演習問題　第７章

1) Z 磁化に回転系の X 軸方向からｒｆ照射したときの磁化の回転の式をベーカー-キャンベル-ハウスドルフの公式（7.2）を用いて導け．導出には以下の角運動量演算子間の交換関係を使うと良い．

$$[I_X, I_Y] = iI_Z, [I_Y, I_Z] = iI_X, [I_Z, I_X] = iI_Y$$

解答例）

式 (7.2) に $\mathcal{H} = \omega_1 I_X, A = I_Z$ を代入する．

$$\begin{aligned} R_A &= I_Z - (i\theta)[I_X, I_Z] + \frac{(i\theta)^2}{2!}[I_X,[I_X,I_Z]] - \frac{(i\theta)^3}{3!}[I_X,[I_X,[I_X,I_Z]]] + \cdots \\ &= I_Z(1 - \frac{\theta^2}{2!} + \cdots) - I_Y(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \cdots) \\ &= I_Z \cos\theta - I_Y \sin\theta \end{aligned}$$

コメント）

例えば，$[\mathcal{H}, A] = B, [\mathcal{H}, B] = kA, A \neq \alpha B$ の場合には R_A はどのような形にうなるでしょう？具体的な例としては，$A = I_X$ で $B = 2\pi I_Z S_Z$ です（式 (12.1)）．やってみよ~

2) 照射位置から 10 kHz だけオフレゾナンスな Z 磁化はＸ方向からの強度 40 kHz の 90 度パルスでどのように変換されるか式（7.7）を用いて計算し，オンレゾナンスの場合は Z 磁化は完全になくなるのに対し，オフレゾナンスの場合は多少残ることを確認せよ．

解答例）

$U(t)I_Z U(t)^{-1}$ を地道に計算する．$\omega_{\text{eff}} t = \psi$ とおくと

$$U(t) = \exp(-i\theta I_Y)\exp(-i\psi)\exp(+i\theta I_Y)$$

と書け，

$$\begin{aligned} U(t)I_Z U(t)^{-1} &= e^{-i\theta I_Y} e^{-i\psi I_Z} e^{+i\theta I_Y} I_Z \times c.c \\ &= \cdots = (1-\cos\psi)\sin\theta\cos\theta I_X - \sin\theta\sin\psi I_Y + (\cos^2\theta + \sin^2\theta\cos\psi) I_Z \end{aligned}$$

オフレゾナンスの場合は，与えられた条件から $\sin\theta = \frac{4\sqrt{17}}{17}, \cos\theta = \frac{\sqrt{17}}{17}, \psi = \frac{\sqrt{17}}{8}\pi$ であり，$\cos^2\theta + \sin^2\theta\cos\psi \neq 0$ となる．一方，オンレゾナンスの場合は $\theta = \psi = \pi/2$ であり，$\cos^2\theta + \sin^2\theta\cos\psi = 0$.

コメント）
この問題で示したように，オフレゾナンスの信号の場合には，I_X 成分も $(1-\cos\psi)\sin\theta\cos\theta$ だけ出てくる．つまり，FID 観測時の初期磁化の位相が最初からずれている．この位相のずれはオフセット周波数に比例していると近似され（テイラー展開してチェックしてみよう！），３．３節で記述した１次の位相補正で修正される．実は，９０度パルスではなく２７０度パルスを使うと，パルス後から取り込みまでに進む位相とキャンセルするようになって，１次の位相補正が小さくてすむようになる（270 度パルスの自己リフォーカス性：WALTZ とかに使われてますね）．

3) ７．４節のスピンエコーの計算で，180 度パルスを Y 方向から照射すると，磁化はどこに再結像するか計算せよ．また７．５節の計算法でも計算してみよ．

解答例）
７．４節の本文に従い各時刻の密度行列を計算すると

$$
\begin{aligned}
\rho(t_1) &= I_X\cos\Delta\omega t_1 + I_Y\sin\Delta\omega t_1 \\
\rho(t_1+\pi) &= -I_X\cos\Delta\omega t_1 + I_Y\sin\Delta\omega t_1 \\
\rho(2t_1+\pi) &= -I_Y
\end{aligned}
$$

７．５節の方法では

$$
\begin{aligned}
U &= e^{-i\Delta\omega I_Z t_1} e^{-i\pi I_Y} e^{-i\Delta\omega I_Z t_1} \\
&= e^{-i\pi I_Y} e^{+i\pi I_Y} e^{-i\Delta\omega I_Z t_1} e^{-i\pi I_Y} e^{-i\Delta\omega I_Z t_1} \\
&= e^{-i\pi I_Y} e^{+i\Delta\omega I_Z t_1} e^{-i\Delta\omega I_Z t_1} \\
&= e^{-i\pi I_Y}
\end{aligned}
$$

従って，

$$U(t)I_X U(t)^{-1} = -I_Y$$

コメント）
元の磁化と完全に一致するわけではない（反転している）が，これもエコーと呼ばれる．

4) 式（7.9）を $e^{-i\Delta\omega I_Z t_1}$ をテイラー展開することで証明せよ．ただしスピン１／２で成り立つ $I_Z^2 = 1/4$ を用いて良い．

解答例）

$e^{-i\Delta\omega I_Z t_1}$ をテイラー展開すると

$$e^{-i\Delta\omega I_Z t_1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(-i\Delta\omega I_Z t_1)^n$$

これを

$$e^{i\pi I_Y} e^{-i\Delta\omega I_Z t_1} e^{-i\pi I_Y}$$

に代入すると

$$e^{i\pi I_Y} I_Z^n e^{-i\pi I_Y}$$

の計算を行うことになる.「スピン１／２で成り立つ $I_Z^2 = 1/4$ を用いて良い」とあるので，これを使ってもいいのだが，実はこれは必要ではなく，例えば

$$e^{i\pi I_Y} I_Z^2 e^{-i\pi I_Y} = e^{i\pi I_Y} I_Z e^{-i\pi I_Y} e^{i\pi I_Y} I_Z e^{-i\pi I_Y} = (-I_Z)(-I_Z) = I_Z$$

などと $\mathbf{E} = e^{-i\pi I_Y} e^{i\pi I_Y}$ を挟む事により，$I_Z \rightarrow -I_Z$ になることが判る．従って，

$$e^{i\pi I_Y} e^{-i\Delta\omega I_Z t_1} e^{-i\pi I_Y} = e^{+i\Delta\omega I_Z t_1}$$

コメント）

ただしスピン１／２で成り立つ $I_Z^2 = 1/4$ は式 (12.1) を出すときに使うのでした…

5) 時刻 $t = 0$ での密度行列を ρ_0 とし，時間推進演算子を $U(t)$ としたときに，時刻 $t = t_1$ での演算子 A の期待値は

$$< A >= \mathrm{Tr}\{U^{-1}(t) A U(t) \rho_0\}$$

で与えられることを示せ.

解答例）

$$< A >= \mathrm{Tr}\{A\rho(t)\} = \mathrm{Tr}\{AU(t)\rho_0 U^{-1}(t)\}$$

ここで，付録６に示した式，$\mathrm{Tr}\{ABC\} = \mathrm{Tr}\{CAB\}$ を使うと，

$$< A >= \mathrm{Tr}\{U^{-1}(t) A U(t) \rho_0\}$$

が得られる.

コメント)

つまり，密度行列に時間の順番に時間推進演算子を作用させて時間変化を見る方法と，観測に対応する演算子に時間の新しい順から「逆に」時間推進演算子を作用させて計算する方法がある．そもそも，$U^{-1}(t)$ と $U(t)$ は時間を反転させた関係になっている．