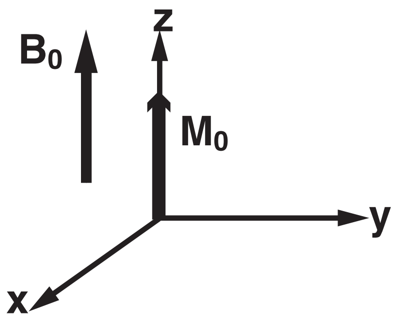
NMR実験の計算例



この図は、z方向に与えた磁場B_0中にあるスピン1/2の単一核（水素核）の磁化ベクトルを示している。この磁化ベクトルに$40^0{}_y$パルスを与えたのち、この磁化ベクトルのx、y、z方向の成分は各々どのような値になるかを答えなさい。ここで、$40^0{}_y$パルスのハミルトニアンH(t)はH(t)＝αI_y(α=40^0)と表される。

計算の仕方

あるハミルトニアンHの下で、スピンの密度行列の時間発展は(1)式で記述される。

$$\rho_{(t)} = e^{-iH(t)}\rho_0 e^{iH(t)} \tag{1}$$

ここで、H(t) = αI_y（α=40^0）。また I_x、I_y、I_z としてパウリのスピン行列を使う。

$e^{-i\alpha I_y}$は以下のように展開できる。

$$e^{-i\alpha I_y} = \boldsymbol{E} + (-1)(i\,\alpha I_y) + (-1)^2\frac{1}{2!}(i\,\alpha I_y)^2 + (-1)^3\frac{1}{3!}(i\,\alpha I_y)^3 + \cdots \tag{2}$$

ここで、

$$I_y^{2n}\ (n=0,1,2,..) = \frac{1}{2^{2n}}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2^{2n}}\boldsymbol{E}$$

$$I_y^{2n+1}(n=0,1,2,..) = \frac{1}{2^{2n+1}}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2^{2n+1}} \times 2 \times I_y$$

(2)式を整理すると、

$$e^{-i\alpha I_y} = \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{\alpha^{2n}}{(2n)!}I_y^{2n} - i\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{\alpha^{2n+1}}{(2n+1)!}I_y^{2n+1}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{1}{(2n)!}\left(\frac{\alpha}{2}\right)^{2n}\boldsymbol{E} - i\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{1}{(2n+1)!}\left(\frac{\alpha}{2}\right)^{2n+1} \times 2 \times I_y$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \end{pmatrix}$$

同様にして、

$$e^{\,i\alpha I_y} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) & \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ -\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \end{pmatrix}$$

注. $e^{-i\alpha I_y}\cdot e^{\,i\alpha I_y} = 1$

z方向に与えた磁場B_0中にあるスピン1/2の単一核（水素核）の磁化ベクトルはスピン行列σ_z

で表される、すなわち $\rho_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$。これらを使って(1)を計算すると次の結果を得る。

$$\rho(t) = e^{-iH(t)}\rho_0 e^{iH(t)}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos(\frac{\alpha}{2}) & -\sin(\frac{\alpha}{2}) \\ \sin(\frac{\alpha}{2}) & \cos(\frac{\alpha}{2}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\frac{\alpha}{2}) & \sin(\frac{\alpha}{2}) \\ -\sin(\frac{\alpha}{2}) & \cos(\frac{\alpha}{2}) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos(\frac{\alpha}{2}) & \sin(\frac{\alpha}{2}) \\ \sin(\frac{\alpha}{2}) & -\cos(\frac{\alpha}{2}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\frac{\alpha}{2}) & \sin(\frac{\alpha}{2}) \\ -\sin(\frac{\alpha}{2}) & \cos(\frac{\alpha}{2}) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ \sin\alpha & -\cos\alpha \end{pmatrix}$$

$$<\overline{I_x}> = Tr\,\rho I_x$$

$$= Tr \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ \sin\alpha & -\cos\alpha \end{pmatrix} \left(\frac{1}{2}\right) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= Tr \left(\frac{1}{2}\right) \begin{pmatrix} \sin\alpha & \cos\alpha \\ -\cos\alpha & \sin\alpha \end{pmatrix}$$

$$= \sin\alpha$$

$$<\overline{I_y}> = Tr\,\rho I_y$$

$$= Tr \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ \sin\alpha & -\cos\alpha \end{pmatrix} \left(\frac{1}{2}\right) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$= Tr \left(\frac{1}{2}\right) \begin{pmatrix} i\sin\alpha & -i\cos\alpha \\ -i\cos\alpha & -i\sin\alpha \end{pmatrix}$$

$$= 0$$

$$<\overline{I_z}> = Tr\,\rho I_z$$

$$= Tr \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ \sin\alpha & -\cos\alpha \end{pmatrix} \left(\frac{1}{2}\right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$= Tr \left(\frac{1}{2}\right) \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}$$

$$= \cos\alpha$$