

Синтезаторы прямого цифрового синтеза частоты: возможности и ограничения для микроволновой спектроскопии

Е. А. Алексеев

*Радиоастрономический институт НАН Украины,
ул. Краснознаменная, 4, г. Харьков, 61002, Украина
E-mail: ealekseev@rian.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 30 декабря 2010 г.

На основе анализа переходных процессов в системах фазовой автоподстройки частоты показано, что широкодиапазонный спектрометр с быстрым сканированием частоты может быть построен с применением синтезаторов прямого цифрового синтеза частоты. Скорость записи молекулярных спектров при этом может быть сопоставима с получаемой с помощью спектрометра FASSST. Вид и длительность переходных процессов позволяют обеспечить высокоточную частотную модуляцию, что в свою очередь позволяет минимизировать искажения формы спектральных линий и, следовательно, ошибки при измерениях частот. Вместе с тем применение синтезаторов прямого цифрового синтеза не дает никаких преимуществ для спектроскопии когерентного спонтанного излучения.

Ключевые слова: синтезатор прямого цифрового синтеза, спектрометр, фазовая автоподстройка частоты, переходные процессы

1. Введение

Широкодиапазонные записи молекулярных спектров дают визуальную панорамную картину исследуемого спектра, что существенно упрощает процесс идентификации спектральных линий, особенно на начальной стадии исследований. Такие записи имеют особое значение при лабораторных спектральных исследованиях молекул, представляющих интерес для радиоастрономии и астрофизики. Они позволяют получать информацию, необходимую для радиоастрономических наблюдений, даже для тех молекул, для которых существующие теоретические модели не дают адекватного описания спектра. Именно поэтому многие годы исследователи искали возможности построения спектрометров, позволяющих получать такие широкодиапазонные записи за минимально возможное время. И если в инфракрасном диапазоне это уже давно стало нормой (см., например, [1, 2]), более того, спектрометры такого класса уже долгое время выпускаются серий-

но [3], то в миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах длин волн к настоящему времени известно лишь несколько более или менее удачных попыток построения спектрометров, обеспечивающих широкодиапазонные записи спектров.

Первый спектрометр такого типа был построен в Нижнем Новгороде в конце 80-х гг. прошлого века [4]. Он получил название РАД-3 (радиоспектрометр с акустическим детектором третьего поколения). Современное состояние этого спектрометра подробно представлено в работе [5]. В качестве источника излучения используется лампа обратной волны (ЛОВ), частота которой стабилизируется по опорному резонатору Фабри-Перо. Широкодиапазонное сканирование частоты обеспечивается при механической перестройке опорного резонатора, а измерения частот молекулярных линий осуществляются при сравнении со спектром хорошо изученной молекулы SO_2 [6, 7] и при использовании специальной системы оптической калибровки. Наиболее существенным не-

достатком этого спектрометра является сравнительно низкая точность: ± 0.5 МГц. Заметим также, что механическая перестройка опорного резонатора влечет за собой существенные ограничения скорости записи спектров.

Несколько позже идеи, использованные при построении спектрометра РАД-3, получили дальнейшее развитие при реализации спектрометра университета Огайо (США) [8, 9], получившего название FASSST (FAst Scan Submillimeter Spectroscopic Technique). Благодаря тому что авторы применили только параметрическую стабилизацию частоты ЛОВ, отказавшись от применения опорного резонатора, им удалось получить рекордную скорость записи молекулярных спектров, которая для одиночной реализации достигает 10000 МГц/с. Однако приемлемая точность получается только в результате обработки как минимум 200 независимых сканов вверх по частоте и дополнительных 200 независимых сканов вниз по частоте [10]. Таким образом, реальная скорость записи молекулярных спектров оказывается примерно на три порядка ниже и не превосходит 100 ГГц/ч. Измерение частот молекулярных линий, как и в случае РАД-3, обеспечивается по спектру молекулы SO_2 и при помощи специальной системы оптической калибровки. Высокая скорость сопровождается существенными искажениями формы линий, а точность оказывается примерно на два порядка ниже точности спектрометров, использующих синтез частоты.

Спектрометр, обеспечивающий широкодиапазонные записи спектров молекул, был построен и нами [11]. Наш подход существенно отличался от представленных выше – мы реализовали широкодиапазонный режим спектрометра на основе синтеза частоты. Такое решение не позволило получить высокую скорость записи спектров – максимально достижимая скорость не превышала значения 5 ГГц/ч, но при этом нам удалось сохранить точность измерений частот линий поглощения на уровне не хуже 0.01 МГц.

Следует заметить, что в настоящее время скорость записи спектров большинства современных микроволновых спектрометров [9, 12–18] ограничивается в первую очередь временем переключения частоты лежащих в их основе синтезаторов. В подавляющем большинстве случаев это различные синтезаторы с фазовой

автоподстройкой частоты фирмы Agilent Technologies. Работа в диапазоне миллиметровых и субмиллиметровых волн обеспечивается применением пассивных или активных умножителей частоты, а также умножителей на основе систем фазовой автоподстройки частоты (ФАПЧ).

Процесс переключения частоты выходного сигнала играет важнейшую роль в спектрометрах на основе синтезаторов частоты, поскольку именно таким образом обеспечивается запись спектров молекул. В настоящее время максимально достижимая скорость записи молекулярных спектров практически во всех лабораториях мира ограничивается именно длительностью переходных процессов при переключении частоты. Так, например, в Кельнском университете (Германия) [12–14] в качестве опорного синтезатора используются HP8673E или KVARZ [19]. Характерное время переключения значения частоты для них составляет порядка 40 мс. В спектрометре Института Физики (Варшава, Польша) [9] применяется опорный синтезатор HP8648C [20], переключение частоты в котором осуществляется за 100 мс. В спектрометре Лилльского университета наук и технологий (Франция) [15–17] в настоящее время применяется современный синтезатор E8257D [21], обеспечивающий переключение частоты за 11 мс. В спектрометре Института химических технологий в Праге (Чехия) [18] используют HP83650B [22], который переключается за 50 мс. Аналогичные синтезаторы применяются и в других лабораториях. Здесь следует заметить, что для записи спектров молекул необходимо использовать установившийся режим синтезатора. Как показывает практика применения приборов этого класса, при реальных измерениях для исключения шумов, вызванных переходными процессами, указанное производителем время следует увеличить в 2–3 раза. Таким образом получается, что интервал времени между соседними отсчетами в большинстве лабораторий определяется применяемыми промышленными синтезаторами частоты и составляет $25 \div 100$ мс и более.

Длительность переходных процессов при переключении частоты синтезаторов особенно важна для спектроскопии когерентного спонтанного излучения (КСИ). В 80–90-х гг. прошлого столетия в Нижнем Новгороде была предпринята попытка создания весьма оригинального

микроволнового спектрометра с регистрацией сигнала КСИ [23]. По своему строению этот спектрометр был очень близок к традиционным абсорбционным приборам. Главным его отличием являлась периодическая накачка исследуемого перехода с последующей супергетеродинной регистрацией излучения молекул. При этом как источником накачки, так и гетеродином служил один и тот же генератор с быстрым переключением значения выходной частоты с шагом в десятки мегагерц. Однако после публикации отдельных предварительных результатов эта идея не получила дальнейшего развития. По нашему мнению, основным препятствием для реализации спектрометра КСИ является скорость переключения с одного значения частоты на другое.

В последние годы активно развивается новый класс синтезаторов частоты, обеспечивающих чрезвычайно быстрое (вплоть до 10 нс) переключение частоты. Это синтезаторы прямого цифрового синтеза частоты (СПЦС) [24]. Из всех достоинств этих приборов мы упомянем лишь те, которые наиболее существенны для спектроскопии. Прежде всего, это высокие точность и скорость установки частоты. Кроме того, эти синтезаторы обладают уникальным свойством переключаться с одного значения частоты на другое без разрыва фазы. Однако этим приборам присущ серьезный недостаток – наличие побочных спектральных составляющих в выходном сигнале. Ранее мы показали [25], что этот недостаток можно преодолеть при помощи узкополосной адаптивной фильтрации. Нам удалось построить на основе СПЦС спектрометр миллиметрового диапазона [25, 26]. Однако при этом мы воспользовались только одним преимуществом этих синтезаторов – высокой точностью установки частоты. Вопрос повышения скорости записи молекулярных спектров при этом не решался.

Ниже мы проанализировали возможность максимально полного использования преимуществ СПЦС в микроволновых спектрометрах. Поскольку в настоящее время максимальное значение частоты выходного сигнала СПЦС не превышает 400 МГц, их применение в микроволновой спектроскопии сопровождается умножением частоты с использованием систем ФАПЧ. В этом случае скорость переключения частоты будет определяться длительностью переходных процессов в системах ФАПЧ.

В настоящей работе мы провели анализ переходных процессов в системах ФАПЧ, имея в виду повышение скорости записи спектров молекул, получение высокоточного частотно-модулированного сигнала. Кроме того, мы рассмотрели возможность реализации спектрометра КСИ.

2. Анализ переходных процессов при переключении частоты

В настоящее время невозможно построить спектрометр с быстрым сканированием в режиме синтеза частоты на основе серийно выпускаемых приборов. Такие спектрометры следует строить с применением СПЦС, а в качестве источника излучения, по нашему мнению, наиболее целесообразно применять ЛОВ. Такое решение позволяет обеспечить наиболее быструю перестройку частоты: самый быстрый в мире спектрометр FASSST [8-10] также построен на основе ЛОВ. СПЦС следует использовать в качестве источника опорного сигнала системы ФАПЧ, синхронизирующей частоту выходного сигнала ЛОВ. Это позволяет минимизировать кратность умножения частоты СПЦС и тем самым избежать необходимости фильтрации побочных спектральных составляющих в выходном сигнале. Диапазон сканирования в этом случае будет ограничен диапазоном перестройки СПЦС. На практике (при приемлемой кратности умножения частоты $\sim 10 \div 30$) этот диапазон может составлять сотни мегагерц. Широкодиапазонная запись спектров (в полном рабочем диапазоне спектрометра) может обеспечиваться при применении второго синтезатора частоты, работающего на частотах в единицы – десятки гигагерц, который будет переключаться сравнительно редко (один раз за десятки секунд), обеспечивая на рабочей частоте спектрометра шаг в сотни мегагерц. В качестве такого синтезатора может использоваться серийно выпускаемый прибор, поскольку требования к скорости его переключения существенно ниже: потеря десятков миллисекунд на фоне десятков секунд пренебрежимо мала.

Время переключения частоты выходного сигнала СПЦС чрезвычайно мало, поэтому максимально достижимая скорость переключения частоты микроволнового синтезатора будет определяться в первую очередь длитель-

ностью переходных процессов в системах ФАПЧ. Таким образом, предметом нашего исследования будет взаимодействие СПЦС и системы ФАПЧ, синхронизирующей ЛОВ. Традиционно анализ переходных процессов в теории автоматического управления проводится в пространстве изображений преобразования Лапласа [27]. Мы не будем отступать от общепринятых правил. Для анализа нам необходимо иметь передаточную функцию системы ФАПЧ, а также функции воздействия в пространстве изображений преобразования Лапласа.

2.1. Передаточная функция системы ФАПЧ

Системам ФАПЧ посвящено немало работ (см., например, [28]). Практическое руководство по их анализу и синтезу можно найти, например, в [29, 30]. Функциональная схема типичной системы ФАПЧ приведена на рис. 1. Она включает в себя фазовый детектор, фильтр, генератор, управляемый напряжением (ГУН), и цепь обратной связи, в большинстве случаев представляющую собой делитель частоты. Очевидно, что реальные элементы системы ФАПЧ обладают ограниченным быстродействием. Как правило, наиболее узкополосным является выходной каскад ФАПЧ, обеспечивающий управление частотой ЛОВ. Для уточнения модели мы введем в схему дополнительный фильтр нижних частот R_3C_2 , частота среза которого соответствует полюсе пропускания наиболее узкополосного элемента реальной системы. Его передаточная функция в пространстве изображений имеет вид:

$$k_3(s) = \frac{1}{1 + \tau_3 s},$$

где $\tau_3 = R_3C_2$, а s – параметр преобразования Лапласа.

Передаточная функция разомкнутой петли ФАПЧ представляет собой произведение передаточных функций всех элементов, изображенных на рис. 1 (кроме цепи обратной связи), и может быть записана как

$$k(s) = k_\phi k_f(s) k_3(s) k_v/s,$$

где k_ϕ – передаточная функция фазового детектора; $k_f(s)$ – передаточная функция пропорционально-интегрирующего фильтра; k_v/s – передаточная функция ГУН (в нашем случае это ЛОВ). Мы здесь принимаем во внимание тот факт, что ГУН является интегратором: управление ведется по частоте, а отклик регистрируется по фазе.

Для конкретного участка диапазона и конкретной рабочей частоты фазового детектора значения k_ϕ и k_v – это просто измеряемые величины, а передаточная функция пропорционально-интегрирующего фильтра (см. рис. 1) $k_f(s)$ имеет вид:

$$k_f(s) = \frac{1 + \tau_1 s}{\tau_2 s},$$

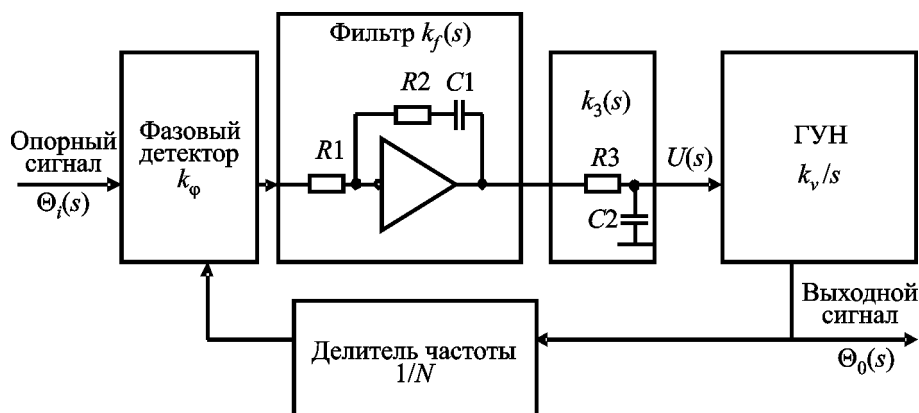


Рис. 1. Функциональная схема типичной системы ФАПЧ

где $\tau_1 = R_2 C_1$, а $\tau_2 = R_1 C_1$ (см. обозначения на рис. 1).

Система ФАПЧ является типичной системой с отрицательной обратной связью (рис. 1). Передаточная функция (по фазе) замкнутой системы ФАПЧ (т. е. с замкнутой петлей отрицательной обратной связи) может быть представлена в виде [31]:

$$\frac{\theta_o(s)}{\theta_i(s)} = \frac{k(s)}{1 + k(s)\beta(s)},$$

где $\theta_i(s)$ – фаза сигнала воздействия, т. е. фаза опорного сигнала ФАПЧ; $\theta_o(s)$ – фаза сигнала отклика, т. е. фаза выходного сигнала; $\beta(s) = 1/N$ – передаточная функция цепи обратной связи, N – коэффициент деления делителя частоты.

Таким образом, передаточная функция замкнутой системы ФАПЧ может быть представлена в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\theta_o(s)}{\theta_i(s)} &= \frac{N(1 + \tau_1 s)}{\frac{s^2 N \tau_2}{k_\phi k_v} (1 + \tau_3 s) + \tau_1 s + 1} = \\ &= \frac{\omega_n^2 N (1 + \tau_1 s)}{\tau_3 s^3 + s^2 + 2\zeta \omega_n s + \omega_n^2}, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\omega_n = \sqrt{\frac{k_\phi k_v}{N \tau_2}}$ – собственная частота системы ФАПЧ; $\zeta = \sqrt{\frac{k_\phi k_v}{N \tau_2}} \frac{\tau_1}{2} = \omega_n \frac{\tau_1}{2}$ – коэффициент затухания (демпфирующий фактор), определяющий устойчивость системы.

Здесь мы воспользовались общепринятыми обозначениями из теории автоматического управления [27]. Очевидно, что выражение (1) отличается от традиционного представления [29, 30] только наличием слагаемого $\tau_3 s^3$ в знаменателе.

2.2. Функции воздействия в пространстве изображений

Отличительной особенностью СПЦС является переключение с одного значения частоты на другое без разрыва фазы. Во временной области воздействие в виде переключения час-

тоты с шагом $\Delta\omega$ описывается единичной ступенчатой функцией Хевисайда с множителем $\Delta\omega$. Однако передаточная функция системы ФАПЧ записана в виде отношения фаз, поэтому фазовое воздействие будет представлено единичной нарастающей функцией с тем же множителем. Таким образом, при использовании СПЦС в качестве опорного источника ФАПЧ воздействие $\phi(t)$ может быть выражено следующим образом:

$$\phi(t) = \Delta\omega h(t),$$

где $h(t)$ – функция Хевисайда ($h(t) = 0$ при $t < 0$, и $h(t) = 1$ при $t \geq 0$).

В общем случае воздействие $\psi(t)$ при переключении частоты с произвольным фазовым сдвигом $\Delta\phi$ можно представить в виде суммы нарастающей и ступенчатой функций:

$$\psi(t) = (\Delta\omega t + \Delta\phi)h(t).$$

В пространстве изображений эти функции имеют вид:

$$L\{\phi(t)\} = \Phi(s) = \Delta\omega/s^2, \quad (2)$$

$$L\{\psi(t)\} = \Psi(s) = \frac{\Delta\omega}{s^2} + \frac{\Delta\phi}{s}. \quad (3)$$

2.3. Реакция системы ФАПЧ на переключение частоты

Мы имеем выражения для передаточной функции системы ФАПЧ (1), а также выражения для двух видов воздействия: с непрерывной фазой (2) и с произвольным сдвигом фазы при переключении (3). Реакция системы ФАПЧ может быть получена как произведение воздействия на передаточную функцию. Следует принять во внимание, что экспериментально мы можем наблюдать только сигнал $U(s)$ на входе ГУН (см. рис. 1). Для того чтобы получить вид этого сигнала, выражение для реакции ФАПЧ следует разделить на передаточную функцию ГУН, т. е. на k_v/s :

$$U(s) = \frac{\theta_o(s)}{\theta_i(s)} \Phi(s) (k_v/s)^{-1}.$$

Наблюдение сигнала на входе ГУН имеет дополнительное преимущество: этот отклик может быть пересчитан в значение частоты на его выходе, что позволяет простыми средствами оценить точность установки частоты. Таким образом, мы имеем возможность определить длительность переходного процесса для любого значения допустимой ошибки в установке частоты. Вид переходного процесса во временной области может быть получен после обратного преобразования Лапласа:

$$u(t) = L^{-1}\{U(s)\}. \quad (4)$$

Аналогично наблюдаемый отклик системы ФАПЧ на входе ГУН на воздействие с произвольным сдвигом фазы (3) можно выразить следующим образом:

$$u_{\varphi}(t) = L^{-1}\left\{\frac{\theta_o(s)}{\theta_i(s)}\Psi(s)(k_v/s)^{-1}\right\}. \quad (5)$$

Полученные таким образом выражения далее будем использовать для численного анализа реакции системы ФАПЧ на переключение частоты.

3. Результаты анализа и обсуждение

Для проведения численного анализа длительности переходных процессов при переключении частоты нам необходимо задаться некоторыми параметрами, и в первую очередь значением собственной частоты $\omega_n = 2\pi f_n$. Значение f_n ограничивается снизу нестабильностью частоты ЛОВ. Экспериментально установлено, что для обеспечения приемлемой стабильности частоты это значение должно быть $f_n > 0.4$ МГц. Для спектроскопии требуется максимально широкий диапазон рабочих частот (обычно это полный диапазон частот ЛОВ), в котором технически сложно обеспечить достаточное отношение сигнал/шум для работы системы ФАПЧ при больших значениях f_n . Вот почему максимальное значение f_n на практике ограничивается величиной порядка 2 МГц. Мы зададимся минимальным значением $f_n = 0.4$ МГц, которое будет соответствовать максимальной длительности переходных процессов.

Коэффициент затухания будем полагать $\zeta = 0.8$. Такое значение ζ нетрудно реализовать на практике. Значения постоянной времени $\tau_1 = 0.7$ мкс, коэффициента деления $N = 1$, крутизны перестройки $k_v = 40$ МГц/В возьмем из реально реализованной нами системы ФАПЧ, переходные процессы которой и будем исследовать экспериментально.

Наиболее узкополосным элементом реальных систем является выходной каскад ФАПЧ, который обеспечивает управление частотой ЛОВ. Прямое измерение полосы пропускания этого каскада, включая ЛОВ, затруднительно, однако косвенные оценки показывают, что значение $\tau_3 = 0.03$ мкс достаточно хорошо соответствует реализованной нами системе.

Максимальные возмущения в системе ФАПЧ наблюдаются при значениях произвольного сдвига фазы $\Delta\varphi = \pm 180^\circ$. Для полноты картины рассмотрим также случай с промежуточными значениями $\Delta\varphi = \pm 90^\circ$.

При выборе значения $\Delta\omega$ рассмотрим два предельных случая:

- 1) малого частотного шага, $\Delta\omega \leq \omega_n$, который соответствует как пошаговому сканированию частоты при записи спектров, так и получению частотно-модулированного сигнала;
- 2) большого частотного шага, $\Delta\omega > \omega_n$, который соответствует случаю спектроскопии КСИ, при этом значение промежуточной частоты для регистрации сигнала КСИ будет равно величине $\Delta\omega$.

3.1. Переходные процессы при малом частотном шаге

Значение частотного шага $\Delta f = \Delta\omega/(2\pi)$ при записях спектров молекул обычно варьируется в пределах $0.01 \div 0.05$ МГц (в зависимости от диапазона и задачи), при этом девиация частоты в субмиллиметровом диапазоне может достигать 0.5 МГц. Для моделирования переходных процессов зададимся значением $\Delta f = 0.5$ МГц, которое будет соответствовать максимальному возмущению при переключении частоты.

Вид переходных процессов, полученный при численном решении уравнения (5), для случая с произвольным фазовым сдвигом, представлен на рис. 2, а ($\Delta\varphi = \pm 180^\circ$ и $\Delta\varphi = \pm 90^\circ$). На этом же рисунке показан также переходной процесс при переключении частоты с непрерывной фазой $\Delta\varphi = 0^\circ$. Очевидно, что применение СПЧС принципиально меняет его вид: длительность не пре-

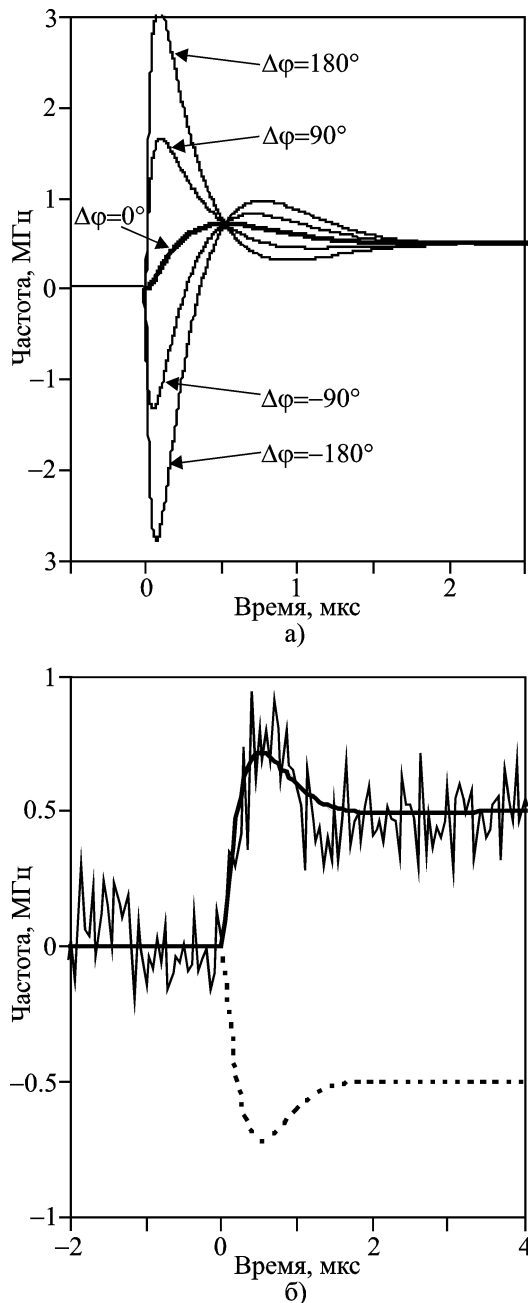


Рис. 2. Вид переходных процессов в синтезаторах частоты с ФАПЧ при переключении частоты с шагом $\Delta f = 0.5$ МГц при различных значениях фазового сдвига $\Delta\varphi$ (а); экспериментальная запись переходного процесса, наложенная на результат моделирования, и вид переходного процесса при $\Delta f = -0.5$ МГц (штриховая линия) (б)

вышает $1 \div 2$ мкс, а уровень перерегулирования не превосходит 60 %. Как следует из рис. 2, б, экспериментальная запись переходного процесса точно соответствует результатам моделирования. Шумы на экспериментальной записи соот-

ветствуют работе фазовой автоподстройки частоты, т. е. это корректирующий сигнал, который компенсирует реально существующую нестабильность частоты ЛОВ. Заметим, что вид переходного процесса не зависит от знака частотного шага – на рис. 2, б штриховой линией показана реакция системы ФАПЧ на переключение частоты с шагом $\Delta f = -0.5$ МГц.

Полученный результат открывает широкие перспективы повышения скорости записи молекулярных спектров: при длительности переходных процессов $\sim 1 \div 2$ мкс можно уверенно говорить о возможности измерений с временными затратами не более 1 мс на точку. При этом ограничение в 1 мс в первую очередь связано с применением частотной модуляции и соответствующего синхронного детектирования, т. е. это ограничение вызвано способом регистрации молекулярного поглощения, а не переходными процессами при переключении частоты. При частотном шаге 0.03 МГц и темпе измерений 1 мс на точку за секунду будет записываться участок спектра в 30 МГц, а это соответствует скорости записи молекулярных спектров порядка 100 ГГц/ч. Во введении мы показали, что именно такая скорость обеспечивается спектрометром FASSST. Однако при корректной реализации предложенных идей существенное повышение скорости записи спектров, в отличие от FASSST, достигается без потери точности измерений.

3.2. Применение СПЦС для формирования частотно-модулированного сигнала

Для повышения отношения сигнал/шум в большинстве современных спектрометров выходной сигнал источника излучения модулируется по частоте, а в приемной системе применяется синхронное детектирование [10, 12-18], поэтому вид переходных процессов при переключении частоты с непрерывной фазой представляет значительный интерес для формирования частотно-модулированного сигнала. Традиционно такой сигнал получают аналоговым способом: модулирующий сигнал вводится в управляющую цепь варикапа, включенного в колебательный контур автогенератора. Очевидными недостатками такого метода являются нелинейность и температурная зависимость перестроенной характеристики, что влечет за собой неопределенность и нестабильность девиации частоты, искажения модулирующего сигнала. В свою очередь эти фак-

торы ведут к тем или иным искажениям формы молекулярных линий, а также к ошибкам в определении значений их центральных частот [32]. Разумеется, для борьбы с этими явлениями уже выработаны определенные средства, например, введение специальных корректирующих цепей, улучшающих линейность перестроенных характеристик [33]. Все эти методы широко используются производителями измерительных приборов. Однако это лишь частичное решение проблемы, поскольку невозможно получить цифровую определенность для девиации частоты.

Изменения девиации частоты в процессе записи спектров наглядно иллюстрируются фрагментом записи спектра молекулы HNO_3 (рис. 3), полученном в 2007 г. с помощью спектрометра Лаборатории физики лазеров, атомов и молекул (г. Лилль, Франция) [15-17]. Источником излучения в этом спектрометре служила ЛОВ, частота которой стабилизировалась с помощью системы ФАПЧ по сигналам двух промышленных синтезаторов частоты, НР83711 и НР3325В. При фиксированном значении частоты НР83711 узкополосное сканирование (в пределах участка ~ 16 МГц) обеспечивалось синтезатором частоты НР3325В, задающим значение опорной частоты системы ФАПЧ, стабилизирующей частоту ЛОВ. Широкополосная запись спектра обеспечивалась при перио-

дическом одновременном переключении частоты как НР3325В, так и НР83711. При этом НР83711 переключался на начальное значение частоты следующего участка в ~ 16 МГц, а НР3325В возвращался к минимальному значению опорной частоты системы ФАПЧ.

Частотная модуляция при записи спектров молекул обеспечивалась при помощи НР3325В. Несмотря на то что разработчики НР3325В предприняли специальные меры по стабилизации значения девиации, она тем не менее претерпевает заметные изменения в процессе сканирования частоты. Ввиду монотонного характера этих изменений они не приводят к появлению заметного отклика на записи молекулярного спектра в пределах участка ~ 16 МГц. Однако при одновременном переключении частоты двух синтезаторов монотонность нарушается и девиация частоты изменяется скачкообразно. Эти изменения легко определить по характерным разрывам на записи спектров молекул, на рис. 3 они выделены эллипсами.

Естественно, что любые вариации индекса модуляции ведут в конечном счете к искажению формы линии и, соответственно, к ошибкам определения центральных частот переходов. Наиболее значительными ошибки будут в случае, если одновременное переключение двух

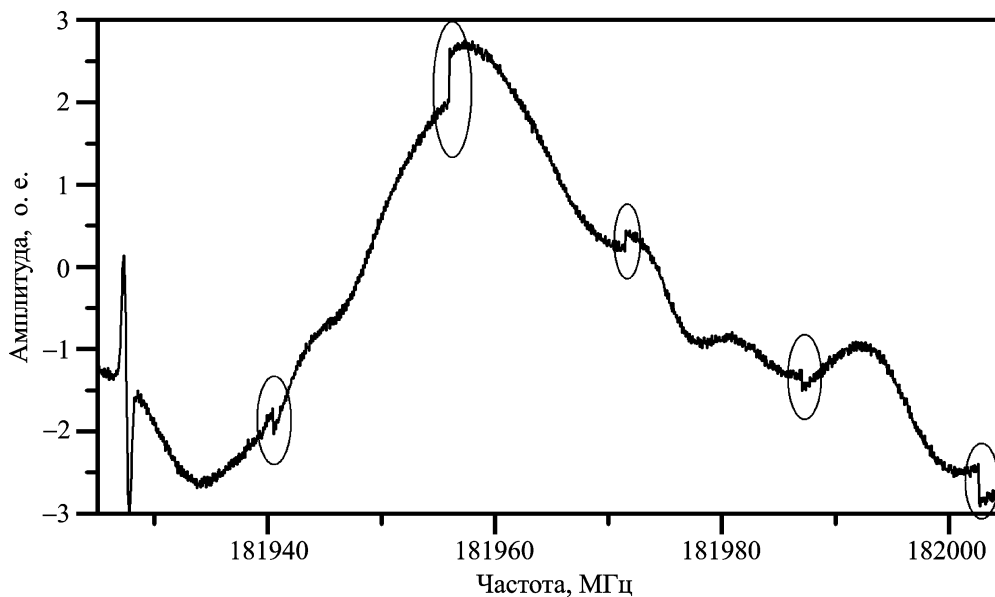


Рис. 3. Фрагмент записи вращательного спектра молекулы HNO_3 . Характерные разрывы на записи (обведены эллипсами) связаны с изменениями индекса модуляции в процессе записи спектра

синтезаторов придется непосредственно на линию поглощения.

В этом смысле модулятор на основе СПЦС обеспечивает практически идеальную определенность девиации, поскольку частотная модуляция реализуется путем переключения частоты между двумя значениями, каждое из которых задано с высокой точностью. Значение девиации частоты задается цифровым способом, что гарантирует его постоянство в процессе записи спектров молекул. Как следует из нашего анализа, переключение частоты с непрерывной фазой сопровождается незначительными симметричными возмущениями малой длительности ($\sim 1 \div 2$ мкс). Вот почему полученный таким образом частотно-модулированный сигнал дает минимально возможные, симметричные и при этом предсказуемые искажения формы молекулярной линии и, следовательно, минимально возможные ошибки в определении ее частоты. Более того, высокая определенность параметров частотно-модулированного сигнала позволяет учесть влияние модуляции на форму линий и тем самым исключить какие бы то ни было искажения.

Для предложенного способа формирования частотно-модулированного сигнала характерна одна особенность: регистрация спектров молекул возможна лишь в виде первой производной по частоте от формы линии. Это может оказаться определенным неудобством для сторонников регистрации спектров в виде второй производной, которых немало в мире спектроскопии. Решить эту проблему очень просто, проведя численное дифференцирование реализации.

Современные СПЦС позволяют обеспечивать частотную модуляцию не только в виде переключения между двумя значениями частоты. Есть возможность получать трапецеидальный закон изменения частоты и даже обеспечивать ступенчатую аппроксимацию синусоидальной модуляции. Заметим также, что один и тот же СПЦС может одновременно обеспечивать как быстрое сканирование частоты, так и частотную модуляцию.

3.3. Переходные процессы при большом частотном шаге

В случае спектроскопии КСИ величина частотного шага при переключении частоты источника излучения равна значению промежуточной частоты супергетеродинного приема сигнала

КСИ молекул. При характерной доплеровской ширине молекулярных линий $\sim 0.3 \div 0.5$ МГц длительность такого излучения составляет единицы микросекунд. Для надежной регистрации молекулярного излучения значение промежуточной частоты должно значительно превышать 10 МГц; в этом случае можно будет зарегистрировать хотя бы $10 \div 30$ периодов КСИ молекулы. Вот почему для моделирования и экспериментальной проверки мы выбрали значение $\Delta f = 32$ МГц.

Результаты моделирования переходных процессов с использованием выражений (4) и (5) показывают, что при частотном шаге $\Delta f = 32$ МГц их вид практически не зависит от значения фазового сдвига. На рис. 4 переходные процессы, соответствующие $\Delta\varphi = \pm 180^\circ$ и $\Delta\varphi = 0^\circ$, полностью совпадают (кривая 1). Это означает, что применение СПЦС для спектроскопии КСИ не дает никаких преимуществ. Заметим, что моделирование проводилось в предположении идеальности характеристик фазового детектора. Использование на прак-

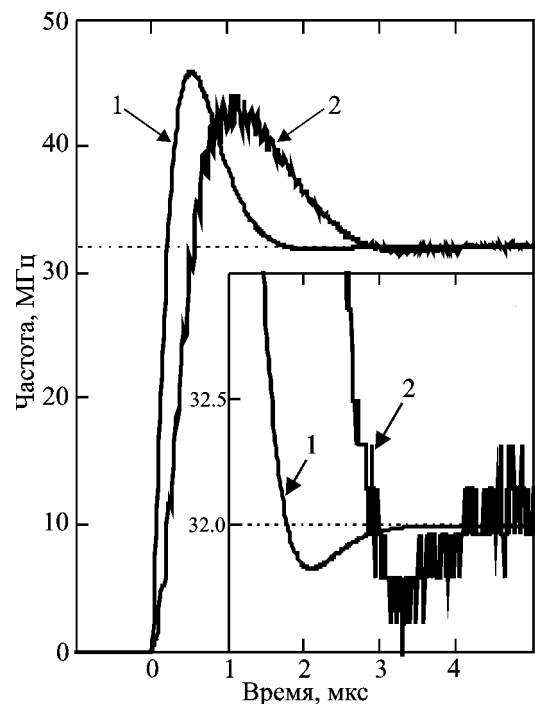


Рис. 4. Переходные процессы в синтезаторах с ФАПЧ при переключении частоты с шагом $\Delta f = 32$ МГц: кривая 1 соответствует случаям $\Delta\varphi = 0^\circ, \pm 180^\circ$; кривая 2 – экспериментальная запись переходного процесса

тике традиционного частотно-фазового детектора ведет к существенному увеличению длительности переходных процессов. Экспериментально полученная запись также приведена на рис. 4 (кривая 2). Очевидно, что длительность переходных процессов достигает $4 \div 5$ мкс, превосходя длительность когерентного спонтанного излучения (для наглядности на рис. 4 приведен увеличенный в 20 раз по амплитуде отклик системы ФАПЧ). Вот почему такой метод регистрации молекулярного поглощения оказывается неэффективным при массовых широкодиапазонных измерениях. Разумеется, если задаться целью построить спектрометр КСИ, то это возможно в сравнительно узком диапазоне частот, где отношение сигнал/шум будет достаточным для работы очень широкополосной ФАПЧ, $f_n > 10$ МГц. Однако в целом реализация спектрометра такого типа связана с неоправданно большими затратами, при этом получение полезного результата таких усилий (повышение чувствительности, точности) представляется весьма сомнительным.

4. Заключение

Проведенный анализ показывает, что широкодиапазонный спектрометр с быстрым сканированием частоты может быть построен на основе СПЦС. Скорость записи молекулярных спектров при этом может быть сопоставима со скоростью, получаемой с помощью спектрометра FASSST [8]. Вид и длительность переходных процессов при применении СПЦС позволяют обеспечить высокоточную частотную модуляцию, что в свою очередь позволяет минимизировать искажения формы спектральных линий и, следовательно, ошибки при измерениях частот. Вместе с тем применение СПЦС не дает никаких преимуществ для спектроскопии КСИ.

Литература

1. Carlotti M., di Lonardo G., Fusina L., Carli B., and Men-caraglia F. The submillimeter-wave spectrum and spectroscopic constants of SO_2 in the ground state // *J. Mol. Spectrosc.* – 1984. – Vol. 106, Is. 1. – P. 235-244.
2. Lolck J.-E., Poussiguet G., Pascaud E., and Guelachvili G. The Pentad Rotation-Vibrational States of $^{12}\text{CD}_4$: Wavenumber analysis of infrared and raman spectra of

- the ν_1 , ν_3 , $2\nu_2$, $\nu_2 + \nu_4$, and $2\nu_4$ bands // *J. Mol. Spectrosc.* – 1985. – Vol. 111, Is. 2. – P. 235-274.
3. <<http://www.bruckeroptics.com/>>
4. Белов С. П., Демкин В. М., Пученкин В. И., Третьяков М. Ю. Субмиллиметровый газовый спектрометр РАД третьего поколения: Препр. / АН СССР. Ин-т прикладной физики; №201. – Горький: 1988. – 24 с.
5. Belov S. P., Demkin V. M., Zobov N. F., Karyakin E. N., Krupnov A. F., Kozin I. N., Polyansky O. L., and Tretyakov M. Y. Microwave study of the submillimeter spectrum of the $\text{H}_2\text{O} \cdots \text{HF}$ dimer // *J. Mol. Spectrosc.* – 2007. – Vol. 241, Is. 2. – P. 124-135.
6. Alekseev E. A., Dyubko S. F., Ilyushin V. V., and Podnos S. V. The high-precision millimeter-wave spectrum of $^{32}\text{SO}_2$, $^{32}\text{SO}_2(\nu_2)$, and $^{34}\text{SO}_2$ // *J. Mol. Spectrosc.* – 1996. – Vol. 176, Is. 2. – P. 316-320.
7. Belov S. P., Tretyakov M. Y., Kozin I. N., Klisch E., Winnewisser G., Lafferty W. J., and Flaud J.-M. High frequency transitions in the rotational spectrum of SO_2 // *J. Mol. Spectrosc.* – 1998. – Vol. 191, Is. 1. – P. 17-27.
8. Petkie D. T., Goyette T. M., Bettens R. P. A., Belov S. P., Albert S., Helminger P., and De Lucia F. C. A fast scan submillimeter spectroscopic technique // *Rev. Sci. Instrum.* – 1997. – Vol. 68, No. 4. – P. 1675-1683.
9. Medvedev I., Winnewisser M., De Lucia F. C., Herbst E., Białkowska-Jaworska E., Pszczorłowski L., and Kisiel Z. The millimeter- and submillimeter-wave spectrum of the trans-gauche conformer of diethyl ether // *J. Mol. Spectrosc.* – 2004. – Vol. 228, Is. 2. – P. 314-328.
10. Kisiel Z., Dorosh O., Winnewisser M., Behnke M., Medvedev I. R., and De Lucia F. C. Comprehensive analysis of the FASSST rotational spectrum of $\text{S}(\text{CN})_2$ // *J. Mol. Spectrosc.* – 2007. – Vol. 246, Is. 1. – P. 39-56.
11. Илюшин В. В., Алексеев Е. А. Новые возможности миллиметровой спектроскопии: высокоточные обзорные записи спектров // *Радиофизика и радиоастрономия.* – 2000. – Т. 5, №3. – С. 247-255.
12. Lewen F., Gendriesch R., Pak I., Paveliev D. G., Hepp M., Schieder R., and Winnewisser G. Phase locked backward wave oscillator pulsed beam spectrometer in the submillimeter wave range // *Rev. Sci. Instrum.* – 1998. – Vol. 69, No. 1. – P. 32-39.
13. Winnewisser G. Spectroscopy in the terahertz region // *Vibrational spectroscopy.* – 1995. – Vol. 8, Is. 2. – P. 241-253.
14. Brünken S., Fuchs U., Lewen F., Urban Š., Giesen T., and Winnewisser G. Sub-Doppler and Doppler spectroscopy of DCN isotopomers in the terahertz region: ground and first excited bending states $(\nu_1\nu_2\nu_3) = (01^e f)$ // *J. Mol. Spectrosc.* – 2004. – Vol. 225, Is. 2. – P. 152-161.
15. Colmont J.-M., Bakri B., Rohart F., Włodarczak G., Demaison J., Cazzoli G., Dore L., and Puzzarini C. Inter-comparison between ozone-broadening parameters retrieved from millimetre-wave measurements by

- using different techniques // *J. Mol. Spectrosc.* – 2005. – Vol. 231, Is. 2. – P. 171-187.
16. Nguyen L., Buldyreva J., Colmont J.-M., Rohart F., Wlodarczak G., and Alekseev E. A. Detailed profile analysis of millimetre 502 and 602 GHz $N_2O - N_2(O_2)$ lines at room temperature for collisional linewidth determination // *Mol. phys.* – 2006. – Vol. 104, Nos. 16-17. – P. 2701-2710.
17. Cazzoli G., Dore L., Puzzarini C., Bakri B., Colmont J.-M., Rohart F., and Wlodarczak G. Experimental determination of air-broadening parameters of pure rotational transitions of HNO_3 : intercomparison of measurements by using different techniques // *J. Mol. Spectrosc.* – 2005. – Vol. 229, Is. 2. – P. 158-169.
18. Kania P., Střiteská L., Šimečková M., and Urban Š., Pressure shifts of acetonitrile ground state parameters // *J. Mol. Spectrosc.* – 2006. – Vol. 795, Iss. 1-3. – P. 209-218.
19. Krupnov A. F. and Pavlovsky O. P. Commercial Frequency Synthesizer of 118 GHz-178 GHz Range // *Int. J. Infrared Millimet. Waves.* – 1994. – Vol. 15, No. 10. – P. 1611-1624.
20. <<http://cp.literature.agilent.com/litweb/pdf/5965-3432E.pdf>>
21. <<http://cp.literature.agilent.com/litweb/pdf/5989-0698EN.pdf>>
22. <<http://cp.literature.agilent.com/litweb/pdf/5964-6162E.pdf>>
23. Герштейн Л. И., Вакс В. Л., Приползин С. И. Новые результаты в развитии и исследовании спектрометров когерентного спонтанного излучения // *Оптика и спектроскопия.* – 1988. – Т. 64, №1. – С. 3-4.
24. <<http://www.analog.com/>>, <<http://www.ieee.li/pdf/essay/dds.pdf>>
25. Алексеев Е. А., Захаренко В. В. Синтезатор прямого цифрового синтеза в микроволновой спектроскопии // *Радиофизика и радиоастрономия.* – 2007. – Т. 12, №2. – С. 205-213.
26. Motiyenko R. A., Alekseev E. A., Dyubko S. F., and Lovas F. J. Microwave Spectrum and Structure of Furfural // *J. Mol. Spectrosc.* – 2006. – Vol. 240, Is. 1. – P. 93-101.
27. Savant C. J. Fundamentals of the Laplace transformation. – New York, San Francisco, Toronto, London: McGraw-Hill Book company, inc., 1962. – 240 p.
28. Клэппер Дж., Фрэнкл Дж. Системы фазовой и частотной автоподстройки частоты / Пер. с англ. под ред. А. Ф. Фомина. – М.: Энергия, 1977. – 440 с.
29. <<http://www.onsemi.com/pub/Collateral/AND8040-D.PDF>>
30. <http://www.freescale.com/files/rf_if/doc/app_note/AN535.pdf>
31. Белецкий А. Ф. Теория линейных электрических цепей. – М.: Радио и связь, 1986. – 544 с.
32. De Vreede J. P. M., Gillis M. P. W., and Dijkerman H. A. Linewidth, lineshift, and lineshape measurements on rotational transitions of OCS using frequency modulation // *J. Mol. Spectrosc.* – 1988. – Vol. 128, Is. 2. – P. 509-520.
33. Cazzoli G. and Dore L. Lineshape measurements of rotational lines in the millimeter-wave region by second harmonic detection // *J. Mol. Spectrosc.* – 1990. – Vol. 141, Is. 1. – P. 49-58.

Синтезаторы прямого цифрового синтезу частоты: можливості та обмеження для мікрохвильової спектроскопії

Є. А. Алексеев

На основі аналізу перехідних процесів у системах фазового автопідстроювання частоти показано, що широкодіапазонний спектрометр зі швидким скануванням частоти може бути побудований із застосуванням синтезаторів прямого цифрового синтезу частоти. Швидкість запису молекулярних спектрів при цьому може бути порівняна з отримуваною за допомогою спектрометра FASSST. Вигляд і тривалість перехідних процесів дозволяють забезпечити високочастотну частотну модуляцію, що у свою чергу дозволяє мінімізувати спотворення форми спектральних ліній і, як наслідок, помилки у вимірюванні частот. Разом з тим застосування синтезаторів прямого цифрового синтезу не має жодних переваг у спектроскопії когерентного спонтанного випромінювання.

Direct Digital Synthesizers: Possibilities and Limitations for Microwave Spectroscopy

E. A. Alekseev

Based on the analysis of transients in the phase-locked loop, it is shown that a wide-range spectrometer with fast frequency scan may be constructed using direct digital synthesizers. Speed of record of molecular spectra in this case may be comparable with that of the FASSST spectrometer. Shape and duration of transients allow to provide high-accuracy frequency modulation that leads to minimal distortion of line shape and hence to minimal frequency determination errors. At the same time, application of the direct digital synthesizer does not give any advantage for spectroscopy of coherent spontaneous emission.