

文章编号: 1000-4556(2007)01-0053-04

正交检波系统的校正

孟 平, 丁 炜, 刘朝阳*

(波谱与原子分子物理国家重点实验室(中国科学院 武汉物理与数学研究所), 湖北 武汉 430071)

摘 要: 现有核磁共振波谱仪器大都采用正交检波系统, 这样可以避免谱线折叠, 降低对射频功率的要求, 提高信噪比. 正交检波系统如果两通道的增益不完全相同或相位不是严格相差 90° , 会导致产生镜像峰, 这种情况可以用相位循环来改善. 如果增益或相位差偏离较大, 则需要手工校正. 本文通过对单峰样品实验数据进行拟合的方法计算出增益和相位调节的幅度.

关键词: 核磁共振; 正交检波; 相敏检波器; 数据拟合

中图分类号: O482.53 文献标识码: A

引言

在核磁共振中, 主要有两类信号检测方法. 一类是单路的相敏检波, 这种检测方式不能区分正负频率, 为了避免谱线折叠, 必须将射频频率设在谱的外面. 这增大了对射频激发功率的要求, 并降低了接收信号的信噪比. 另一类是普遍使用的正交检波技术. 由于它需要两路相检波以区分正负频率, 因此射频信号频率可置于谱的中间. 然而, 当两通道的增益与相位微小的不平衡时, 谱图上就会产生镜像峰. 解决这个问题的有效方法是相位循环. 但对于长期使用、老化或故障造成增益或相位差与理想值偏离较大的仪器, 即使采用相位循环也不足以解决问题. 为此各公司都设计了调节增益和相位差的器件. 然而在实际工作中, 到底该怎么调节, 调节到什么程度, 往往只能凭借经验和尝试. 本文提出一种通过拟合计算给出调节依据的方法.

收稿日期: 2006-03-28; 收修改稿日期: 2006-05-21

作者简介: 孟平(1977-), 男, 湖北襄阳人, 硕士研究生, 无线电物理专业. * 通讯联系人: 刘朝阳, 电话: 027-87198790, Fax: 027-87199291, E-mail: chyliu@wipm.ac.cn.

1 正交检波原理

正交检波系统的方框图如下：

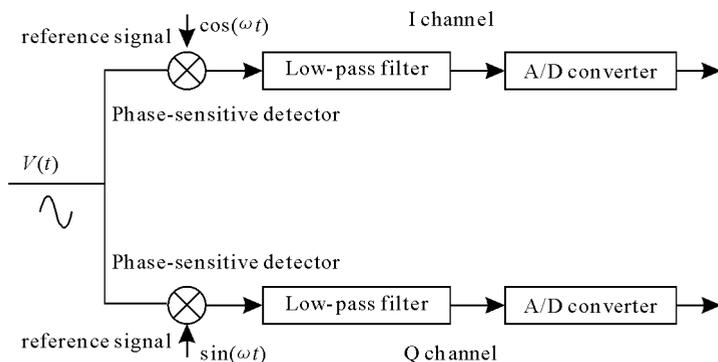


图 1 正交检波原理图

Fig. 1 Quadrature detection principle

正交检波系统由两路检波通道(I 通道和 Q 通道)组成(图 1), I、Q 通道的参考信号是相位相差 90° 的等幅射频信号。谱仪接收机收到的核磁共振信号 $V(t)$, 首先经过相敏检波器。相敏检波器实际上就是一个混频器或模拟乘法器, 使输入信号与参考信号相乘, 而输出信号是二者之乘积。

对于分子中只有一种磁等性类质子的简单情况, 比如 H_2O 、 CH_2Cl_2 分子。根据 Bloch 方程可以求得接收到的核磁共振信号为:

$$V(t) = A\cos(\omega_0 + \varphi)\exp(-t/T_2)$$

I 通道的参考信号为 $\cos(\omega t)$, 经过混频器即输入信号和参考信号相乘后为:

$$\frac{1}{2}A\{\cos[(\omega_0 + \omega)t + \varphi] + \cos[(\omega_0 - \omega)t + \varphi]\}\exp(-t/T_2)$$

所得输出为两项: 第一项为和频分量, 第二项为差频分量。经过低通滤波器滤掉高频部分 $(\omega_0 + \omega)$ 后, 上式可简化为:

$$\frac{1}{2}A\cos[(\omega_0 - \omega)t + \varphi]\exp(-t/T_2) \quad (1)$$

对于 Q 通道, 输入信号不变, 参考信号和 I 通道相差 90° 。根据类似方法可以计算出 Q 通道所采集到的信号为:

$$\frac{1}{2}A\sin[(\omega_0 - \omega)t + \varphi]\exp(-t/T_2) \quad (2)$$

然后 I、Q 通道分别将采集到的信号经过模拟数字(A/D)转换, 得到的数据分别作为复数的实部和虚部存储在一个矩阵里面, 也就是我们得到的 FID。

2 实验原理和过程

I、Q 通道的增益和相位可能存在一定的误差, 则(1)、(2)表达式中的常数 A 和相位 φ 不一定相同。另外, 通过数据拟合需要找出的是(1)、(2)表达式中各项的比例关系, 所以令 $\omega' = \omega_0 - \omega$ 。则 I 通道的表达式可以转换为:

$$A_I \cos(\omega' t + \varphi_I) \exp(-t/T_2) \quad (3)$$

Q 通道的表达式转换为:

$$A_Q \sin(\omega' t + \varphi_Q) \exp(-t/T_2) \quad (4)$$

实验中, 选取水作为实验样品, 进行单脉冲实验, 分别读出采集到的 FID 中的实部和虚部, 然后依据(3)、(4)表达式分别对它们拟合, 从拟合出的参数关系可以得到 I、Q 通道的增益和相位关系. 下面以 Varian 公司的 NMR 仪器为例详细说明拟合过程.

仪器所采集到的 FID 保存在该实验所对应的目录且文件名为 fid. 该文件是一个二进制文件, 除包含实验所采集到的数据外, 还包含一定的格式信息. 具体文件结构可参见参考文献[2]. 我们并没有必要自己编制程序来读取数据, matNMR(<http://matnmr.sourceforge.net/>)可以处理这一切. matNMR 是一个 matlab 下的 NMR 数据处理软件, 用 matlab 脚本文件开发, 所使用的变量可以在 matlab 的工作空间中直接访问, 所以可通过 matlab 的命令行来访问修改这些变量. matNMR 把 fid 数据读取到一个复数矩阵里面, 可以很容易的把它的实部、虚部分别保存到另外两个矩阵里面, 然后进行数据拟合. 需要注意的是 matlab 的 lsqcurvefit 函数拟合效果并不好. 表达式(3)和(4)中需要拟合的各个量的作用是独立的, 其中 A_I 和 A_Q 影响幅度, φ_I 和 φ_Q 决定图像的平移、 T_2 决定衰减的快慢, ω' 决定周期, 所以我们可以对各个量分别进行拟合. 从画出的数据图像, 先估计出需要拟合的某个量的值, 比如估计 $T_2 = 50$, 画出指数部分 $\exp(-t/T_2)$ 的图像, 通过其和数据图像轮廓线的吻合程度来调节 T_2 的值. 通过尝试, 可以很快的确定 T_2 的近似值. 同样的方法可以确定其它几个变量的近似值, 代入方程(3)和(4)得到 I、Q 通道的近似方程. 有了这两个方程, 就可以计算理论值和实际采集的数据的差的平方和, 从而可以用最小二乘法确定各个量的值.

图 2 是一个符合上述要求的 H_2O 的 H 谱, 经过傅立叶变换和相位校正后, 可明显观察到镜像峰的存在.

按照式(3)和(4)对 I、Q 通道的数据进行拟合, 得出 $A_I = 22\ 400$, $A_Q = 22\ 000$, $\omega' = 0.55$, $\varphi_I = 2.03$, $\varphi_Q = 1.94$, $T_2 = 86.1$. 由此可以看出 I、Q 通道的增益差为 $(22\ 400 - 22\ 000)/22\ 000 = 1.8\%$, 而相位差偏离 90° 为 $(2.03 - 1.94) * 180/3.14 = 5.16^\circ$. 在仪器调节的时候, 把 I 通道的增益和相位适当调小或者对应的调节 Q 通道. 经过调节, 消除了谱图中的镜像峰(图 3).

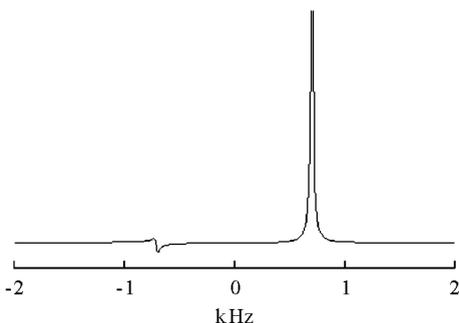


图 2 存在镜像峰的水 NMR 谱

Fig. 2 1H NMR spectrum of water with mirror peak

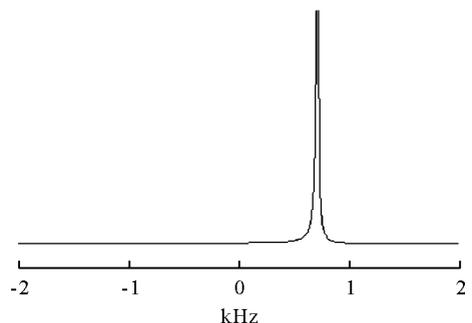


图 3 消除了镜像峰的水 NMR 谱

Fig. 3 1H NMR spectrum of water without mirror peak

3 结论

上述实验证明, 本文提出的方法确实是一种计算正交检波系统两通道增益和相位偏差的有效方法, 并为校正仪器正交检波系统的偏差提供依据.

参考文献:

- [1] Xie Hai-bin(谢海滨), Li Geng-ying(李羹颖). Data processing in digital quadrature detection(数字正交检波中的数据处理方法)[J]. Chinese J Magn Reson(波谱学杂志), 1999, 16(2): 119–123.
- [2] Qiu Zu-wen(裘祖文), Pei Feng-kui(裴奉奎). Nuclear magnetic resonance spectroscopy(核磁共振波谱)[M]. Beijing(北京): Science Press(科学出版社), 1989.
- [3] Varian Inc. VNMR user programming 6.1c[M]. California: Varian Inc, 2000.
- [4] Frank J M. Multidimensional NMR in liquids: Basic principles and experimental methods[M]. New York: Wiley-VCH, Publishers, 1995.
- [5] Li Yue-hua(李跃华), Li Xing-guo(李兴国). A error calibration method of quadrature detector(正交检波器误差校正的一种方法)[J]. Journal of Electronics(电子科学学刊), 1999, 21(5): 613–618.

On Correction of Gain and Phase Mismatch in Quadrature Detection

MENG Ping, DING Wei, LIU Chao-yang*

(State Key Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular Physics

(Wuhan Institute of Physics and Mathematics, The Chinese Academy of Sciences) Wuhan 430071, China)

Abstract: Quadrature detection is widely used in modern NMR spectrometers, as it provides such advantages as avoiding peak overlapping, reducing the power requirement for the excitation radiofrequency pulse, and increasing signal-to-noise ratio of detection. However, mirror peaks may arise if the gain of the two receiver channels used in quadrature detection are not matched, or the phase difference between two channels is not exactly 90 degree. To a certain degree, the problem can be overcome by applying phase cycling during acquisition. However, manual correction is necessary when the gain difference between the two channels become large or the phase difference is far from 90 degrees. This paper proposes a simple method to correct gain and phase mismatch in quadrature detection experimentally.

Key words: NMR, quadrature detection, phase-sensitive detector, data fitting

* Corresponding author: Liu Chao-yang, Tel:027-87198790, Fax:027-87199291, E-mail:chylu@wipm.ac.cn.