

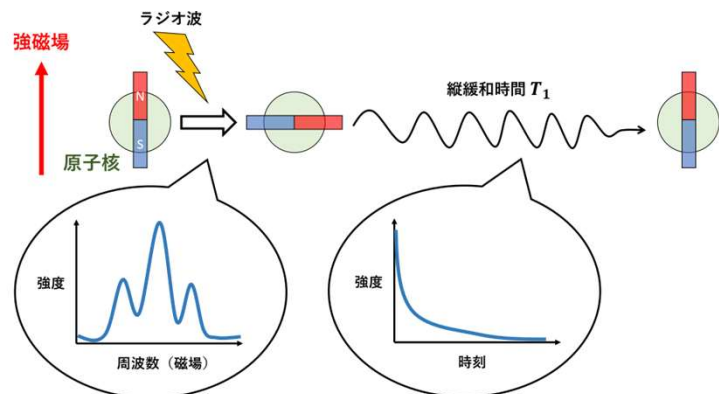
核磁気共鳴法へのデータ駆動科学的アプローチ

上田朔^A, 片上舜^A, 吉田章吾^B, 小山岳秀^B, 中井祐介^B, 水戸毅^B, 水牧仁一郎^C, 岡田真人^{*A}

^A東京大学, ^B兵庫県立大, ^C高輝度光科学研究センター * okada@edu.k.u-tokyo.ac.jp

核磁気共鳴法 (NMR)

核磁気共鳴法では物質の原子核に強磁場を印加し、ラジオ波で原子核を励起したときに得られるスペクトル (NMR スペクトル) や、励起した後に信号が減衰する緩和現象 (スピン格子緩和, スピンエコー緩和など) を観測することで物質の内部のミクロな相互作用を調べることができる。



目的

核磁化が励起前の熱平衡状態に戻ってゆく過程 (スピン格子緩和) を指数関数

$$m(t) = \exp\left(-\frac{t}{T_1}\right)$$

でフィッティングすることで緩和時間 T_1 を抽出することが NMR 実験では行われる。スピン格子緩和時間 T_1 は金属的な系の状態密度や半導体のエネルギーギャップなどと関係し、理論と比較しやすい物理量である。

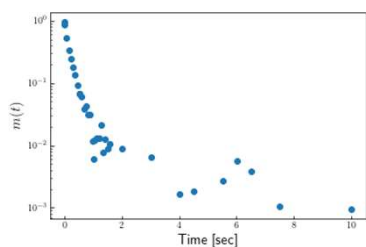
もし物質が複数の相に分かれていたり、いくつかの機構による緩和が共存している場合には単一の指数関数でフィッティングできない。この場合には複数の指数関数の和

$$m(t) = \sum_k A_k \exp\left(-\frac{t}{T_k}\right)$$

でフィッティングが行われるが、

- ・物質サンプルに存在する格子の乱れ
- ・データにのるノイズ

があるときに「何個の指数関数の和でフィッティングすべきか」を客観的に決める手法が必要である。今回の研究ではベイズ推論の枠組みで適切な緩和成分の個数の決定、ノイズやサンプルの不均一性の評価を行った。



→何個の指数関数？

手法・定式化

実験で得られる緩和曲線のモデルとして以下を仮定した。

$$m(t) = \sum_{k=1}^K A_k \exp(-(W_k t)^\beta) + C$$

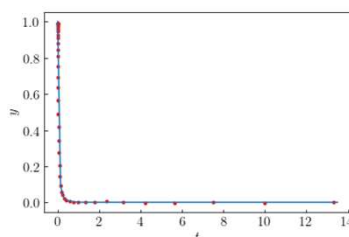
- ・ A_k は緩和振幅。事前分布は $0 \sim 1.05$ の一様分布を仮定。(※実験上の調整不足で A_k が 1 を超えることもある)
- ・ W_k は緩和率 (緩和時間の逆数) ガンマ分布の事前分布を仮定。
- ・ β は結晶格子の乱れや粉末試料を使っていることに由来するサンプルの不均一性を現象論的に取り入れるための指数。
- ・ C はラジオ波照射前の磁化の測定誤差に由来するオフセット 事前分布はガウシアンを仮定

さらに、各時刻 t_1, \dots, t_N における観測データには独立なノイズ $\sim \mathcal{N}(0, \epsilon)$ が乗ると仮定し、緩和成分の個数 K , 各種パラメータ、およびノイズ ϵ をベイズ推論する。モデルエビデンスの評価や事後分布からのサンプリングには交換モンテカルロ法[1]を使用した。

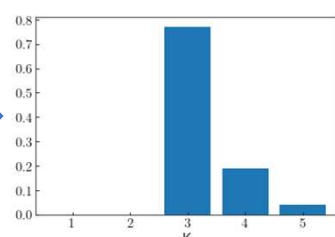
[1] K. Nagata, S. Sugita, and M. Okada, *Neural Networks* 28, 82 (2012)

数値実験

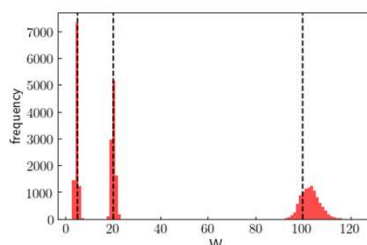
人工的に生成したデータで手法の性能を評価した。



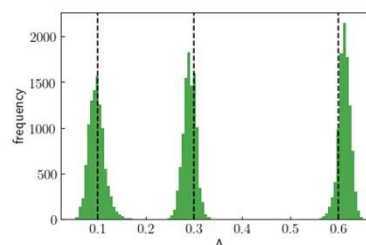
生成データ：K = 3



Kの事後分布

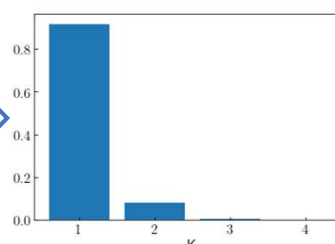
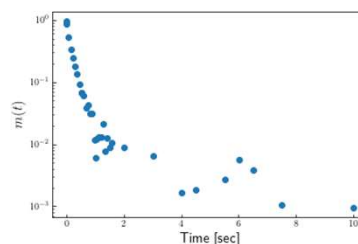


パラメータ (緩和率・緩和振幅) の事後分布



実データ応用：硫化サマリウム (常圧)

半導体 SmS のスピン格子緩和曲線のデータ[2]に本手法を適用。このデータは指数関数ではうまくフィッティングできなかったが、これを格子の乱れのせいだと思えるか、複数の緩和機構が共存していると思えるかが問題になる。



解析の対象となったデータ (100 K, 140 K, 200 K, 260 K) すべてにおいて $K=1$ が選択され、指数関数からのずれは格子の乱れだという結果になった。なお、この解析により抽出した T_1 は半導体のギャップの評価するために使うことができ、ほかの実験手法で見積もられたギャップと同程度になった。

[2] T. Koyama, H. Yamada, K. Ueda, T. Mito, and Y. Haga, *J. Phys.: Conf. Ser.* 592 012027 (2015)