового эха в радиочастотных трактах импульсного радиоспектрометра при синусоидальном и шумовом возбуждении резонанса.

Проведен расчет энергоэффективности и разработан лабораторный макет широкополосного передатчика, который может быть использован при изучении изотопов с квадрупольными моментами ^{14}N , ^{35}Cl , ^{63}Cu , ^{69}Ga , ^{71}Ga , ^{115}In и прочих.

На основе синтаксиса моделирования динамических режимов логических структур разработаны алгоритмы формирования многоимпульсных последовательностей Ханна, Карра-Паррселла, Мейбума-Гилла для релаксационной спектроскопии ядерного квадрупольного резонанса.

Проведены экспериментальные испытания реализованного на основе многофункционального программно-управляемого цифрового вычислительного ядра когерентного лабораторного радиоспектрометра путем импульсного наблюдения

ядерного квадрупольного резонанса в малых объемах слоистых полупроводниковых кристаллов *GaSe* и *InSe* с целью исследования их качества и изучения сенсорных свойств.

Ключевые слова: спектрометр ядерного квадрупольного резонанса, импульсное возбуждение, энергоэффективный передатчик, программируемая логическая интегральная схема, синтез частот, программатор последовательностей, система сбора данных, виртуальный инструмент, сенсорные свойства, слоистые полупроводниковые кристаллы.

ABSTRACT

Samila A.P. Structural and functional synthesis of the radioelectronic means for pulsed spectroscopy of materials with quadrupole nuclei of atoms. – On the rights of the manuscript.

A thesis submitted in fulfillment of the Doctor of Engineering Science degree on specialty 05.12.13 - Radio Engineering Devices and Telecommunication Means. – Lviv Polytechnic National University of Ministry for Education and Science of Ukraine, Lviv, 2018.

The thesis is dedicated to development of scientific basis and hardware-software implementation of fundamentally new solutions for the experimental methods deployment of pulsed Fourier spectroscopy of nuclear quadrupole resonance (NQR).

Scientific investigations and developments represented in the thesis are based on solving the algorithmic, circuit, configuration-structural problems whose solution allowed achieving the purpose of the study, namely implementation of hardware-software complex radio technical system of recording NQR signals by improving pulse excitation method and the algorithms of informational transformation of spin induction decay signals to solve the problem of accuracy of the study of semiconductor structures of small volumes.

A simulation model of pulsed method for NQR observation was developed on the basis of single-coil coherent Fourier radio spectrometer without carrier frequency conversion. Computer simulation of signal transformations of the free induction signal and spin echo in radio frequency paths of pulsed radio spectrometer at sinusoidal and noise excitation of resonance was carried out.

The dependences of parameters of signal energy spectra at the output of transmitter of NQR pulsed spectrometer on the duration of sine and noise excitation pulses were studied. The energy efficiency was calculated, and the laboratory model of energy-efficient broadband transmitter was developed that can be used in the study of isotopes with quadrupole moments ^{14}N , ^{35}Cl , ^{63}Cu , ^{69}Ga , ^{71}Ga , ^{113}In , ^{115}In , etc.

A parametric estimation of the efficiency of generation algorithms most suitable for synthesis of digital periodic signals on the basis of embedded hardware systems was performed. On the basis of modeling syntax of dynamic modes in logical structures, formation algorithms of multi-pulse Han, Carr-Purcell, and Meiboom-Gill sequences were developed for the relaxation spectroscopy of nuclear quadrupole resonance. A hardware-software data collection system for pulsed NQR spectrometer was developed.

Experimental testing of coherent laboratory radio spectrometer based on a multi-functional software-controlled digital computing core was performed by pulsed observation of nuclear quadrupole resonance in small volumes of layered semiconductor crystals *GaSe* and *InSe* for the purpose of studying their quality and sensor properties.

Key words: nuclear quadrupole resonance spectrometer, pulsed excitation energy efficient transmitter, programmable logic integrated circuit, frequency synthesis, programmer sequences, data acquisition system, virtual instrument, sensory properties, layered semiconductor crystals.

Скорочення, що прийняті в авторефераті

АЦП	– аналогово-цифровий перетворювач;
АЧХ	– амплітудо-частотна характеристика;
ВІ	– віртуальний інструмент;
ВЧ	– високі частоти;
ККД	– коефіцієнт корисної дії;
ККФ	– крос-кореляційна функція;
КНС	– коефіцієнт нелінійних спотворень;
КХ	– короткі хвилі;
НІХ	– нескінченна імпульсна характеристика;
ПВП	– псевдовипадкова послідовність;
ПЗП	– постійний запам'ятовуючий пристрій;
ПК	– персональний комп'ютер;
ПЛІС	– програмована логікова інтегральна схема;
ПЦСЧ	– прямий цифровий синтезатор частот;
РППК	– радіозв'язок з програмованими параметрами компонентів;
САПР	– система автоматизованого проектування;
СВІ	– спад вільної індукції;
СЗД	– система збору даних;
СІХ	– скінченна імпульсна характеристика;
УКХ	– ультракороткі хвилі;
ФЧХ	– фазо-частотна характеристика;
ШПФ	– швидке перетворення Фур'є;
ЯКР	– ядерний квадрупольний резонанс;
ЯМР	– ядерний магнітний резонанс.

Підписано до друку 19.01.2018. Формат 60x 84/16
Папір офсетний. Друк різнографічний. Ум.-друк. арк. 0,9.
Обл.-вид. арк. 0,9. Тираж 100. Зам. А-001.

Видавництво та друкарня Чернівецького національного університету
58002, Чернівці, вул. Коцюбинського, 2
e-mail: ruta@chnu.edu.ua

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК №891 від 08.04.2002 р.

