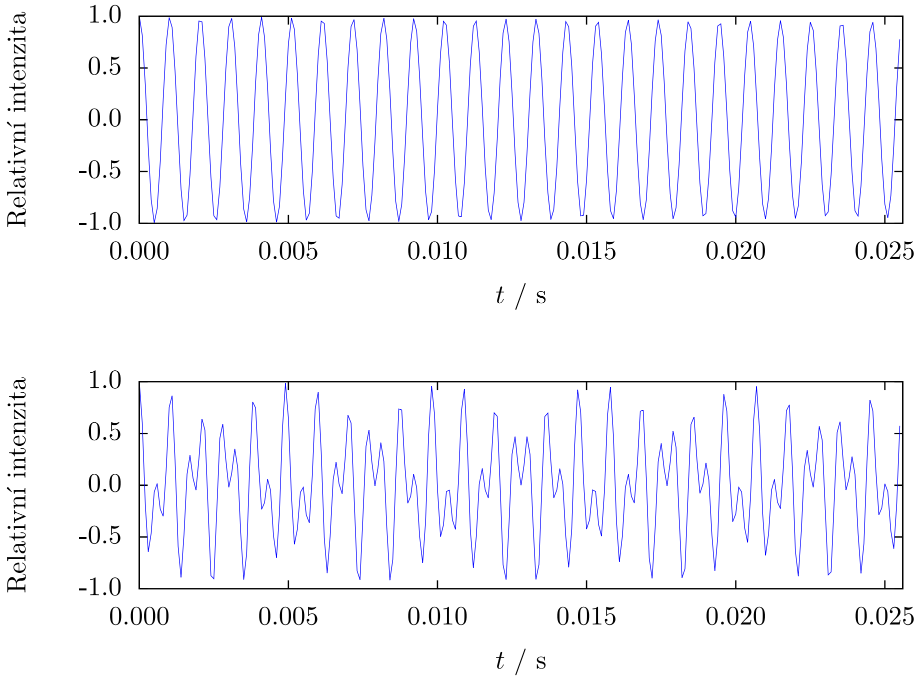


Obrázek 2: Naměřený signál octanu sodného (nahoře) a octanu methylnatého (dole).

kterého byste uměli odečíst frekvenci tak snadno, jako v Úkolu 1. Proč? To si ukážeme na malém příkladu.

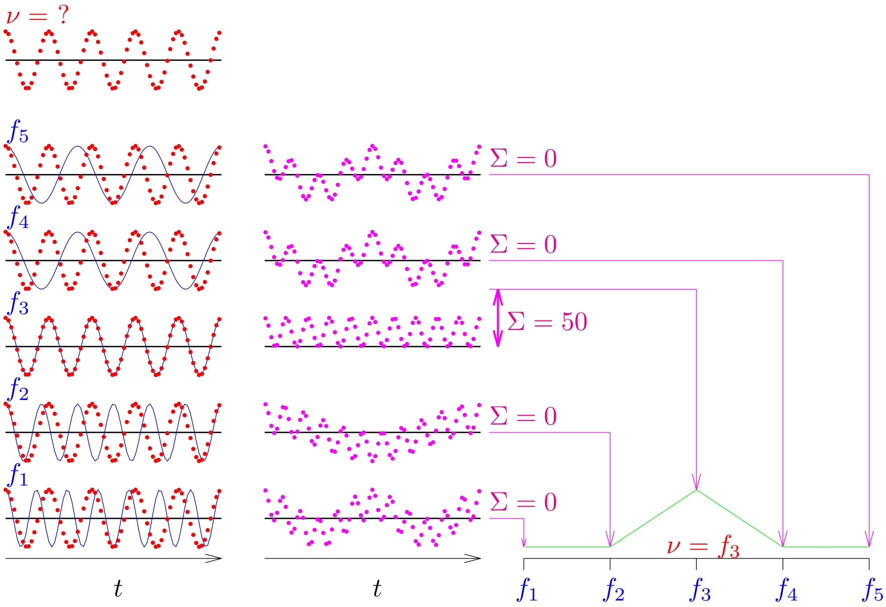
Na obrázku 2 nahoře vidíte záznam měření octanu sodného. Tato molekula obsahuje stejně jako voda jediný druh magnetického jádra, proton v methylové skupině[1]. Na záznamu vidíte krásnou kosinusovku, ze které byste určitě uměli určit rozdíl rezonanční frekvence od použité nosné frekvence ν. Jak by ale dopadlo měření pro octan methylnatý (methylacetát), který už obsahuje dva druhy vodíku ve dvou různých methylových skupinách? Na obrázku 2 dole vidíte, že jeden druh vodíku navíc už způsobí úplnou změť. Dvě kosinové křivky s různými frekvencemi se vzájemně skládají, *interferují*, a vzniká složitý obrazec, ze kterého byste asi těžko dokázali určit jejich frekvence. Z hodin chemie dobře víte, že málokterá organická látka má ve vzorečku jenom jeden vodík. Proto musíme považovat dolní záznam na obrázeku 2 za realistický příklad a horní záznam za vzácnou výjimku. Znamená to, že základní experiment spinové alchymie není pro běžné chemikálie použitelný? Vůbec ne, ale musíme se na výsledek měření podívat trochu rafinovaněji.

Jsme v situaci, kdy víme, že záznam experimentu se skládá z několika kosinusovek, ale neznáme jejich frekvence. Naším cílem je ze záznamu experimentu informaci o frekvencích získat. Využijeme přitom to, co víme o funkci kosinus a o násobení kladných a záporných čísel. Za prvé, tato funkce osciluje kolem nuly, chvíli je kladná, chvíli záporná. Za druhé, součin dvou kladných nebo dvou záporných čísel je kladný, zatímco součin kladného a záporného čísla je záporný. Co z toho vyplývá? Když vynásobíme dvě funkce kosinus, výsledná funkce bude kladná tehdy, když obě kosinusovky budou zrovna kladné nebo záporné, a záporná ve chvíli, kdy právě budou mít opačné znaménko (obrázek 3). Dá se tedy předpokládat, že výsledná funkce bude také chvilku kladná a chvilku záporná. Pokud pak vezmeme hodnoty výsledné funkce pro dostatečně dlouhý časový úsek, a sečteme je dohromady, bude výsledek součtu nejspíš kolísat kolem nuly (sčítáme čísla chvíli kladná a chvíli záporná). Jen v jednom případě bude součet výrazně kladý. V jakém? Když budou mít obě kosinusovky stejnou frekvenci. Pak je zaručeno[2], že pro daný čas budou obě čísla buď kladná nebo záporná, takže součin bude vždy kladný. Když budeme sčítat hodnoty součinu v takovém případě, výsledný součet stále poroste (sčítáme kladná čísla). Jak můžeme tuto jednoduchou aritmetiku využít? Jak už jsem naznačil, velmi rafinovaně (obrázek 3). Vezmeme záznam experimentu a vynásobíme jej nějakou kosinovou funkcí[3]. Pak sečteme všechny hodnoty součinu a nejspíš dostaneme nějaké malé číslo. Potom vynásobíme záznam měření kosinovou funkcí s trochu jinou frekvencí a vše opakujeme. Výsledkem výpočtu budou většinou malá čísla kolem nuly. Jen tehdy, když

[1] Díky rychlému otáčení kolem vazby mezi uhlíky se vlastnosti všech tří vodíků v methylu zprůměrují. V dalších úvahách také zanedbáme malé množství magnetických isotopů uhlíku a kyslíku, které se v přírodě vyskystuje.

[2] Pokud budou mít stejnou fázi, na to musíme dát ve spinové alchymii pozor.

[3] Budeme dbát na to, aby měla stejnou fázi.



Obrázek 3: Princip Fourierovy transformace. Červené body (je jich celkem sto) představují záznam experimentu, ze kterého chceme určit rozdíl frekvencí ν. Modré křivky jsou kosinusovky o různých frekvencích, kterými zkoušíme červený signál násobit. Výsledné součiny jsou nakresleny ve druhém sloupečku. Pro každý z pěti součinů sečteme všech sto hodnot, pro násobení kosinusovkami o frekvencích f_1, f_2, f_4, f_5 nám vyjde vždycky nula (kladné a záporné hodnoty součinu se vzájemně odečtou. Pouze třetí součin dá nenulový součet hodnot, pokud je amplituda rovná jedné, vyjde nám číslo padesát. Když si vyneseme hodnoty vypočítaných součtů v závislosti na zkušebních (modrých) frekvencích, získáme grafický záznam Fourierovy transformace (vpravo).

se náhodou trefíme a budeme násobit kosinusovkou o stejné (nebo velmi podoné) frekvenci, jako je jedna z rezonančních frekvencí záznamu, dostaneme náhle mnohem vyšší hodnotu součtu. Pokud budeme postupovat trpělivě a systematicky a budeme frekvenci kosinusovky, kterou násobíme, pomaloučku postupně zvyšovat, máme velkou šanci, že žádnou rezonanční frekvenci nemineme. Nakonec vezmeme všechny součty, které jsme pro různé frekvence vypočítali, a nakreslíme graf, ve kterém budeme vynášet na svislou osu součet a na vodorouvnou frekvenci. To, co získáme, bude *spektrum* frekvencí záznamu měření. Takto se zobrazují výsledky téměř všech experimentů spinové alchymie. Postupu, jakým se spektrum počítá, se říká *Fourierova transformace*. Zdá se vám to všechno příliš pracné a zdlouhavé? Jistě by bylo, kdybychom neměli počítače. Také po vás nebudu chtít, abyste spektra počítali ručně. Můžete si Fourierovu transformaci vyzkoušet na vašem počítači.

K výpočtu Fourierovy transformace se většinou používají speciální programy, které jsou velmi rychlé. Z cvičných důvodů po vás ale budu chtít, abyste si výpočet provedli sami. Jednou možností je použít tabulkový editor podle návodu který vám dám. Pokud ale umíte programovat, ještě užitečnější bude, když si sami napíšete skript nebo program v nějakém programovacím jazyku.

1.2 Udělej si sám aneb Fourierova transformace na koleně

V následujícím návodu vám vysvětlím, jak lze vypočítat Fourierovu transformaci v tabulkovém editoru programu OpenOffice, který si můžete zdarma stáhnout (http://www.openoffice.org). Podobným způsobem můžete ale použít i jiné tabulkové editory, např. gnumeric (zdarma na http://www.gnumeric.org), Excell v Microsoft Office apod.

1. Stáhněte si soubor se záznamem měření.

2. Otevřete tento soubor v aplikaci Calc programu OpenOffice, jako oddělovač polí zvolte tabulátor. Pokud používáte jiný tabulkový editor, budete možná muset použít import dat (např. v programu gnumeric pod záložkou Data).

3. Přidejte dva sloupce před načtená data. Data tak budou ve sloupcích C až IX[4].

[4] Celkem je sloupců 256. Je zvykem ukládat takový počet naměřených hodnot, který je mocninou dvojky. Pak lze použít algoritmu, který zjednoduší počítání s kosiny. V našem příkladě toho sice nevyužijeme, ale je dobré si na mocniny dvojky zvyknout.