

NMR 信号の起源—古典的な記述と量子論的な記述から—

佐藤 博 司

国立循環器病センター研究所先進医工学センター先進診断機器開発室

はじめに

核磁気共鳴現象が観測^{1),2)}されてから約 60 年が過ぎ、その臨床応用は信号発生の物理学的理論や、静磁場、傾斜磁場、高周波などの工学的技術に支えられて発展をしてきた。NMR 信号の正確な解釈は量子論を必要とし、その習得には日常からかけ離れた概念や高度な数学的知識が不可欠である。MRI の臨床応用を考えた場合、古典的な解釈による理解でも十分な場合が多く、必ずしも量子論は必要としない。一方、量子論誕生から 100 年を迎えた現在、その応用技術による成果は米国国民総生産の 30 % を占め、MRI はその代表的応用例として列挙されている³⁾。本報では臨床応用研究者が必要な量子論のレベルにおいて、NMR 信号の起源を古典論との対比を踏まえて解説する。

古典論と量子論

Planck, Schrödinger, Heisenberg らの現代物理学（量子論）との対比から、Newton, Maxwell らによって確立された力学、電磁気学は、古典物理学（古典論）と呼ばれる。量子論はそれまでの概念を覆す革命的な考え方であり、お互いの根底は相容れないものである。量

子論は、日常とかけ離れた難解な仮定を含むが、今日行われているすべての実験事実と明確な矛盾が見つかっておらず、より正確に自然現象を記述していると考えられる。それに対して古典論は、日常の経験となじみが多く理解が容易で、マクロな系では、近似的に十分な精度で未来を予測することができる。しかし、古典論は対象が原子のレベルになると実験事実と矛盾し、理論が崩壊することもある。非局所的な未知の力を導入して、その理論を建て直そうとする古典論拡張の試みもあるが、多くの研究者にとって受け入れがたいものとなっている⁴⁾。

量子論は現代物理学とは言いつつも、既に確立した古い学問であり、量子力学としての計算上の輝かしい成功の反面、その数式の哲学的な解釈である存在論や古典的観測との境目（“Schrödinger の猫”，“Wigner の友人”などの議論が有名）などの議論が未決着であり、興味はつきない^{3),4)}。応用研究者にとっては、このような哲学的問題を探求するのではなく、必要に応じて適切な方法を選択し、身近な事象を予言できることが重要だと思われる。すなわち惑星の軌道計算では量子論をもち出す必然性はなく、Newton 力学で十分なのであるが、原子のふるまいは量子力学でなくては記述できない。それでは MRI においてはどうかであろう

この総説は、第 34 回日本磁気共鳴医学大会教育講演「基礎」での講演を中心にまとめたものである。

キーワード NMR, quantum mechanics, classical mechanics, wave equation, equation of motion

か？ 古典論で記述したマクロな磁化のふるまいは、画像のコントラストを十分な精度で説明する。しかしスピン間の相互作用や偏極現象などを考えるとすぐさま理論が崩壊してしまうため、必要に応じて使い分けが必要で、まさに境界における学問であるといえる。

因果律と確率論

古典論においては、物理現象は因果律により未来が正確に決まるという立場をとる。初期条件（原因）を決めれば、未来（結果）がいくらでも正確に予言できるということになる。それに対し量子論においては初期条件を決めることから問題が生じる。古典論においては同種の粒子に任意の番号をつけて区別し、それぞれの状態を議論することができるが、量子論では同じ状態の同種粒子は区別することができない。たとえ粒子が一つの場合でも、観測なしには状態は決まらないし、状態を決めるための観測という行為により粒子の状態が変わってしまう。また、量子論では物理量は演算子で表現されるが、例えば位置と運動量のように演算の順番を交換すると計算結果が変わってしまうことがあり（非可換であるという）、その場合、両物理量をプランク定数のファクターよりも高い精度で、同時に知ることはできない（不確定性原理）。状態が測定により特定できたとしても、その粒子の未来は確率論的に言及できるだけで、統計的なことは言っても特定の粒子の挙動はまったく予想できない。

量子の状態はとり得るあらゆる状態の重ね合わせた状態（重ね合わせの原理）にあり、複素波動関数で表現される。波で表現されるということは、状態があるところで強め合い、また弱め合ったり、なくなったりもしている。コペンハーゲン学派的解釈によれば、観測行為（環境

との相互作用とも言える）が、重ね合わせの状態からただ一つのある状態に収束（波束の収束）させ、とびとびの観測値（プランク定数の整数倍）をもつ粒子として我々に見えるのである。MRI で取り扱う個々のプロトンのスピンはこの量子に相当し、その十分大きな集合としての巨視的な磁化は古典的に取り扱うことができるのである。これらの特徴を Fig. 1 に示す。

古典論による MR 信号の記述

均一な静磁場 H_0 中の磁化を μ とする (Fig. 2)。太字はベクトルであることを表現している。古典論の出発点（仮定）は運動方程式[1]である。 t は時間、 γ は磁気回転比を表し、磁化ベクトルの時間変化率はそれが受ける外力に等しいことを意味している。古典力学を使用するということは、この仮定を無条件で受け入れ、そこから引き出される結果を活用することを意味する。ここで使用している記号 \times はベクトルの外積で、磁化に作用する外力 F は、 μ と H_0 の両方向に直交し、 μ から H_0 の方向に右ネジを回した方向をもつベクトルとなる。

$$\frac{d\mu}{dt} = -\mu \times \gamma H_0 \dots\dots\dots \text{運動方程式[1]}$$

この微分方程式を状況別に解析的に解くことにより、ここから導き出される結果を考察する。最初に H_0 の方向に対して等角速度 ω で回転しながら、磁化を観察してみる。なぜこのような複雑な見方をするかは、後であきらかになるが、より簡単に運動を表現するためである。観察者の変更は数学的には、適切な座標変換を行えばよく、この場合は回転座標系による変換である[2]。

2007年2月15日受理

別刷請求先 〒565-8565 大阪府吹田市藤白台5-7-1 国立循環器病センター研究所先進医工学センター先進診断機器開発室 佐藤博司

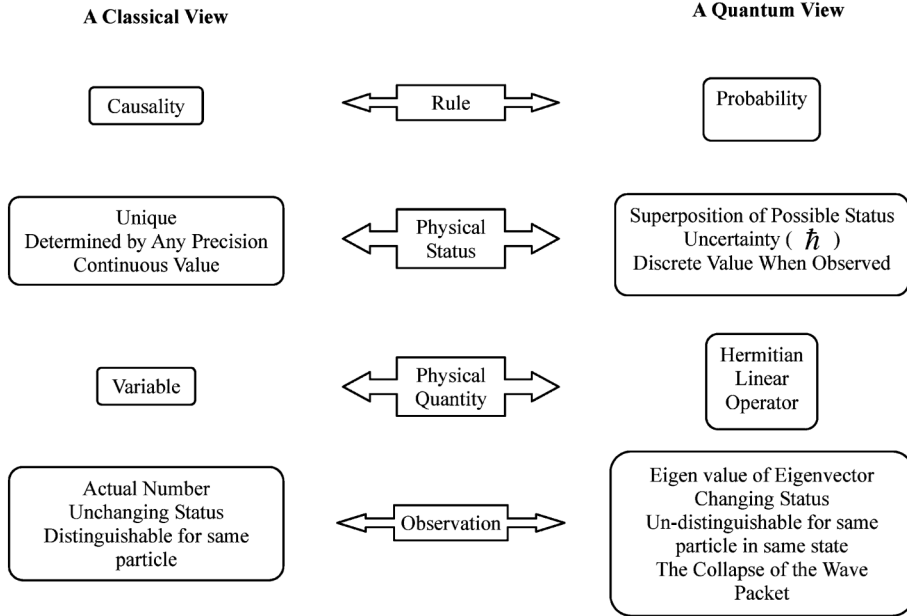


Fig. 1. Characteristics of the classical and the quantum physics

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = -\boldsymbol{\mu} \times (\gamma \mathbf{H}_0 - \boldsymbol{\omega}) \dots\dots\dots [2]$$

すると、この観察者から見ると、右辺の項が一つ増えている。実際は存在しない力が、まるであたかもこの磁化に作用しているように見える。このような力を慣性力といい、遠心力やコリオリの力と同じたぐいのものである。 $\mathbf{H}_e = \mathbf{H}_0 - (\boldsymbol{\omega}/\gamma)$ とおくと、式[3]となり、この座標系では \mathbf{H}_e が印加されているように見える。

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = -\boldsymbol{\mu} \times (\gamma \mathbf{H}_0 - \boldsymbol{\omega}) = -\boldsymbol{\mu} \times \gamma \mathbf{H}_e \dots\dots\dots [3]$$

ここで等角速度 $\boldsymbol{\omega}$ の大きさについて考える。 $\boldsymbol{\omega}$ の大きさはまだ決めていなかったの、いくつでもよいはずである。それでは一番都合のよい大きさ ω_0 というものを考えよう。 $\omega_0 = 0$ とすると、これは回転していない実験室座標系と等価であり意味がない。 $\omega_0 = \gamma H_0$ とすると、 $\mathbf{H}_e = \mathbf{0}$ となり、式[3]の右辺の外力は $\mathbf{0}$ とな

る。磁化の時間変化率も $\mathbf{0}$ となり、磁化は時間によらず一定という最も簡単な結論を得る。

回転座標系で一定(止まっている)のものは、実験室から見ると等角速度 (ω_0) で回転して見える。この磁化が止まって見える特別な周波数 ω_0 はラーモア周波数と定義されている。

磁化のあるものが回転すれば電磁誘導により、コイルに起電力が発生する。唯一の例外は磁化が \mathbf{H}_0 に平行になっているときであり、例えば平衡状態や反転パルス印加直後の状態がそうである。この特別な向きを Z 軸、縦磁化の方向と決めている。横磁化というのはこれに垂直な任意の軸で、横磁化の大きさがコイルの誘導起電力の大きさ (=NMR 信号) の強度を決定する。磁化に及ぶ力は常に垂直 (ベクトルの外積でトルクとして作用) であるため、外部磁場と磁化の間にはエネルギー的やりとりがなく、一定の運動を続けさせようとするのである (Fig. 2)。現実にはたくさんの $\boldsymbol{\mu}$ が存在し、様々な相互作用による摩擦の項が存在し磁化は減

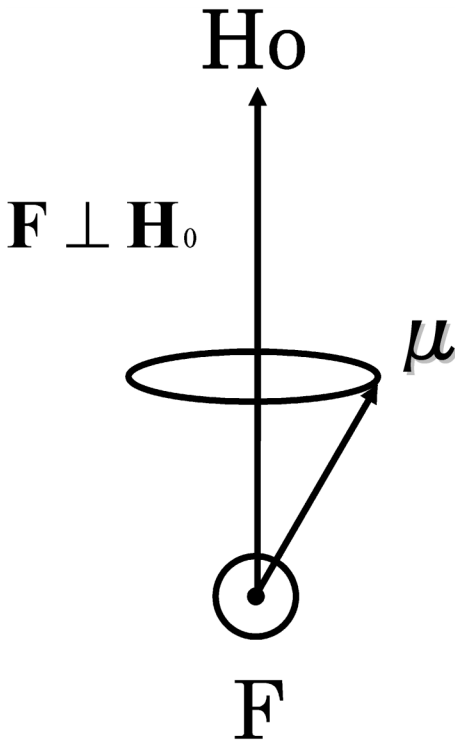


Fig. 2. A quantum view of macroscopic magnetization (μ) in a static magnetic field (H_0) Magnetization always gets the force (F) in a right-angled direction of both μ and H_0 . Therefore μ exchanges no energy for H_0 and continues to spin.

衰（緩和）していく。またここで扱った磁化はたくさん集まったマクロな磁化であることに注意すべきで、例えば一つの原子の磁化に対しては適用してはならない。

量子論的アプローチ

ここではディラック形式によるシュレディンガー波動方程式[4]から出発する^{5),6)}。量子力学は難解な数学で記述されていて、その正確な理解が必要であるが、ここでは概略と物理的な解釈を中心に解説する。

$$i \hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \dots\dots\dots [4]$$

i : 虚数単位, \hbar : プランク定数を 2π で割ったもの, \hat{H} : ハミルトニアン演算子, $|\psi\rangle$: 状態ベクトル

ここで、とり得る可能なエネルギー状態は何かを考えることにし、変数分離という数学的手法により、時間に依存しない形式[5]を得る⁷⁾。ハミルトニアン \hat{H} は正準量子化されたエネルギーを表すエルミート演算子であり、 E はその固有値で実際に観測できるエネルギーを表している。

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \dots\dots\dots [5]$$

磁化 μ が静磁場 H_0 中に置かれた場合のエネルギーは、その内積で表されるため、スピン角運動量の静磁場方向成分 S_z を用いて表現される[6]。

$$\hat{H} = -\mu \cdot H = -\gamma S_z H_0 \dots\dots\dots [6]$$

S_z はスピン磁気量子数 m_s の \hbar 倍となり、プロトンの場合 m_s は $-1/2$ か $1/2$ のどちらかであるため、エネルギー準位は[7]となる。 m_s は概念的に量子のもつ自由度のうち自転と考えると都合がよく、上向きか下向きかという表現をされることがある。

$$E = -\gamma \hbar H_0 m_s \dots\dots\dots [7]$$

MR における信号は、状態の持つエネルギーの絶対値そのものではなく、状態が遷移するときのエネルギー差 ΔE に起因しており、これはとり得る m_s を[7]に代入し、差分をとることにより得られる[8]。

$$\Delta E = \gamma \hbar H_0 \dots\dots\dots [8]$$

ΔE は H_0 に比例しているため、 H_0 が 0、すなわち磁場がないところでは、プロトンの二つの状態に対するエネルギー差がないことになる。異なる物理的状态に対するエネルギーの解がた

またま同じになった（数学的に重根）状態で、これを物理的には縮退という。\$H_0\$ が 0 から大きくなると縮退が解かれ、最初は同じエネルギー準位で区別のつかなかった状態が、二つの異なった準位に分かれ（ゼーマン効果）、その大きさは静磁場強度に比例する（Fig. 3）。そのエネルギーは角周波数の \$\hbar\$ 倍（プランクの法則）であるので、その周波数を \$\omega_0\$ とすれば [9]、両辺から量子力学的な定数である \$\hbar\$ が落ち、\$\omega_0 = \gamma H_0\$ と古典論と同じ結論を得る。

$$\Delta E = \gamma \hbar H_0 = \hbar \omega_0 \dots\dots\dots [9]$$

量子論と古典論というまったく異なったアプローチで同じ結論を得ることができるのは驚きである。古典論ではマクロな集合としての磁化を取り扱っていたが、今回は一つの磁化の期待値を取り扱ってきた。MRI で観測される信号強度は、多数の磁化からのコヒーレントな \$\Delta E\$ のエネルギー遷移が何個あるかに比例する。それぞれのエネルギー準位の占有数 (\$N_+\$, \$N_-\$) の比は、熱力学的な平衡であるボルツマン分布 (Fig. 3) となり、MRI の信号強度は占有数の

差 (\$N_+ - N_-\$) に比例することになる。この占有数の差は熱平衡状態では百万個のプロトンにつき数個の差でしかない。この占有数の差を大きくする試みが偏極⁸⁾と呼ばれ、古典論からは導けない応用例である。

ピットフォール

古典論をよく理解して、量子論を聞きかじったときに陥りやすい間違いが両論を同時に使うことである。例えば Fig. 4a に示すようにマクロな磁化が上向きと下向きしか存在しないような理解である。これでは 90 度パルスや横磁化を説明することができなくなり、初学者の思考を停止させてしまうことがあるので、注意しなければならない。よくあるマクロな磁化を独楽に例える説明は、量子論を理解している人には耐え難いものだが、初学者への説明としては優れていて、多くのパルスシーケンスをこれで説明できる。重要なことは古典論による理解において、断片的な量子論からの知識や結果を盛り込んではいけないということである。スピンの

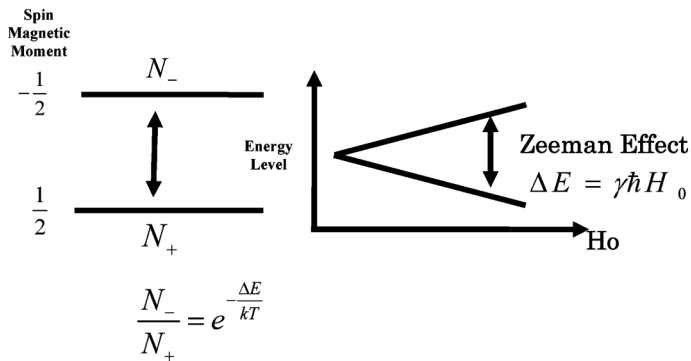


Fig. 3. A quantum view of spin in a static magnetic field (H_0) Degenerated energy level could be split in the presence of H_0 (Zeeman effect). A fractional number of spins in each state (N_-/N_+) obeys Boltzmann distribution.
 E: Energy level, ΔE : A subtraction of energy level, N_+ : A number of spins in lower state, N_- : A number of spins in upper state, γ : magnetic gyro ratio, \hbar : the reduced Planck constant, k : The Boltzmann constant, T : A thermodynamic temperature, e : the base of the natural logarithm.

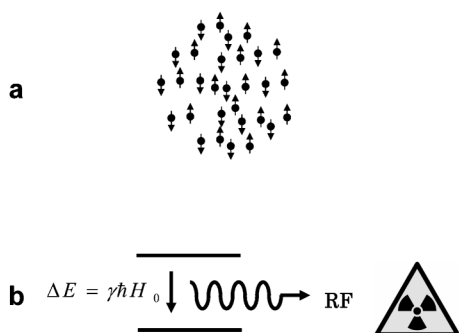


Fig. 4. Pitfall

a) Results of the quantum theory must not be included in a classical explanation.

b) Emission could not happen in radio frequency energy level.

ΔE : A subtraction of energy level, γ : A magnetic gyro ratio, \hbar : the reduced Planck constant, H_0 : a static magnetic field, RF: Radio Frequency.

上向きか下向きしかないということを言いたいのであれば、量子論の解説が必要となり、重ね合わせの原理や複素波動方程式の理解が前提となるのである。ひとたび古典論を使用したら、適用限界を考えた上で、最後までそれで通さなければならぬ。

次の例は核医学的な類推からのもので、エネルギーの高い状態から低い状態への遷移が、自然発生的な放射（輻射）によるものという解釈である（Fig. 4b）。この量子論的に一見正しい議論は、MRIの取り扱う radio frequency のエネルギーレベルではほとんどなりたない⁹⁾。黒体放射の量子論的考察から、このような放射が起きる確率は周波数の3乗に比例（Wien's Law）しており、MRIの対象となる周波数領域ではめったに起こりそうにない。MRIで検出している信号は電磁誘導によるものであって、放射によるものではない¹⁰⁾。

ま と め

MRIの信号の起源を、MRI応用研究者とし

て最低限必要とされるレベルに整理し、古典論、量子論とまったく異なった角度から解説した。MRIを臨床応用していく際には古典論による理解で十分であるが、新しいシーケンス、コントラストに踏み込んだ開発には量子論による理論武装が必要となる場合がある。すなわち偏極、 ^{13}C などの核種におけるデカップリング技術、交差緩和、コヒーレンスを考慮した二次元NMR、核オーバーハウザー効果や magnetization transfer effectなどは量子論による解釈が必要である。MRI応用研究者は古典論が使用できる限界に立ちっており、いわば足を踏み外すと転落してしまう崖っ縁にいることを十分に理解すべきではないだろうか。その限界を知るために、教育的に量子論を学ぶことは十分に意味がある。

文 献

- 1) Purcell EM, Torrey HC, Pound RV: Resonance absorption by nuclear magnetic moments in a solid. *Phys Rev* 1946; 69: 37
- 2) Bloch F, Hansen WW, Packard M: Nuclear induction. *Phys Rev* 1946; 69: 127
- 3) Tegmark M, Wheeler JA, 岡村 浩 (訳). 100 Years of Quantum Mysteries (量子力学100年の謎). 神野幹雄, 月刊日経サイエンス. 31巻, 東京: 日経サイエンス社, 2001; 5: 54-63
- 4) Polkinghorne JC, 宮崎 忠 (訳). *The Quantum world* 量子力学の考え方. 第1刷. 東京: 講談社, 1987; 153-156, 166-185, 205-217
- 5) 中田 力: MR formalism のための基礎知識. *日磁医誌* 1998; 18: 189-203
- 6) Feynman RP, Leighton RB, Sands ML, 砂川重信 (訳). *The Feynman Lectures on Physics III* ファインマン物理学V (量子力学). 第11刷. 東京: 岩波書店, 1987; 134-154
- 7) Slichter CP, 益田義賀 (訳). *Principles of Magnetic Resonance* 磁気共鳴の原理. 第2刷. 東京: シュプリンガー・フェアラーク東京, 2000; 11-16
- 8) Sato H, Enmi J, Hayashi T, et al.: Development of a hyperpolarized ^{129}Xe system on 3T for the

- rat lungs. Magn Reson Med Sci 2004 ; 3 : 1-9
- 9) Field A, 荒木 力 (監訳). MRI「超講義」. 第2版. 東京 : メディカル・サイエンス・インターナショナル, 2003 ; 27-28
- 10) Hoult DI, Ginsberg NS : The quantum origins of the free induction decay signal and spin noise. J Magn Reson 2001 ; 148 : 182-199

Understanding the Origin of Magnetic Resonance Signal by Classical and Quantum Physics

Hiroshi SATO

*Laboratory for Diagnostic Solution, Advanced Medical Engineering Center,
National Cardiovascular Center Research Institute
Fujishirodai 5-7-1, Suita, Osaka 565-8565*

The origin of magnetic resonance (MR) signal can be explained by either classical or quantum theory. Quantum theory provides a precise understanding of nature, whereas classical theory leads to approximations using easier mathematics that are acceptable to most applications of MR imaging. Familiarity with quantum theory is not mandatory, but a basic understanding of the limitations of classical theory is important for most researchers and clinicians involved in MR imaging. This article attempts to provide a starting point for contrasting quantum and classical theory to understand the origin of MR signal.