

MR formalism のための基礎知識

中田 力

新潟大学脳研究所脳機能解析学 筑波大学先端学際領域研究センター
カリフォルニア工科大学ベックマン研究所

はじめに

量子力学的な formalism の理解が MRI の実践で必要となることはまずない。それでもなお MR formalism¹ の理解を促すことには幾つかの理由がある。一つには、MRI をまかないとするすべての人に、MRI という極端に実践的な方法論の裏に整然とした理論体系が存在することを認識してもらいたいことにある。MRI のような実践的方法論の概説は特定条件下での解説に陥りやすく、事実、多くの MRI 関係者が特定条件下の理論を鵜呑みにしている。一般論の理解は、「必要悪」でもある「実践論での特定化」の欠点を補う意味を持つ。新しい実践論の開発にも一般論の理解は欠かせない。いまだに衰えを見せない MRI の進歩は、以前には解析学でのみ必要とされた特殊な技法をも駆使しながらとどまるところを知らない。実際のところ、magnetization transfer や multiple quantum coherence を利用した MRI の理解には、ある程度の formalism は不可欠である。

多くの臨床家が MR formalism にアプローチを始めて最初に突き当たる壁は、表現の特殊性である。日本の教育制度の中で、医療に携わ

る人間が同時に物理工学の専門知識を習得する場は極端に少ない。この論文はこの「知識の狭間」を埋めることを目的に書かれている。Formalism に基づいた MR の教科書を読むのに必要とされる最少限度の知識をまとめ、高校数学を終了したすべての人が無理なく MR formalism に近づくことのできる道を作ることを目標としている。

まず、quantum mechanics (量子力学) で使われる数学的技法の基本概念的な解説を試みる。純粋数学での定義と応用物理での定義に若干の違いがあるように、「既に確立された理論の理解を促すために必要な最少限度の知識としての数学は、多少その正確さを欠いてもよい。」という筆者の決めた「勝手な前提」のもとに、できる限り判りやすくその入門編を記載する²。

I. 基本数学

量子力学で使われる数学的方法論は主に「群」理論である。基本的には、拡張された次元での「ベクトル・テンソル解析」であると言っても外れではない。ただし、その手法はすべて「一般化」されている。厳密には正確さを欠く

¹ 慣例に従い、生体を対象とした核磁気共鳴 nuclear magnetic resonance (NMR) の方法論を磁気共鳴 magnetic resonance (MR) と総称する。

² もう少し正確な理論を知りたい人達のために幾つかの教科書を suggested reading に挙げておく。

ものの、一般化された理論の内容を直感的に理解するためには、古典力学などで馴染みのある三次元空間での「ベクトル・テンソル解析」の表現を借りて示した方が判りやすい。また、その演算法は行列 matrix のそれを示すことによって、より理解しやすいものとなる。そこでこの項では、できる限り三次元空間での例を示し、その一般化を試みることによって理論の理解を促すといった解説法を取る。

I-1 Dirac 表記

Dirac 表記 Dirac notation は一般には馴染みの薄いものではあるが、非常に便利な表記法である。その基本となるものが ket (ket vector) と bra (bra vector) と称される「群」である。これは記号 $\langle \rangle$ を示す英単語 bracket から作られた言葉で $\langle |$ で表現される「群」を bracket の左半分であるから bra と呼び、 $| \rangle$ で表現される「群」をその右半分である ket と呼んだものである。

三次元空間の実数ベクトルで考えれば bra と ket はそれぞれ、行ベクトルと列ベクトルに対応する。つまり、ベクトル X の成分が (x_1, x_2, x_3) であったとして、

$$\langle X| = (x_1 \ x_2 \ x_3)$$

$$|X\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

である。

ここですぐに理解できることは bra と ket をこの順番に掛合わせたもの、例えば $\langle X|Y\rangle$ (便宜上真ん中に入る縦線は二本ではなく一本で略する。) がベクトルの内積にあたり、スカラー (一次元の数) になることである。

実際に演算してみれば、

$$\langle X|Y\rangle = (x_1 \ x_2 \ x_3) \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}$$

$$= x_1 y_1 + x_2 y_2 + x_3 y_3$$

となる。また、 $X=Y$ であった場合、それはベクトルの絶対値の二乗となることも明白である。

$$\langle X|X\rangle = (x_1 \ x_2 \ x_3) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$= x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$$

$$= |X|^2$$

ベクトルの一般化は次元の拡張から始まる。ベクトルを実数の群とみなせばその次元は行列成分 matrix element の数に対応し、それは無限個 (無限次元) まで拡張できる。

$$\langle X| = (x_1 \ x_2 \ x_3 \ x_4 \ \dots \ x_n \ \dots)$$

$$|X\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ \vdots \\ x_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

次に必要なことが行列成分の一般化である。それは実数から複素数への拡張から始まる。この一般化に伴って必要になる修正は、 $\langle X|Y\rangle$ が実数のスカラーとなるために bra の行列成分をその対応する ket の行列成分の共役 conjugate とする操作である。それは一般に *印をつけることで表現される。つまり、

$$x_n = \alpha_n + \beta_n i \quad (\alpha_n \text{ と } \beta_n \text{ は実数で } i^2 = -1)$$

であるとき、その共役は

$$x_n^* = \alpha_n - \beta_n i$$

で表され、したがって、

$$|x_n|^2 = x_n x_n^* = (\alpha_n + \beta_n i) (\alpha_n - \beta_n i)$$

$$= \alpha_n^2 + \beta_n^2 \quad (\text{実数})$$

となる。

つまり複素数ベクトルでの bra と ket はそれぞれ、

$$\langle X| = (x_1^* \ x_2^* \ x_3^* \ x_4^* \ \dots \ x_n^* \ \dots)$$

$$|X\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ \vdots \\ x_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

で表される。

最後に、行列成分を複素数から複素数関数 ψ に拡張すれば、

$$\langle \psi| = (\psi_1^* \ \psi_2^* \ \psi_3^* \ \psi_4^* \ \dots \ \psi_n^* \ \dots)$$

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \\ \vdots \\ \psi_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

となる。これが一般化されたベクトルの概念である。

また、

$$\langle \psi|\psi\rangle = |\psi|^2$$

となることも明白であろう。量子力学においては $\text{ket}|\psi\rangle$ を「群空間」における「状態」を表すものとして状態ベクトル state vector と呼ぶことが多い。

I-2 エルミート演算子 Hermitian Operator

演算子 operator という概念は一般的なものであり、基本的にはある関数に働きかけてある決まった演算を行う約束を表す記号を意味す

る。例えば x の関数 $y=f(x)$ を x で微分する d/dx は演算子である。仮にこの微分の演算子を演算子 D で表したとしても行われる演算には変化なく、

$$D(x^2+x) = 2x+1$$

であり、その概念が理解される。

量子力学で利用される演算子の概念もまず、三次元空間での 3×3 の行列³ で考えてみると判りやすい。演算子 A を

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

と定義し、この演算子が上記の $\text{ket}|X\rangle$ に作用した場合を、行列の演算として追ってみれば、

$$\begin{aligned} A|X\rangle &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \end{pmatrix} \\ &= |X'\rangle \end{aligned}$$

となる。

同様にして bra の方も、

$$\begin{aligned} \langle X|A &= (x_1 \ x_2 \ x_3) \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \\ &= (a_{11}x_1 + a_{21}x_2 + a_{31}x_3 \ a_{12}x_1 \\ &\quad + a_{22}x_2 + a_{32}x_3 \ a_{13}x_1 + a_{23}x_2 + a_{33}x_3) \\ &= (x_1'' \ x_2'' \ x_3'') \\ &= \langle X''| \end{aligned}$$

となる。つまり演算子の作用によって $\text{ket}|X\rangle$

³ 古典力学でよく使われるテンソル。正確には二次のテンソル。

は新しい $\text{ket}|X\rangle$ に, $\text{bra}\langle X|$ は新しい $\text{bra}\langle X'|$ に変わるのである. この関係はベクトルを無限次元の複素数関数に拡張した場合も, それに対応して演算子を拡張することによって保たれ, 一般的に

$$A|\phi\rangle = |\psi\rangle$$

$$\langle\phi|A = \langle\phi|$$

と, 表現される. ちなみにこれから,

$$\langle\psi|A|\phi\rangle$$

がスカラーとなることも判る.

少し横道にそれるがここで Dirac 表記の簡便さを示す目的も考慮して, ket と bra をこの順番に掛合わせた場合を考えてみる. 今回も三次元でのベクトルとして扱ってみると,

$$|X\rangle\langle Y| = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} (y_1 \ y_2 \ y_3)$$

$$= \begin{pmatrix} x_1 y_1 & x_1 y_2 & x_1 y_3 \\ x_2 y_1 & x_2 y_2 & x_2 y_3 \\ x_3 y_1 & x_3 y_2 & x_3 y_3 \end{pmatrix}$$

となる. つまり, $|\psi\rangle\langle\phi|$ で表されるものは演算子であることが判る.

この表記法を使えば, $|\psi\rangle\langle\phi|\xi\rangle\langle\zeta|\rho\rangle$ は ket , $\langle\phi|\psi\rangle\langle\phi|\xi\rangle\langle\zeta|$ は bra , また, $|\psi\rangle\langle\psi|\zeta\rangle\langle\phi|\xi\rangle\langle\phi|$ は演算子であることもすぐに判明する. ($\langle\phi|\psi\rangle$ がスカラーであることを思い出せば明白である.)

Dirac 表記で便利なルールを, もう一つ証明なしに示す. それは bra , ket , 演算子の組み合わせで示されたものの共役を求めるルールで, 次のような機械的な操作だけでよい.

- 1) 前後の順番を入れ替える
- 2) 複素数 (λ) はその共役 (λ^*) に変える
- 3) bra は ket に, ket は bra に変える
- 4) 演算子 (A) はその随伴 adjoint (A^\dagger) に変える

例えば, $|\psi\rangle\langle\phi|\lambda A|\xi\rangle\langle\zeta|\rho\rangle$ の ket の共役は

$$[|\psi\rangle\langle\phi|\lambda A|\xi\rangle\langle\zeta|\rho\rangle]^*$$

$$= \langle\rho|\zeta\rangle\langle\xi|A^\dagger\lambda^*|\phi\rangle\langle\psi|$$

となり, bra となる.

ここで登場した演算子の随伴とは演算子の共役にあたるものである (正確にはエルミート共役 Hermitian conjugate と呼ばれる). これも一般化された概念ではあるがその理解の手助けとして, 3×3 の行列の場合を示す.

行列における随伴とはその行列の転置 transpose (行と列を入れ替えた行列) のすべての成分をその共役に変えたものと定義される.

行列 A を

$$A = \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 0 & i \\ 0 & -i & 1 \end{pmatrix}$$

とすれば, その転置行列 A^T は

$$A^T = \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 1 \end{pmatrix}$$

であり, よって, 随伴行列 A^\dagger は

$$A^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 0 & i \\ 0 & -i & 1 \end{pmatrix}$$

となる.

この例で示した行列は, もとの行列と随伴行列とが一致している.

$$A^\dagger = A$$

このような行列, もしくは演算子は自己随伴 self-adjoint, もしくはエルミート Hermitian であると呼ばれ, 量子力学で重要な役割を果たす.

I-3 正規直交基 Orthonormal Bases

三次元空間でのベクトル $\mathbf{X}(x_1, x_2, x_3)$, は軸の単位ベクトル $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3$, の和として表されることはよく知られている.

$$\mathbf{X} = x_1 \mathbf{u}_1 + x_2 \mathbf{u}_2 + x_3 \mathbf{u}_3$$

図形的に考えれば、それぞれの項はもとのベクトルをそれぞれの軸に投影した投影ベクトルを表している。また、この関係式の行列表示は、

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = x_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + x_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

である。

単位ベクトルとベクトル \mathbf{X} との内積が、投影ベクトルの係数 x_i を表すこと、つまり、

$$x_i = \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{X}$$

もしくは、

$$(1 \ 0 \ 0) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = x_1$$

$$(0 \ 1 \ 0) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = x_2$$

$$(0 \ 0 \ 1) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = x_3$$

であることを考慮すれば、一般的にベクトル \mathbf{X} はその投影ベクトルの係数を c_i として、

$$\begin{aligned} \mathbf{X} &= \sum_i c_i \mathbf{u}_i \\ &= \sum_i (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{X}) \mathbf{u}_i \end{aligned}$$

で示されることが判る。

この関係式の一般化が正規直交基 orthonormal base への展開であり、

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &= \sum_i c_i |\mathbf{u}_i\rangle \\ &= \sum_i (\langle \mathbf{u}_i | \varphi \rangle) |\mathbf{u}_i\rangle \\ &= \sum_i |\mathbf{u}_i\rangle \langle \mathbf{u}_i | \varphi \rangle \end{aligned}$$

となる。

一般化された次元での正規直交基 $\{\mathbf{u}_i\}_i$ とは、三次元での単位ベクトルにあたるもので、単位ベクトル同様に、

$$\langle \mathbf{u}_i | \mathbf{u}_j \rangle = \delta_{i,j} \begin{cases} 1 & \text{for } i=j \\ 0 & \text{for } i \neq j \end{cases}$$

の条件（正規直交基関係 orthonormal relation）を備えている必要がある。

また、

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &= \sum_i |\mathbf{u}_i\rangle \langle \mathbf{u}_i | \varphi \rangle \\ &= \left(\sum_i |\mathbf{u}_i\rangle \langle \mathbf{u}_i | \right) |\varphi\rangle \end{aligned}$$

と置いてみると明らかになるように、

$$\sum_i |\mathbf{u}_i\rangle \langle \mathbf{u}_i |$$

で表される演算子はもとのベクトルを変化させずに再現する演算子であることも判る。この関係は

$$\sum_i |\mathbf{u}_i\rangle \langle \mathbf{u}_i | = \mathbb{1}$$

と表現され、閉包関係 closure relation と呼ばれる。ここで、 $\mathbb{1}$ は演算子として一般化された 1 である。

この関係を 3×3 の行列で見ると、

$$\begin{aligned} \sum_i |\mathbf{u}_i\rangle \langle \mathbf{u}_i | &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 0 \ 0) \\ &+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0 \ 1 \ 0) \\ &+ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0 \ 0 \ 1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 &\quad + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 &= \mathbf{I}
 \end{aligned}$$

となる。この行列、 \mathbf{I} 、は恒等行列 identity matrix と呼ばれ、行列での 1 にあたる。

I-4 固有ベクトル Eigenvector と固有値 Eigenvalue

ある演算子 \mathbf{A} とあるベクトル $|X\rangle$ との間に、

$$\mathbf{A}|X\rangle = \lambda|X\rangle \quad (\lambda \text{ はスカラー})$$

の関係式が成り立つとき、 $|X\rangle$ を \mathbf{A} の固有ベクトル eigenvector, λ をその固有ベクトルの固有値 eigenvalue と呼ぶ。

これらが実際の物理現象の中でどのような意味を持つかの説明を試みる前に、暗黙的に覚えておいてもらいたいことが幾つかある。

まず、エルミート演算子の固有ベクトルと固有値を持つ特徴、

- 1) エルミート演算子の固有値はすべて実数である。
- 2) エルミート演算子の固有ベクトルはすべてお互いに直交している。

である。

次に、後述する量子力学の公準 postulate の第三項、

測定結果として得ることのできる量は、測定可能な演算子に属する固有値のみである。

である。

上記をまとめると、

- 1) エルミート演算子の固有ベクトルを用いて任意の状態ベクトルが展開できる正規直交基の完全集合 complete set を作れる可能性

がある。

- 2) エルミート演算子で示される物理現象の測定で得られる値は、測定可能なエルミート演算子の実数値である。

の二点が導かれる。

実際のところ、すべてのエルミート演算子から完全正規直交基を得ることができる訳ではなく、ある条件を満たすもの（その固有ベクトルのみで前述の閉包関係 closure relation を満たすことのできるもの）に限られる。量子力学ではその条件を満たすエルミート演算子を「測定できる演算子 observable」と呼ぶ。

I-5 物理現象におけるテンソル

さてここまで数学的立場から話を進めて来たが、実際の物理現象においての役割を直感的に理解することは難しいかもしれない。そこでもう一度三次元空間におけるテンソルで考えてみることにする。多少横道にそれるが、大切な概念なので二つの例を挙げて説明を加える。

例 1: コンダクタンステンソルとオームの法則

オームの法則によれば、電流密度 \mathbf{J} は電界 \mathbf{E} とコンダクタンス (抵抗の逆数) σ によって、

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$$

と表すことができる。ここで \mathbf{J} と \mathbf{E} は明らかに三次元ベクトルである。

媒体が金属のように均一なもの (isotropic medium) でその方向にかかわらず一定したコンダクタンスを有するものであった場合 σ はスカラーとなり、例えば \mathbf{J} の x 方向への成分 J_x は、

$$J_x = \sigma E_x$$

で表すことができる。

しかし、媒体がクリスタルのように不均一でそのコンダクタンスが方向によって変わる場合には J_x は \mathbf{E} の x 方向成分だけでなく y 方向と z 方向の成分にも依存することになり、

$$J_x = \sigma_{xx} E_x + \sigma_{xy} E_y + \sigma_{xz} E_z$$

で表されることとなる。このときコンダクタンス σ は 3×3 の行列で表されるテンソルとなる。

つまり、オームの法則は、

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}$$

と、表すことができる。

数学的にこの式はコンダクタンスの行列が演算子であることを示している。Dirac 表記をすれば、

$$|J\rangle = \sigma |E\rangle$$

となる。つまり、数学上で演算子と言われるものは、ある系の物理特性（この例の場合はコンダクタンス）を表しているのである。

例 2: 慣性モーメントテンソル

古典力学の法則によれば、角運動量 L は角速度 ω と慣性モーメント I とによって、

$$L = I\omega$$

と表される。三次元空間での剛体を考えたとき、その慣性モーメントは 3×3 の行列、

$$I = \begin{pmatrix} I_x & I_a & I_b \\ I_a & I_y & I_c \\ I_b & I_c & I_z \end{pmatrix}$$

で表されるテンソルである。

このテンソルの対角成分 diagonal element は、

$$I_x = I_{xx} = \sum_i m_i (r_i^2 - x_i^2)$$

$$I_y = I_{yy} = \sum_i m_i (r_i^2 - y_i^2)$$

$$I_z = I_{zz} = \sum_i m_i (r_i^2 - z_i^2)$$

また、その非対角成分 non-diagonal element は、

$$I_a = I_{xy} = I_{yx} = - \sum_i m_i x_i y_i$$

$$I_b = I_{zx} = I_{xz} = - \sum_i m_i z_i x_i$$

$$I_c = I_{yz} = I_{zy} = - \sum_i m_i y_i z_i$$

の式から算出できる。ここで、 r^2 は位置ベクトル $\mathbf{r}_i(x_i, y_i, z_i)$ の絶対値の二乗、 x_i, y_i, z_i はその成分、 m_i はその位置ベクトルで表される部分の質量である。

この行列のように、対角成分を介して対称の位置にある非対角成分が一致する実数の行列は対称行列 symmetric matrix と呼ばれる。

慣性モーメントの行列（演算子）は対称行列であり、明らかにエルミートである。よって、その固有ベクトルが完全正規直交基を作る可能性があることになる。慣性モーメントは三次元空間での特性であるから、完全正規直交基とはすなわち三次元空間軸の三つの単位ベクトルにはかならない。事実、立体物が均一な物質でできた球でない限り、慣性モーメントテンソルの行列は三つの固有ベクトルと三つの固有値 eigenvalue を持つことになり、その三つの固有ベクトルは三次元空間での軸を形成する。この軸は基本軸 principal axis と呼ばれ、それぞれの固有値は対応する固有ベクトルの方向での慣性モーメントを表している。

直感的に判り難いこの関係も、立体楕円形

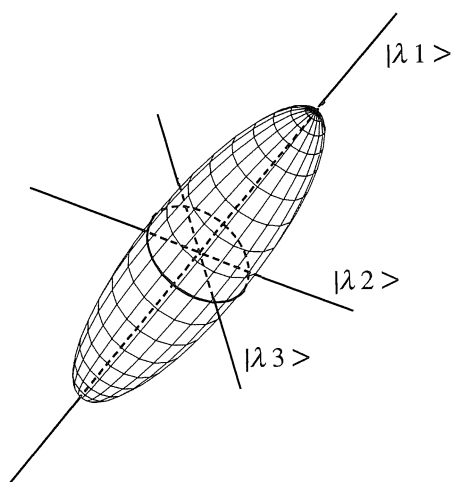


図 1. テンソル楕円体

(ellipsoid) を描くことによって視覚的に表現されると理解しやすい。図1にその例を示す。これは一般にテンソル楕円体 tensor ellipsoid と呼ばれる表記法である。

II. 量子力学における公準 Postulates of Quantum Mechanics

量子力学にはその理論体系の出発点となる六つの公準 postulate がある。判りやすい解説を目標としているこの小論の主旨に添い、この項でも多少の不正確さを無視して、これらの公準を単純化した表現で示す。

Postulate 1: ある物理現象を示すもののある瞬間 t_0 における状態は $\text{ket } |\varphi(t_0)\rangle$ で定義される。

注: $\text{ket } |\varphi(t_0)\rangle$ はベクトル空間に属しているためこの公準には一般的に重ね合わせの原理 superposition principle (state vector の和は state vector になる) も含まれる。

Postulate 2: すべての測定可能な量はその測定可能な演算子 observable によって定義される。

Postulate 3: 測定結果として得ることのできる量は測定可能な演算子に属する固有値のみである。

注: これら二つの公準は、前項で三次元テンソルを利用した詳しい解説を加えたので、明白であろう。

Postulate 4: ある量が正規化された状態 $|\psi\rangle$ で測定されたとき、その測定値が測定可能な演算子 A の固有値 a_n になる確率 $\rho(a_n)$ は

$$\rho(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2$$

で与えられる。ここで $|u_n\rangle$ は測定可能な演算子 A の固有値 a_n が属する正規化された固有ベクトルである。

注: 「正規化された」との条件 $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ と

$\langle u_n | u_n \rangle = 1$, は式を簡潔にするためだけに必要な条件であり必須のものではない。正規化されていない状態ではそれぞれの ket を絶対値 $\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$, $\sqrt{\langle u_n | u_n \rangle}$ で割ればよい。また、この公準は測定可能な演算子が discrete non-degenerate eigenvalue を持つ場合 (前述した三次元空間でのテンソルの例で言えば、その行列が三つの独立した固有値を持つ場合) という最も簡潔な例ではあるが、この小論では更に一般化した場合の説明を省く。

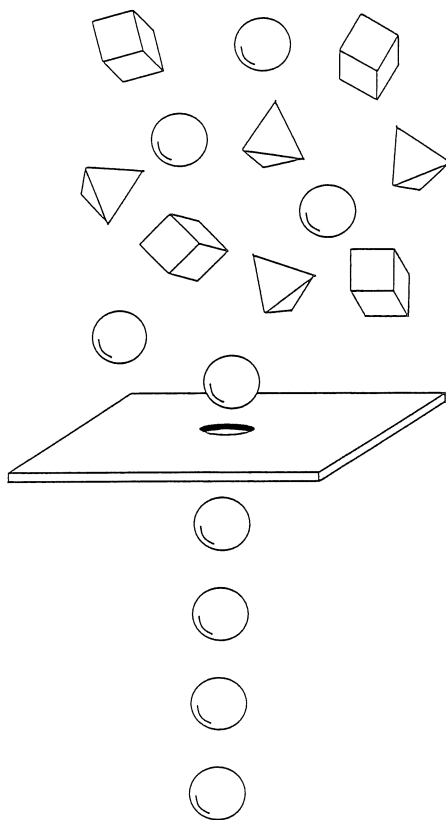


図2. 測定 measurement の影響

ある形のブロックだけが通る穴を考える。その穴を通して来るかこないかによってブロックの形が識別 (測定) できるが、識別直後のブロック、つまり穴を通して来たブロックはすべて穴と一致した (測定条件にあった) ブロックのみである。測定そのものが系に影響を与えてしまう量子力学の基本原則を示す例である。

Postulate 5: 測定値 a_n が得られた測定直後の状態ベクトルはその固有値 a_n が属する測定可能な演算子 A の固有ベクトルである.

注: この公準は「測定することそのものが既に系の状態を乱す行為である。」という量子力学の基本原則を表している (図2).

Postulate 6: 状態ベクトルの示す時間変化は Schrödinger 方程式:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$$

に従う. ここで, $H(t)$ はハミルトン演算子 Hamiltonian operator と呼ばれる測定可能な演算子で, 古典力学でのハミルトニアン Hamiltonian に対応し, 量子力学でのエネルギーを表す演算子である.

III. 1/2 スピン系での応用

III-1 測定可能な演算子の平均値

正規化した状態ベクトル $|\psi\rangle$ を考える. 系が $|\psi\rangle$ の状態のときに測定可能な演算子 A の測定を N 回行い, 得られた測定値が固有値 a_n であった場合が $\varkappa(a_n)$ 回であったとすれば, 測定可能な演算子 A の固有値が a_n になる確率 $\rho(a_n)$ との間には

$$\frac{\varkappa(a_n)}{N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \rho(a_n)$$

$$\sum_n \varkappa(a_n) = N$$

の関係がある. また, この N 回の測定で得られた値の平均値は,

$$\frac{1}{N} \sum_n a_n \varkappa(a_n)$$

で与えられ, $N \rightarrow \infty$ としたとき, その値が

$$\sum_n a_n \rho(a_n)$$

に近づくことも判る. この値を測定可能な演算子 A の $|\psi\rangle$ における平均値と呼び, $\langle A \rangle_\psi$ もしくは単に $\langle A \rangle$ と表す. すなわち,

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n \rho(a_n)$$

である.

Postulate 4 で示した関係式,

$$\rho(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2$$

を使えば, $\langle A \rangle$ は

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n |\langle u_n | \psi \rangle|^2$$

と表される.

複素関数の絶対値の定義と Dirac 表記における共役の取り方を思い出せば,

$$|\langle u_n | \psi \rangle|^2 = (\langle u_n | \psi \rangle)^* \langle u_n | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | u_n \rangle \langle u_n | \psi \rangle$$

であり, さらに, 固有ベクトル関数

$$A |u_n\rangle = a_n |u_n\rangle$$

と, 閉包関係 closure relation の関係式,

$$\sum_n |u_n\rangle \langle u_n| = \mathbb{1}$$

を, 考慮すれば, $\langle A \rangle$ は

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n |\langle u_n | \psi \rangle|^2$$

$$= \sum_n a_n \langle \psi | u_n \rangle \langle u_n | \psi \rangle$$

$$= \sum_n \langle \psi | A | u_n \rangle \langle u_n | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | A \sum_n | u_n \rangle \langle u_n | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | A | \psi \rangle$$

と, 導くことができる.

つまり, 測定可能な演算子 A の $|\psi\rangle$ における平均値 $\langle A \rangle$ は

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

の関係式で与えられるのである。

III-2 観測可能なスピン S

スピン状態空間 \mathcal{E} を考える。また、その実験室軸方向での成分を $\mathcal{E}_x, \mathcal{E}_y, \mathcal{E}_z$ とする (一般的には任意の単位ベクトルを \mathbf{u} としたとき、 $\mathcal{E} \cdot \mathbf{u}$ で表す)。

磁場の中での銀分子の deflection 実験結果から、 $1/2$ スピン粒子の角運動量の測定値は二つの値、 $+\hbar/2$ と $-\hbar/2$ を取ることが知られている。量子力学の postulate 2 と postulate 3 によればこの実験結果は行われた空間 (\mathcal{E}_z とする) において、 $+\hbar/2$ と $-\hbar/2$ がある測定可能な演算子 (S_z とする) の二つの固有ベクトル ($|+\rangle$ と $|-\rangle$ で表す) に属する二つの固有値でなければならない。

よって、

$$\begin{cases} S_z |+\rangle = +\frac{\hbar}{2} |+\rangle \\ S_z |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle \end{cases}$$

ここで $|+\rangle$ と $|-\rangle$ 正規直交関係、

$$\begin{cases} \langle + | + \rangle = \langle - | - \rangle = 1 \\ \langle + | - \rangle = \langle - | + \rangle = 0 \end{cases}$$

と閉包関係、

$$|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = \mathbb{1}$$

を満たしている。

固有ベクトル基 $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ での S_z の行列は、その固有値を対角成分とする対角行列 diagonal matrix (対角成分以外の成分がすべて零の行列) となり、

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

で表される。

また、 S の残りの成分 S_x と S_y の $\{|+\rangle, |-\rangle\}$

基での (S_z の固有ベクトルであり S_x と S_y の固有ベクトルではないことに注意!) 行列はそれぞれ、

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

となる。(証明は省く.)

よって、spin observable S は、

$$S = \frac{\hbar}{2} \sigma$$

で表される。

ちなみに σ のそれぞれの成分は、

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

であり、Pauli 行列と呼ばれるものである。

III-3 $1/2$ スピン粒子の発展

スピン $1/2$ の粒子が均一な静磁場 \mathbf{B}_0 の中に置かれた場合を想定する。粒子の磁気モーメントを \mathcal{M} とすれば、その古典力学的位置エネルギーは、

$$E = -\mathcal{M} \cdot \mathbf{B}_0 = -\gamma \mathcal{L} \cdot \mathbf{B}_0$$

で表される。 \mathcal{L} は粒子の角運動量である。

今、 \mathbf{B}_0 の方向を実験室軸の z 方向とすれば、

$$E = -\gamma B_0 \mathcal{L}_z$$

となることは明らかである。

量子力学では粒子の角運動量は量子化されており、また、そのエネルギーは Hamiltonian で表されるのであるから、 \mathcal{L}_z は spin observable S_z と、また、 E は H とに置き換えられる

ことになる。

よって、 $-\gamma B_0 = \omega_0$ とおけば、

$$\begin{aligned} H &= -\gamma B_0 S_z \\ &= \omega_0 S_z \end{aligned}$$

となる。

演算子 H と S_z はともに時間に依存しないことを考えれば、 H の固有ベクトルは明らかに S_z の固有ベクトルと一致し、よって、

$$\begin{aligned} H|+\rangle &= +\frac{\hbar\omega_0}{2}|+\rangle \\ H|-\rangle &= -\frac{\hbar\omega_0}{2}|-\rangle \end{aligned}$$

となる。ここから、 $1/2$ のスピンは静磁場の中で二つのエネルギー値、

$$\begin{aligned} E_+ &= +\frac{\hbar\omega_0}{2} \\ E_- &= -\frac{\hbar\omega_0}{2} \end{aligned}$$

を、取り得ることが判る。

III-4 平均値の発展

正規化した時間に依存する状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ を想定する。状態 $|\psi(t)\rangle$ における測定可能な演算子 A の平均値 $\langle A \rangle(t)$ は

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle$$

で与えられる。この平均値の時間変化を考えてみる。

両辺を時間 t で微分すれば、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) &= \left[\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right] A | \psi(t) \rangle \\ &+ \langle \psi(t) | A \left[\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right] \\ &+ \langle \psi(t) | \frac{\partial A}{\partial t} | \psi(t) \rangle \end{aligned}$$

となる。最後の項は測定可能な演算子 A 自体に時間依存性があった場合のみ加わる項であ

る。

Schrödinger 方程式によれば、

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} H(t) |\psi(t)\rangle$$

また、 $H(t)$ がエルミートであることを思い出しながらその共役を取れば、

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \frac{1}{-i\hbar} \langle \psi(t) | H(t)$$

よって、

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle [A(t), H(t)] \rangle + \left\langle \frac{\partial A(t)}{\partial t} \right\rangle$$

が与えられる。ここで $[,]$ は交換子 commutator と呼ばれる演算子で $[A, B] = AB - BA$ を表す。

III-5 磁気モーメントの平均値

磁気モーメントの平均値 $\langle \mathbf{M} \rangle(t)$ は、

$$\langle \mathbf{M} \rangle(t) = \gamma \langle \mathbf{S} \rangle(t)$$

で与えられる。その時間変化は前項で示した関係式を使って、

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{M} \rangle(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle [\mathbf{M}, H(t)] \rangle$$

と表される。(observable M は時間に依存しない。)

また、Hamiltonian は、磁気モーメントの位置エネルギーであるから、

$$H(t) = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}(t)$$

で与えられる。

内積 $\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}(t)$ をそれぞれの成分で表せば、

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}(t) = M_x B_x(t) + M_y B_y(t) + M_z B_z(t)$$

となる。ここで、 M_x, M_y, M_z は測定可能な演算子、 $B_x(t), B_y(t), B_z(t)$ はスカラーである。

実際に x 成分の交換部分 $[M_x, H(t)]$ を計算

してみると,

$$\begin{aligned} [M_x, H(t)] &= -\gamma^2 [S_x, \{S_x B_x(t) + S_y B_y(t) \\ &\quad + S_z B_z(t)\}] \\ &= -\gamma^2 B_y(t) [S_x, S_y] \\ &\quad - \gamma^2 B_z(t) [S_x, S_z] \end{aligned}$$

ここで,

$$\begin{aligned} [S_x, S_y] &= i\hbar S_z \\ [S_y, S_z] &= i\hbar S_x \\ [S_z, S_x] &= i\hbar S_y \end{aligned}$$

の関係式を利用すれば (この関係の証明は各自にまかせる),

$$[M_x, H(t)] = i\hbar \gamma^2 (B_z(t) S_y - B_y(t) S_z)$$

となる. よって, 磁気モーメントの平均値 $\langle \mathbf{M} \rangle(t)$ の x 成分の時間変化は,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle M_x \rangle(t) &= \frac{1}{i\hbar} \langle [M_x, H(t)] \rangle \\ &= \gamma (B_z(t) \langle M_y \rangle(t) \\ &\quad - B_y(t) \langle M_z \rangle(t)) \end{aligned}$$

で与えられることになる.

同様にその y 成分, z 成分もそれぞれ,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle M_y \rangle(t) &= \frac{1}{i\hbar} \langle [M_y, H(t)] \rangle \\ &= \gamma (B_x(t) \langle M_z \rangle(t) \\ &\quad - B_z(t) \langle M_x \rangle(t)) \\ \frac{d}{dt} \langle M_z \rangle(t) &= \frac{1}{i\hbar} \langle [M_z, H(t)] \rangle \\ &= \gamma (B_y(t) \langle M_x \rangle(t) \\ &\quad - B_x(t) \langle M_y \rangle(t)) \end{aligned}$$

で与えられる.

ここから, 磁気モーメントの平均値 $\langle \mathbf{M} \rangle(t)$ の時間変化は,

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{M} \rangle(t) = \gamma \langle \mathbf{M} \rangle(t) \times \mathbf{B}(t)$$

とまとめられることになる.

この式は古典力学で登場する Bloch 方程式と同義である. 古典力学での巨視的磁化 macroscopic magnetization にあたるものが, 量子力学では一つ一つの粒子がもたらす磁気モーメントの測定値の平均として表されるのである. 量子力学的測定を繰り返し行ったとき, その平均値は古典力学での測定値に限りなく近づくのである.

III-6 密度演算子と密度行列

最後にもう一つ MR の記載によく登場する密度演算子 density operator と密度行列 density matrix の紹介をする.

正規化した state vector $|\psi(t)\rangle$ の密度演算子 $\rho(t)$ は,

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$$

と定義される. またその行列成分 matrix element ρ_{pn} は,

$$\begin{aligned} \rho_{pn}(t) &= \langle u_p | \rho(t) | u_n \rangle \\ &= \langle u_p | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | u_n \rangle \end{aligned}$$

と定義される.

前項で示した時間変化の計算法と同様に, 密度演算子の時間変化を計算してみると,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho(t) &= \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \\ &= \left(\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \right) \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \\ &\quad \times \left(\frac{d}{dt} \langle \psi(t)| \right) \\ &= \frac{1}{i\hbar} H(t) |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \\ &\quad + \frac{1}{-i\hbar} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| H(t) \\ &= \frac{1}{i\hbar} H(t) \rho(t) - \frac{1}{i\hbar} \rho(t) H(t) \\ &= \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)] \end{aligned}$$

となり, 密度演算子方程式 density operator

equation,

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)]$$

が得られる。これは Schrödinger 方程式に代わるもので、density operator formalism が状態ベクトルの代わりに密度演算子を使ってすべての「状態」を表現しようとする方法論であることが垣間見られると思う。

同様に、測定可能な演算子 A の平均値を状態ベクトルではなく密度演算子で表してみると次のようになる。

ある状態ベクトルがある瞬間 t において、

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |u_n\rangle$$

で表される系を想定する。状態ベクトルが正規化されているとすれば、その係数は、

$$\sum_n |c_n(t)|^2 = 1$$

の関係を満たす。

ある演算子 A がその行列成分を

$$\langle u_n | A | u_p \rangle = A_{np}$$

で表される観測可能な演算子であったとすれば、ある瞬間 t における平均値 $\langle A \rangle$ は、

$$\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \sum_{n,p} c_n^*(t) c_p(t) A_{np}$$

で与えられることになる。

密度演算子の定義から、

$$\begin{aligned} \rho_{pn}(t) &= \langle u_p | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | u_n \rangle \\ &= c_n^*(t) c_p(t) \end{aligned}$$

よって、

$$\begin{aligned} \sum_n |c_n(t)|^2 &= \sum_n \rho_{nn}(t) \\ &= \text{Tr } \rho(t) \\ &= 1 \end{aligned}$$

となる。ここで、 Tr は行列の対角線分の総和

(トレース trace と呼ばれる) を取る演算子である。

ここから、

$$\begin{aligned} \langle A \rangle(t) &= \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \\ &= \sum_{n,p} c_n^*(t) c_p(t) A_{np} \\ &= \sum_{n,p} \langle u_p | \rho(t) | u_n \rangle \langle u_n | A | u_p \rangle \\ &= \sum_p \langle u_p | \rho(t) A | u_p \rangle \\ &= \text{Tr} \{ \rho(t) A \} \end{aligned}$$

となり、関係式、

$$\langle A \rangle = \text{Tr} \{ \rho A \} = \text{Tr} \{ A \rho \}$$

が得られる。

締めくくりとして、 $1/2$ スピンが静磁場 B_0 の中に置かれた場合の density matrix formalism を示す。

系が温度 T で熱力学上の平衡状態にある場合、その密度演算子 ρ は、

$$\rho = Z^{-1} \exp[-H/kT]$$

で与えられる。 H は Hamiltonian, k は Boltzmann 定数である。 Z は partition function と呼ばれるもので密度演算子を正規化するための係数で、

$$Z = \text{Tr} \exp[-H/kT]$$

で表される。

$1/2$ のスピンの静磁場 B_0 の中に置かれたとき、それは $|+\rangle$ か $|-\rangle$ かいずれかの状態にあり、それぞれ、

$$|+\rangle \Leftrightarrow +\frac{\hbar\omega_0}{2}$$

$$|-\rangle \Leftrightarrow -\frac{\hbar\omega_0}{2}$$

のエネルギーと対応している。

よって、そのスピンの $|+\rangle$ か $|-\rangle$ の状態にある確率はそれぞれ、

$$|+\rangle \Leftrightarrow Z^{-1} \exp \left[\frac{-\hbar\omega_0}{2kT} \right]$$

$$|-\rangle \Leftrightarrow Z^{-1} \exp \left[\frac{+\hbar\omega_0}{2kT} \right]$$

で与えられ、その密度行列は、

$$\rho = \begin{pmatrix} \exp \left[\frac{-\hbar\omega_0}{2kT} \right] & 0 \\ 0 & \exp \left[\frac{+\hbar\omega_0}{2kT} \right] \end{pmatrix}$$

となる。

ここから、spin observable の平均値は、

$$\langle S_x \rangle = \text{Tr} (\rho S_x) = 0$$

$$\langle S_y \rangle = \text{Tr} (\rho S_y) = 0$$

$$\langle S_z \rangle = \text{Tr} (\rho S_z) = -\frac{\hbar}{2} \tanh \left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT} \right)$$

つまり、スピンは置かれた磁場と parallel な方向に polarization を起こし、その大きさは ω_0 (つまり静磁場の強さ、 B_0) が高いほど、また T が低いほど大きくなる。また $|\tanh(x)| < 1$ であることから、polarization の最高値が $\hbar/2$ であることも判る。

蛇足であるが、

$$\langle M_z \rangle = \gamma \langle S_z \rangle = \chi B_0$$

の関係を利用して、スピンの常磁性体磁化率

paramagnetic susceptibility χ を算出する関係式、

$$\chi = \frac{\hbar\gamma}{2B_0} \tanh \left(\frac{\hbar\gamma B_0}{2kT} \right)$$

を導くこともできる。この式は Brillouin formula と呼ばれている。

おわりに

MR は極端に守備範囲の広い、かつ学際色の濃い学問である。21 世紀を迎えるに当たって望まれることは、MR に携わる人間すべてが共通の言語を持ち、共通の基盤からその応用を語ることである。この小論により、少しでも多くの方が MR formalism を身近に感じてくれることを期待したい。

Suggested Readings

- 1) Arfken G : Mathematics for Physicists. 3rd ed. Berkeley : Academic Press, 1985
- 2) Choen-Tannoudji C, Diu B, Laloë F : Quantum Mechanics. London : John Wiley & Sons, 1977
- 3) Ernst RR, Bodenhausen G, Wokaun A : Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions. Oxford : Oxford Science Publications, 1987

Principle for MR Formalism

Tsutomu NAKADA

*Department of Integrated Neuroscience
Brain Research Institute, University of Niigata, Niigata 951-8585
Center for Tsukuba Advanced Research Alliance
University of Tsukuba, Ibaraki 305-8577
Beckman Institute
California Institute of Technology, Pasadena, CA 91106*

Familiarity with MR formalism is not necessarily mandatory for the majority of MR scientists. Nevertheless, it is essential for those who desire to contribute to the further advancement in MR technology in the upcoming 21st century. A major obstacle which many medical practitioners encounter, if and when they want to undertake MR formalism, is their unfamiliarity with mathematical terminology and methodologies. Owing to the paucity of textbooks bridging high school mathematics and entry level quantum mechanics mathematics, such interested scholars often become discouraged and abandon their pursuit. This article is written in an attempt to provide a bridge for non-engineers interested in becoming acquainted with MR formalism.