核磁気共鳴イメージング(MRI)

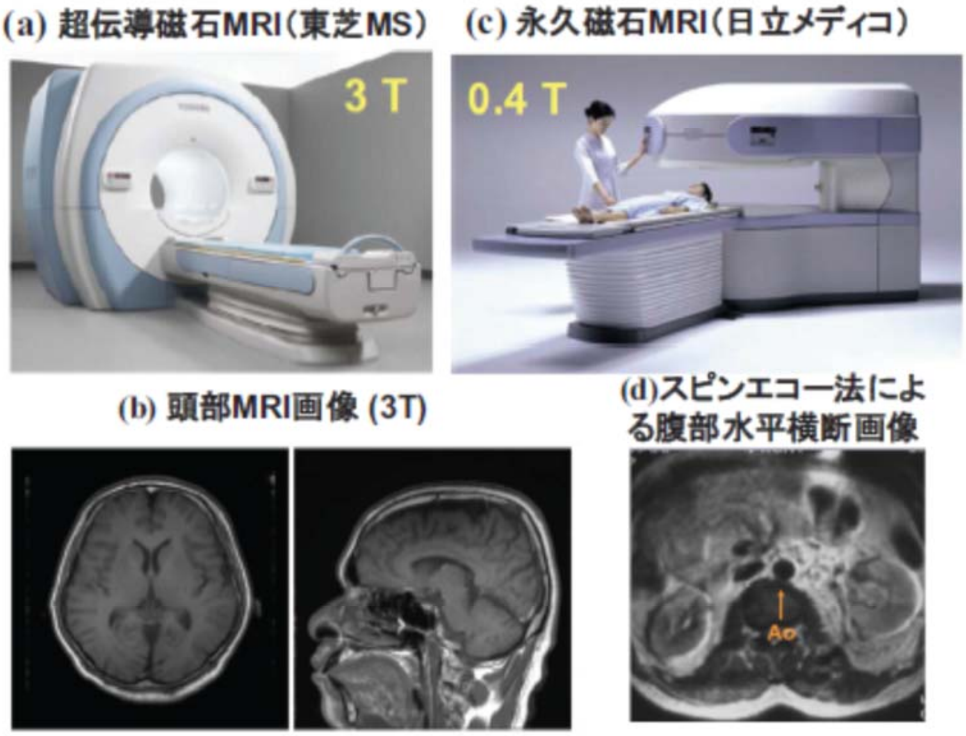
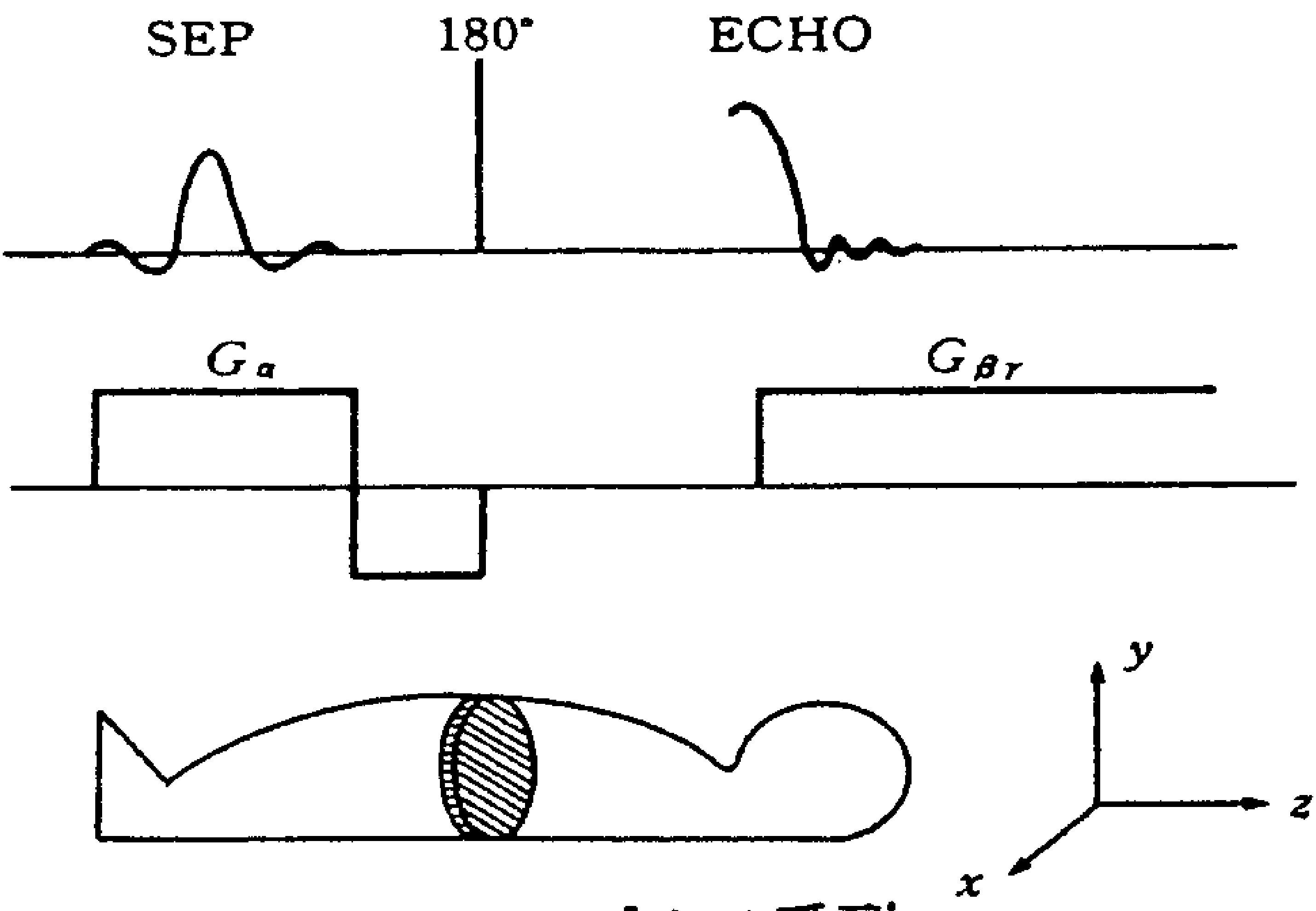


図 7.4: 医療用 MRI 装置と MRI 画像.



パルス系列.

線形磁場勾配をエンコードした時の波動関数の時間および位置変化

$$|\psi'(t, x)\rangle = \exp[iI_z[\gamma G_x x(t-2\tau)]\exp[(iI_z\Delta\omega_0(t-\tau)]$$

$$\exp(iI_y\pi)\exp[iI_z(\Delta\omega_0\tau)\exp(iI_x\pi/2)|M_0\rangle$$

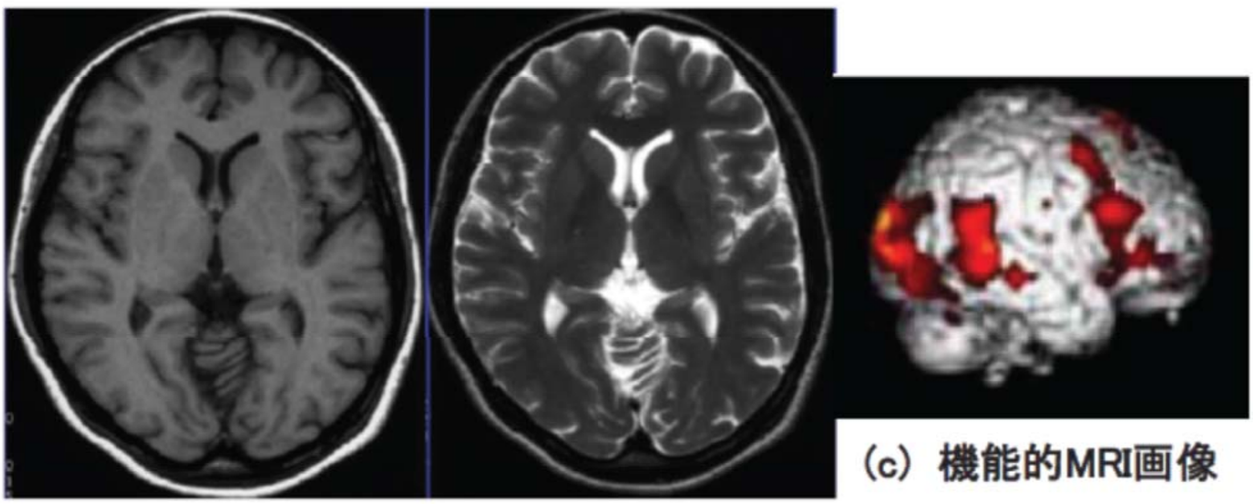
$$\langle\psi'(t, x)|I_y|\psi'(t, x)\rangle = M(x)\cos[\Delta\omega_0(t-2\tau)]\cos[\gamma G_x x(t-2\tau)]$$

MRIで観測されるスピンエコー

$t > 2\tau$

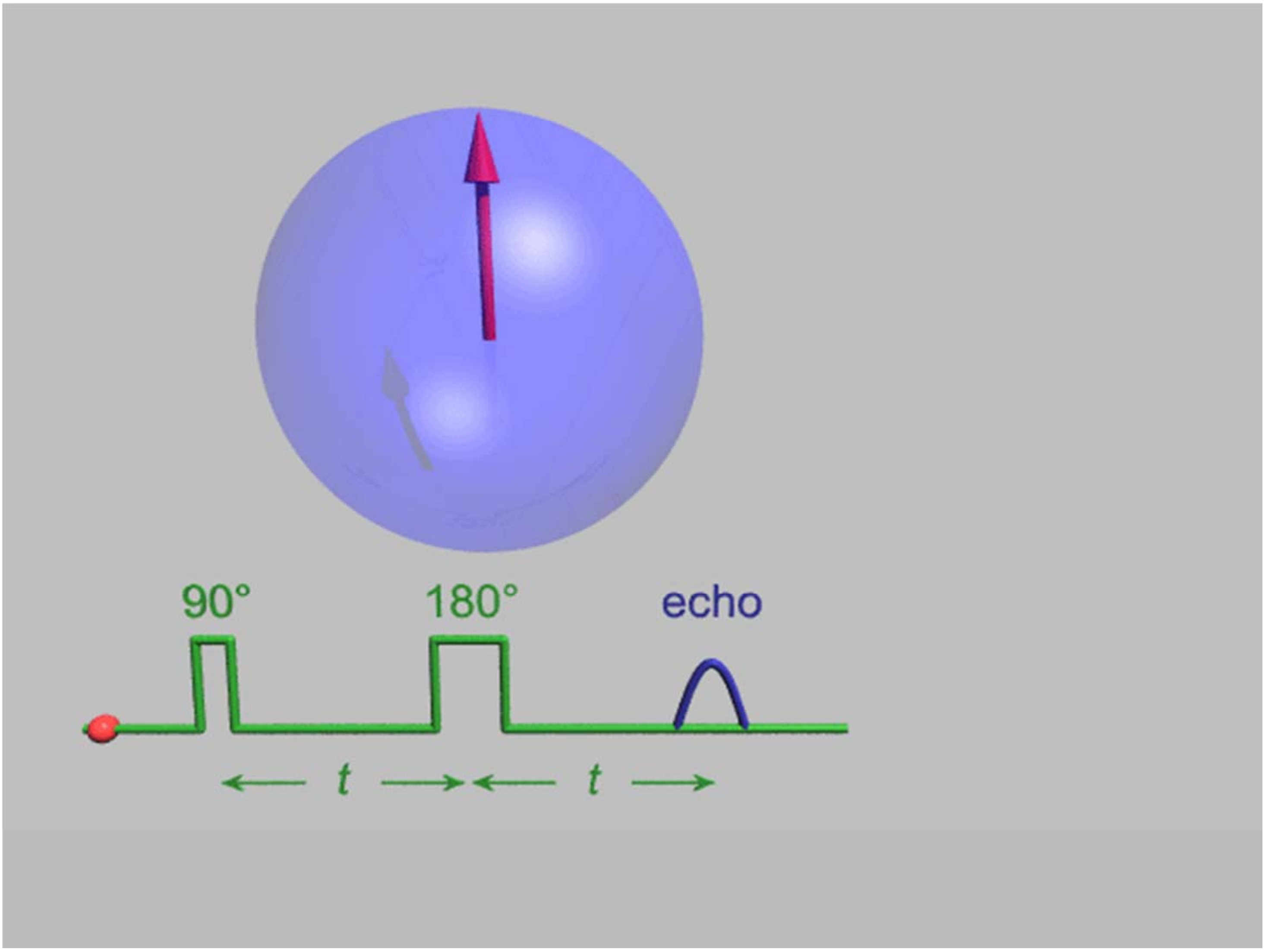
$$M(t) = \int M(x)\cos[\gamma G_x x(t-2\tau)]dx \cdot \exp(-[t-2\tau]/T_2)$$

以上のように，スピンエコー法を用いると，NMR パラメータの空間分布が得られ，それぞれの NMR パラメータを強調した画像となる．短い τ と T_R の場合には，T_1 強調画像となり，長い τ と T_R の場合には，T_2 強調画像となる．一例として，T_1 と T_2 強調頭部 MIR 画像をそれぞれ図 7.14(a) と (b) に示す．



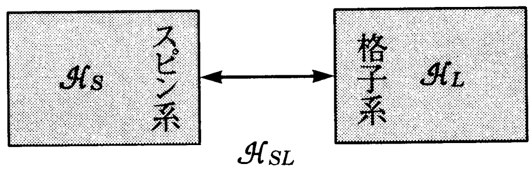
(c) 機能的MRI画像

(a) T_1強調画像　(b) T_2強調画像

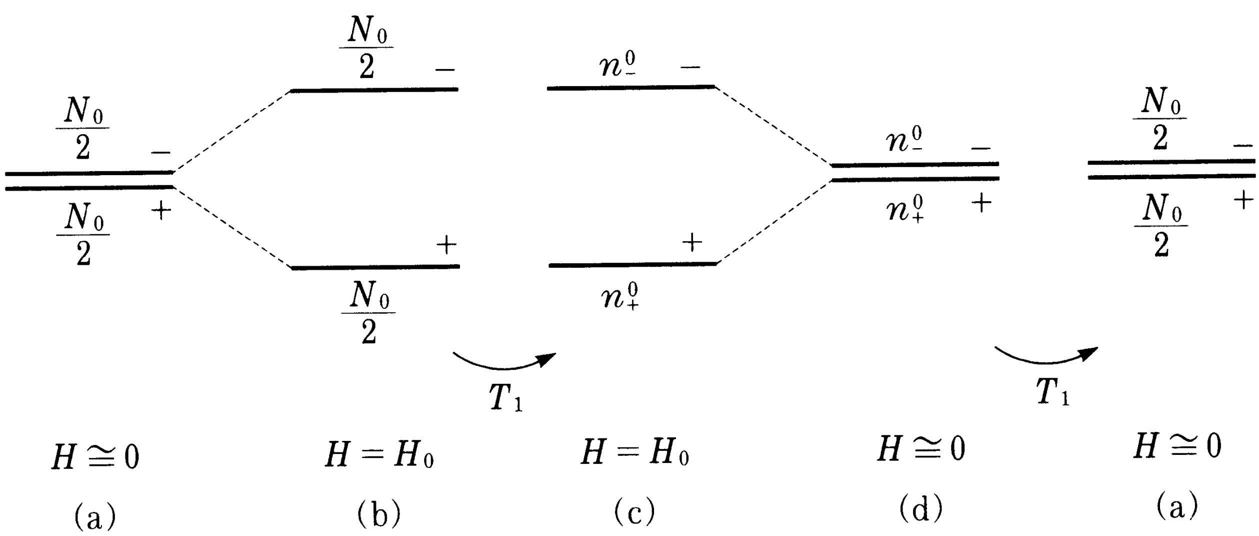


スピン格子緩和

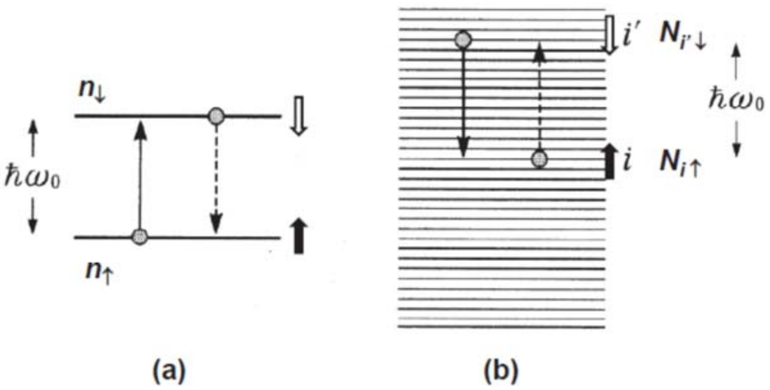
$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_{SL}$$



1 - 2 図　スピン系と格子系のエネルギー交換



1 - 3 図　スピン分布の時間的変化（+, − はスピンの向きを示す）



次に，磁化が時間の関数として，どのように成長するのかを $I = 1/2$ の場合について調べる．図 3.5 のように，格子系のエネルギー準位が連続的に分布しており，格子系を構成する粒子の分布は常に熱平衡状態にあるとする．i 番目の準位と $\hbar\omega_0$ だけ高い準位 i' の分布数をそれぞれ $N_{i\uparrow}$ と $N_{i'\downarrow}$ とする．$\mathcal{H}_{IS}$ によって核スピン系と電子スピン系とがエネルギーを交換する確率を $W_{i,i'}$ とすると，上向きスピンと下向きスピンのそれぞれの占有数 $n_\uparrow$ と $n_\downarrow$ の時間変化は，$W_{i,i'} = W_{i',i} = W_i$ とおいて，

$$\begin{aligned}\frac{dn_\uparrow}{dt} &= \sum_i \left(-n_\uparrow N_{i'\downarrow} W_i + n_\downarrow N_{i\uparrow} W_i\right) \\ \frac{dn_\downarrow}{dt} &= \sum_i \left(-n_\downarrow N_{i\uparrow} W_i + n_\uparrow N_{i'\downarrow} W_i\right) \qquad (3.35)\end{aligned}$$

で与えられる占有率方程式に従う．

$$n \equiv n_\uparrow - n_\downarrow \qquad (3.36)$$

と定義すると，

$$\frac{dn}{dt} = 2\sum_i \left(n_\downarrow N_{i\uparrow} - n_\uparrow N_{i'\downarrow}\right) W_i \qquad (3.37)$$

で定常状態では，

$$\frac{n_\downarrow^0}{n_\uparrow^0} = \frac{N_{i'\downarrow}}{N_{i\uparrow}} = \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}\right) \qquad (3.38)$$

である．ここで，

$$n_\uparrow + n_\downarrow = n_\uparrow^0 + n_\downarrow^0 = N_0$$

であるから，$\hbar\omega_0/k_B T \ll 1$ として，

$$\begin{aligned}\frac{dn}{dt} &= 2\left\{n_\downarrow - n_\uparrow\left(1 - \frac{\hbar\omega_0}{k_B T}\right)\right\}\sum_i W_i N_{i\uparrow} \\ &\simeq -2W(n - n_0) \qquad (3.39)\end{aligned}$$

が得られる．ここで，

$$W \equiv \sum_i W_i N_{i\uparrow}$$

$$n_0 \equiv n_\uparrow^0 - n_\downarrow^0 \simeq N_0 \frac{\left(e^{-E_\uparrow/k_BT} - e^{-E_\downarrow/k_BT}\right)}{2} \simeq \frac{N_0}{2}\left(\frac{E_\downarrow - E_\uparrow}{k_BT}\right) \simeq \frac{N_0}{2}\frac{\hbar\omega_0}{k_BT}$$

$$n_\uparrow \frac{\hbar\omega_0}{k_BT} \simeq \frac{N_0}{2}\frac{\hbar\omega_0}{k_BT}$$

を導入した．$M_z = \gamma_n \hbar(n/2)$ および $M_0 = \gamma_n \hbar(n_0/2)$ を使って，式 (3.39) の微分方程式は，

$$\frac{dM_z(t)}{dt} = \frac{M_0 - M_z}{T_1}$$

と書け，初期条件を t=0 で $M_z(0)$=0，また $T_1 \equiv (2W)^{-1}M(t)$ とすると，$M_z(t)$ は，

$$M_z(t) = M_0\left\{1 - \exp\left(-\frac{t}{T_1}\right)\right\}$$

に従って熱平衡値 M_0 に近づく．この T_1 を核スピン-格子緩和時間，あるいは縦緩和時間という．

$$dn/dt = 2U[n_- - n_+ + n_+(h\omega_0/k_BT)]$$

$$= - 2U[n - n_+(h\omega_0/k_BT)]$$

$$= - 2U[n - (N_0/2)(h\omega_0/k_BT)]$$

$$= - 2U[n - n_0]$$

$$n_+^0 = N_0\exp(-E_+/k_BT)/[\exp(-E_+/k_BT) + \exp(-E_-/k_BT)]$$

$$=(N_0/2)[1 - E_+/k_BT]$$

$$n_-^0 = N_0\exp(-E_-/k_BT)/[\exp(-E_+/k_BT) + \exp(-E_-/k_BT)]$$

$$=(N_0/2)[1 - E_-/k_BT]$$

$$n_0 = n_+^0 - n_-^0 = (N_0/2)[(E_- - E_+)/k_BT] = (N_0/2)(h\omega_0/k_BT)$$

T_1 の測定法

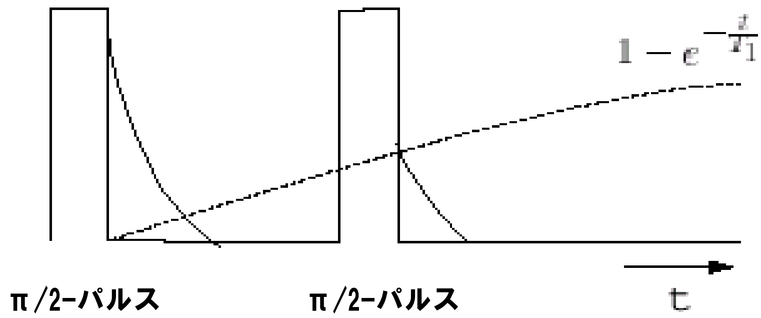


図 8: 90°-90° パルスによる T_1 の測定

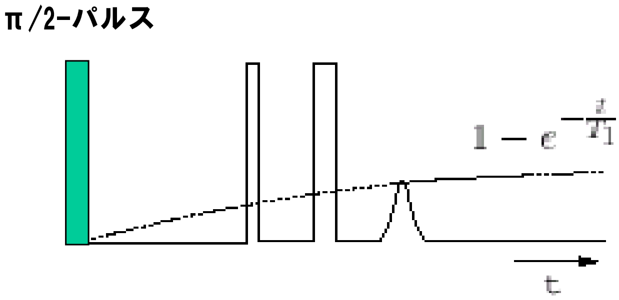
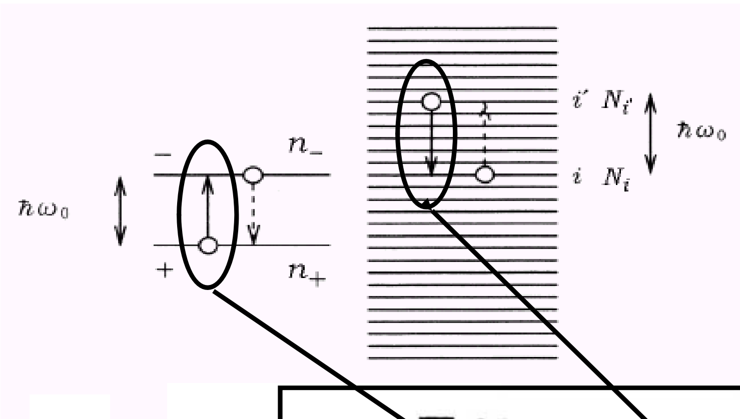
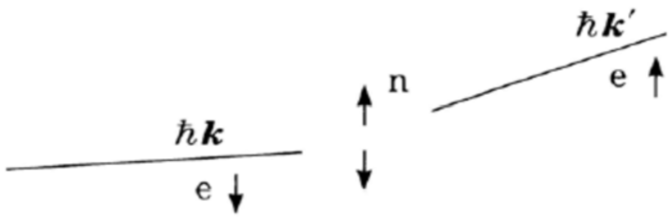


図 9: 櫛状パルスによる T_1 の測定

Nuclear-spin relaxation ($1/T_1$) process





$$\left.\begin{array}{l} |\psi_i\rangle = u_k(\boldsymbol{r})\, e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\, |+,\ -\rangle = |\boldsymbol{k},\ +,\ -\rangle \\ |\psi_f\rangle = u_{k'}(\boldsymbol{r})\, e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}\, |-,\ +\rangle = |\boldsymbol{k}',\ -,\ +\rangle \end{array}\right\}$$

$$\frac{n_-}{n_+} = 1 \;\xrightarrow{\;T_1\;}\; \boxed{\frac{n_-^0}{n_+^0} = \frac{\sum_{i'} N_{i'}}{\sum_i N_i} = e^{-\hbar\omega_0/k_B T}}$$

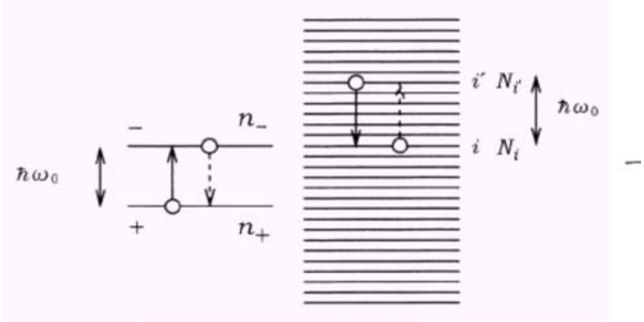
Thermal equilibrium state

$$\mathcal{H}_{\mathrm{hf}} = A\boldsymbol{I}\cdot\boldsymbol{S}$$

A : Fermi-contact hyperfine interaction (s-electrons)

$$\mathcal{H}_{\mathrm{F}} = \frac{8\pi}{3}\gamma_{\mathrm{n}}\gamma_{\mathrm{e}}\hbar^2\delta(\boldsymbol{r})\left\{I_z S_z + \frac{1}{2}(I_+S_- + I_-S_+)\right\}$$

Hyperfine interactions:



$$\mathcal{H}' = -\gamma_n \hbar \boldsymbol{I} \cdot \delta \boldsymbol{H}$$

$\delta \boldsymbol{H}$: electrons spin fluctuations

$$\frac{n_-}{n_+} = 1 \xrightarrow{T_1} \boxed{\frac{n_-^0}{n_+^0} = \frac{\sum_{i'} N_{i'}}{\sum_i N_i} = e^{-\hbar\omega_0/k_B T}}$$

Thermal equilibrium state

$1/T_1 \sim W_{a,b}$

$$W_{a,b} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle a|\mathcal{H}'|b\rangle|^2 \, \delta(E_a - E_b)$$

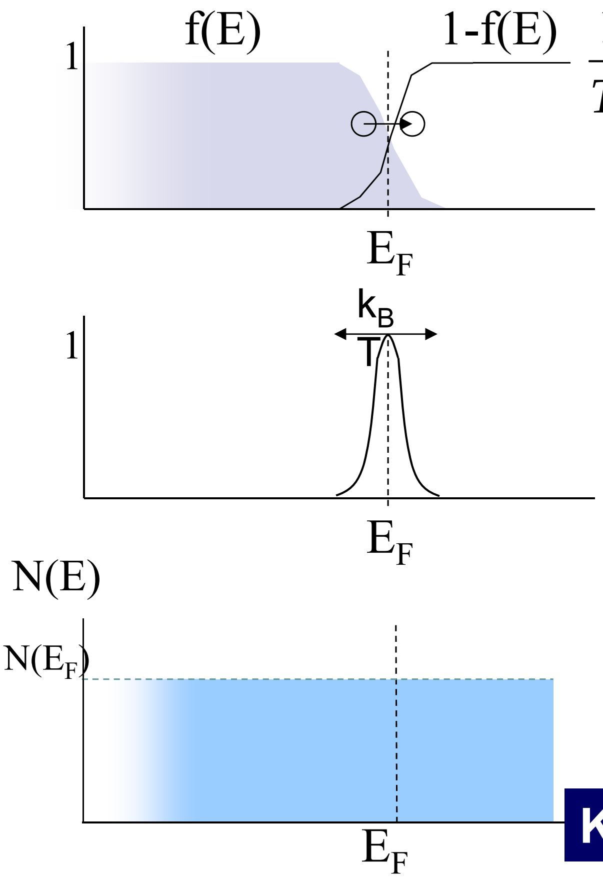
$$W_{m,\nu \to m+1,\nu'} = \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{\gamma_n \hbar}{2}\right)^2 |\langle m|I_+|m+1\rangle\langle\nu|\delta H_-|\nu'\rangle|^2 \, \delta(E_{\nu'} - E_\nu - \hbar\omega_0)$$

Here,

$$\delta H_\pm = \delta H_x \pm i\,\delta H_y \qquad \delta(E_{\nu'} - E_\nu - \hbar\omega_0) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\{(E_{\nu'} - E_\nu)/\hbar - \omega_0\}t}\, dt$$

NMR – 1 / T_1 –

T_1 in normal state of metals



$$\frac{1}{T_1} = \frac{\pi}{\hbar} A^2 \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \underline{N(E)N(E')}\, \underline{f(E)(1-f(E'))} dE dE'$$

$$= \frac{\pi}{h} A^2 \underline{N^2(E_F)}\underline{k_B T}$$

Pauli paramagnetism $\Rightarrow \chi_S = 2\mu_B^2 N(E_F)$

Knight Shift $\Rightarrow \boxed{K_S = A\chi_S \propto N(E)}$

$$\frac{1}{T_1} \propto K_s^{\,2} k_B T \Rightarrow \boxed{\frac{1}{T_1 T} \propto K^2}$$

Korringa Relation: $T_1 T K_s^2 = \frac{\hbar}{4\pi k_B}\left(\frac{\gamma_e}{\gamma_n}\right)^2$

MRIレポート１

下記のように外部磁場（*H*）での熱平衡核磁化（M_0)を観測後、磁場をオフにする。その後、時間 (*t*) の関数として磁場を印加して核磁化［$M(t)$］を観測する時、$M(t)$ を熱平衡核磁化（M_0)、時間（*t*）と核スピン−格子緩和時間（T_1）を用いて表せ。

$t \rightarrow \infty : dn/dt = 0 \quad n_+ = n_-$