

核磁気共鳴法へのデータ駆動科学的手法の開発

東京大^A, 兵庫県立大^B, JASRI^C

上田朔^A, 片上舜^A, 吉田章吾^B, 中井 祐介^B, 水戸 毅^B, 水牧仁一朗^C, 岡田真人^A

Development of data-driven methods for Nuclear Magnetic Resonance

Grad. School of FS, Univ.Tokyo^A, Grad. School of Science, Univ.Hyogo^B, JASRI^C
H. Ueda^A, S. Katakami^A, S. Yoshida^B, Y. Nakai^B, T. Mito^B, M. Mizumaki^C,
M.Okada^A

核磁気共鳴法 (NMR) は磁場下に置いた原子核スピンのエネルギー分裂を調べることで, 原子核スピンと相互作用する電子系・格子系に関する情報を引き出す実験手法である. 系の静的な情報は NMR スペクトルから, 動的な情報は核磁気緩和時間 (T_1, T_2) から得られる. 今回は, 後者のダイナミクスを解析するベイズ推論の手法について紹介する.

核スピン-格子緩和時間 T_1 は励起した核スピンの磁化の外部磁場方向 (z 方向) の成分 M_z が平衡値まで回復する緩和曲線 $M_z(t)$ の時定数である. 典型的には $M_z(t)$ は指数関数で表されるが, 核スピン I が 1 以上で四重極分裂がある場合には複数の指数関数の和で表される. $I = \frac{1}{2}$ の場合でも, 実験では単一の指数関数で表現できない $M_z(t)$ が観測される場合がある. 試料が複数の相に分離していると解釈するケースもあれば, 試料の Disorder が原因だと考えることもある.

今回はベイズ推論によって $M_z(t)$ を適切な個数の緩和成分に分解し, 緩和率を精度付きで評価する手法を開発した. この手法では単一の緩和成分を stretched exponential によりモデル化することで試料の Disorder を現象論的に取り入れる. 緩和成分の個数はベイズモデル選択の枠組みで決定することが可能である. このモデルは混合正規分布モデルなどと同じ特異モデルであるため, 交換モンテカルロ法によるモデルエビデンスの評価を行った. 発表では人工データと実データ (常圧下の半導体 SmS における核スピン格子緩和) に本手法を適用した結果を述べる.

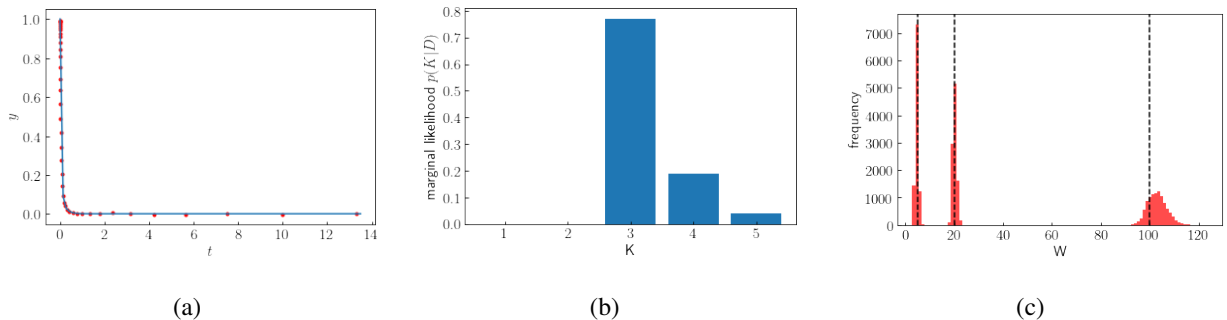


図 1 (a) 人工的に生成された緩和曲線 (b) 緩和成分の個数に対する事後分布 (c) 緩和率の事後分布