

Julia in Physics 2021 Online
2021/9/3 16:00~16:15

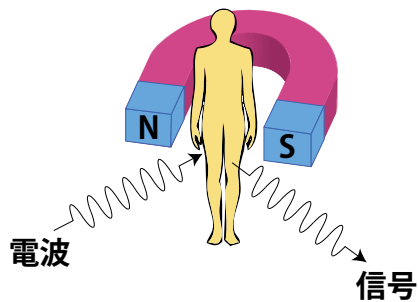
Juliaを用いた NMRスペクトルシミュレーション

琉球大学理学部：與儀 護



核磁気共鳴 (NMR) とは

- 核磁気共鳴 (NMR) とは、磁場中に置かれた原子核が固有の周波数の電磁波と相互作用する現象です。
- 共鳴信号強度の周波数 (磁場) 依存性 → NMR スペクトル



固体物性研究に用いる
NMRスペクトルの解析
という観点でお話しします。

NMRを利用して画像化するのがMRI



原子核は小さな磁石

$$\mu_n = \gamma_n h I$$

核磁気モーメント

核磁気回転比

核スピン

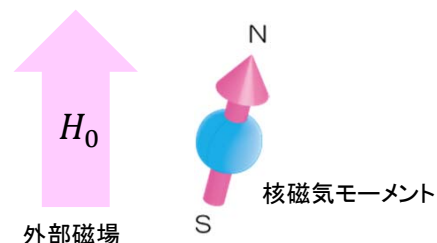
また、電気的な性質も有している

原子核に生じる相互作用

ゼーマン相互作用 ← 外部磁場

$$\mathcal{H}_Z = -\boldsymbol{\mu}_n \cdot \mathbf{H}_0 = -h\nu_0 I_z \quad (\nu_0 = \gamma_n H_0)$$

ν_0 : ラーモア周波数

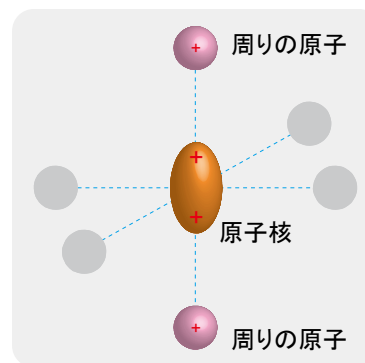


核四重極相互作用 ← 電場勾配

$$\mathcal{H}_Q = \mathbf{I} \cdot \mathbf{Q} \cdot \mathbf{I} = \frac{h\nu_Q}{6} \left[3I_z^2 - I^2 + \frac{\eta}{2} (I_+^2 + I_-^2) \right]$$

ν_Q : 核四重極周波数

η : 非対称パラメータ

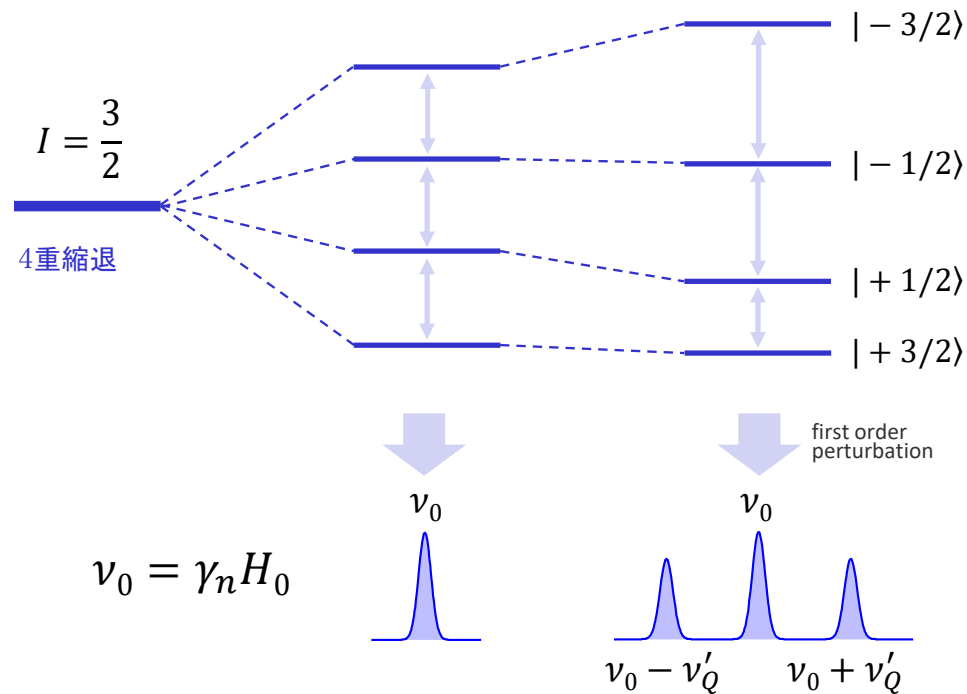


超微細相互作用

今回は時間の都合上
これは考えないものとします。

エネルギー準位

ゼーマン相互作用 + 核四重極相互作用



核スピンハミルトニアン
の決定
($H_0, I, \gamma_n, \nu_Q, \eta, \theta, \phi$)



固有値、固有ベクトルを
求める
Eval, Evec = eigen(Hami)



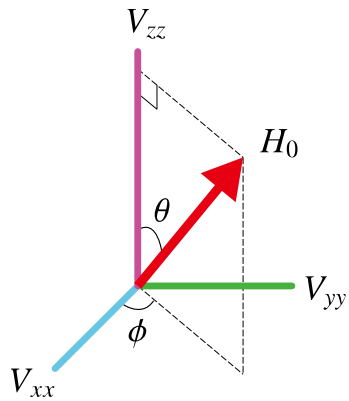
共鳴周波数、遷移確率を得る

$|m\rangle \leftrightarrow |m'\rangle$ の遷移確率

$$P_{m,m'} \propto |\langle m | I_x | m' \rangle|^2$$

各相互作用の主軸と磁場印加方向

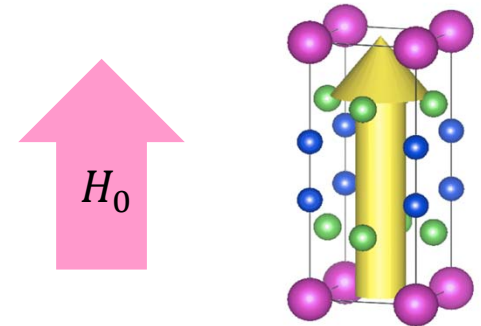
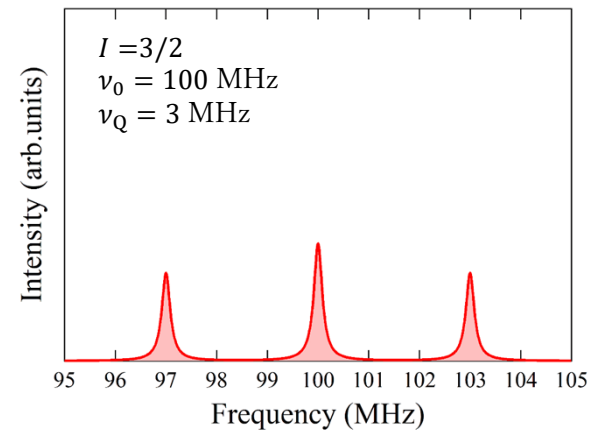
電場勾配の主軸



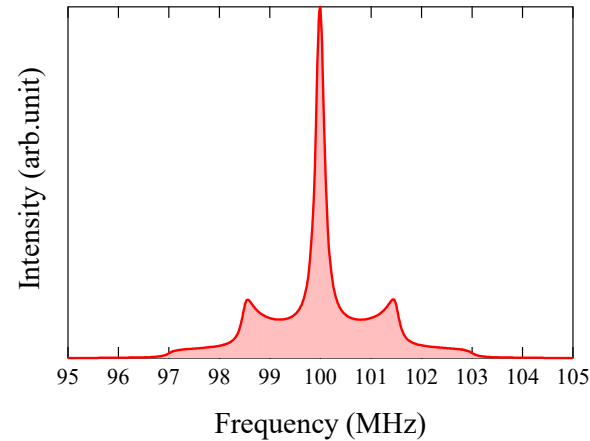
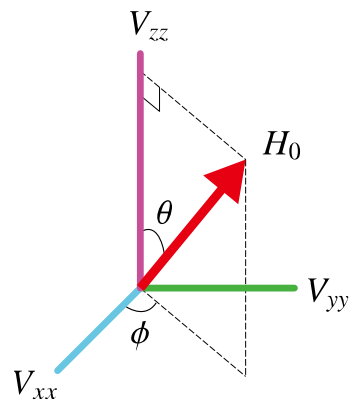
各相互作用の主軸の方向を考える必要がある。

ゼーマン相互作用と四重極相互作用の場合は、電場勾配の主軸 (V_{zz}, V_{xx}, V_{yy}) と外部磁場 H_0 のなす角。

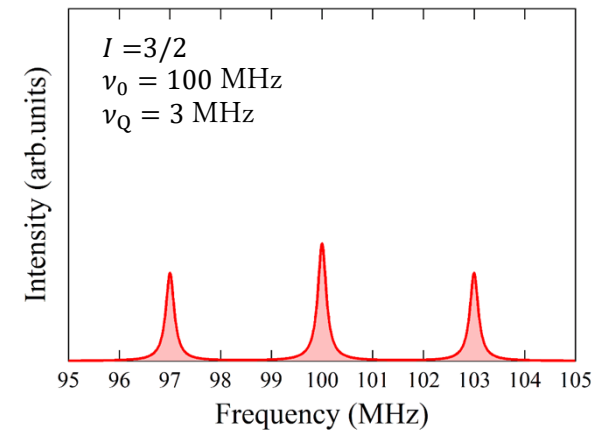
$$\mathcal{H}_{z+Q} = -\frac{h\nu_0}{2}(I_+ \sin \theta e^{-i\phi} + I_- \sin \theta e^{i\phi} + 2I_z \cos \theta) + \frac{h\nu_Q}{6} \left[3I_z^2 - I^2 + \frac{\eta}{2}(I_+^2 + I_-^2) \right]$$



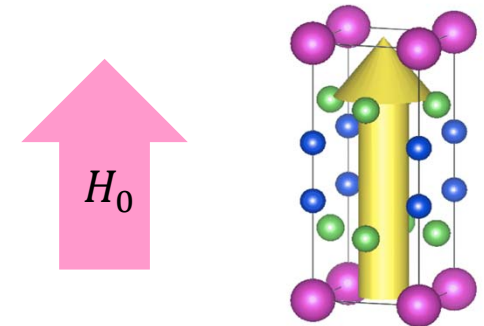
粉末パターンスペクトル



←
粉末パターン



粉末試料(多結晶)の場合、 θ と ϕ を振って計算する必要がある。
→ メッシュに応じて計算量が増える。



Juliaでの計算

スペクトルの計算と図の表示のためには
下記パッケージを用いる。

LinearAlgebra.jl
Plots.jl

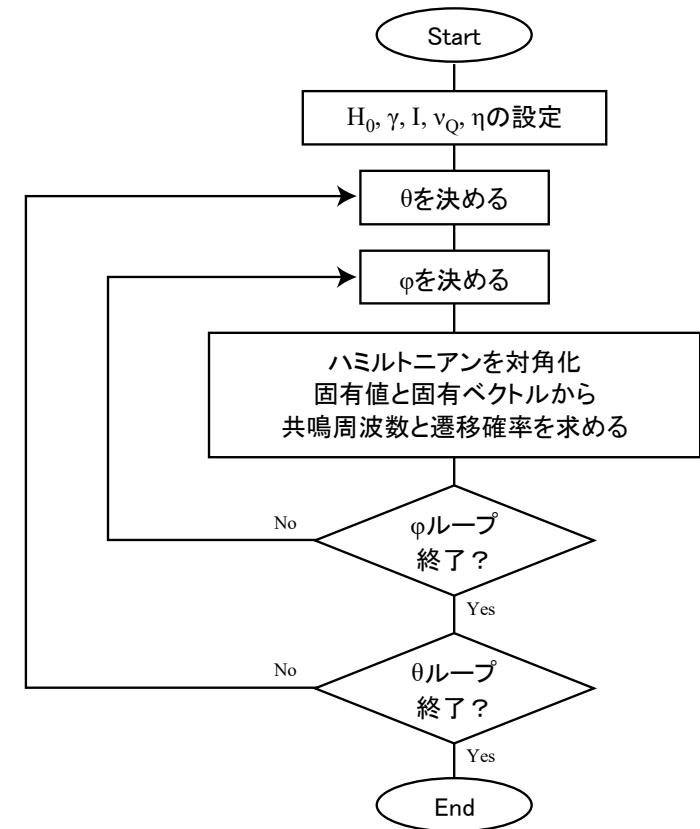
その他に、下記パッケージを使用している。

速度向上

StaticArrays.jl,
LoopVectorization.jl

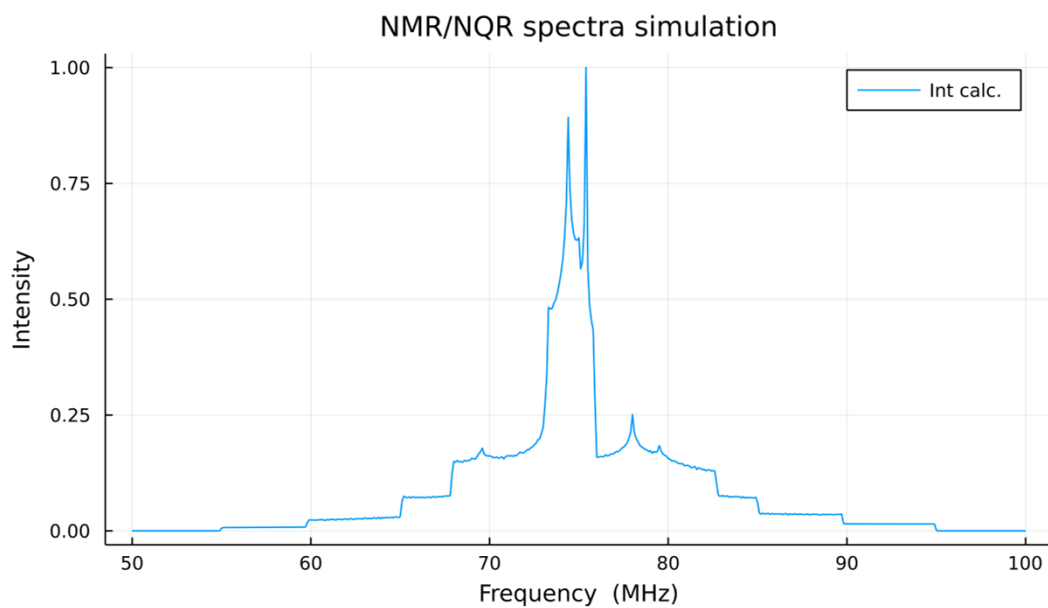
データ読み込みや保存

CSV.jl
DataFrames.jl



周波数スイープの計算フローチャート

計算例：周波数スイープ



パラメータ

$$I = 5/2, \gamma = 10 \text{ MHz/T}$$

$$H_0 = 7.5 \text{ T}$$

$$\nu_Q = 10 \text{ MHz}, \eta = 0.5$$

$$\theta = 0 \sim 90^\circ (0.1^\circ \text{ step})$$

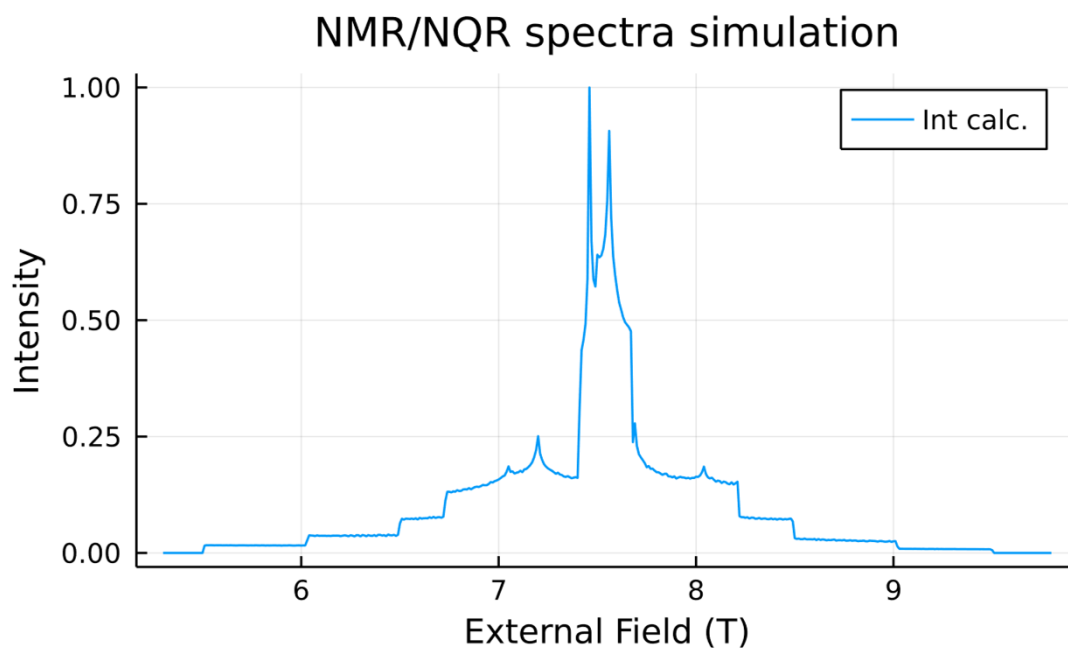
$$\phi = 0 \sim 90^\circ (1^\circ \text{ step}) \quad \text{約8.2万回のループ}$$

計算時間

Julia → **1.1 s** (1st run **47 s**)

Scilab ÷ Python → **15.7 s**

計算例：磁場スイープ



パラメータ

$$I = 5/2, \gamma = 10 \text{ MHz/T}$$

$$\nu_m = 75 \text{ MHz}$$

$$\nu_Q = 10 \text{ MHz}, \eta = 0.5$$

$$\theta = 0 \sim 90^\circ (0.1^\circ \text{ step})$$

$$\phi = 0 \sim 90^\circ (1^\circ \text{ step})$$

$$H_0 = 5.3 \sim 9.8 \text{ T} (0.01 \text{ T step})$$

各磁場で計算する必要がある
約8.2万×450回のループ

計算時間

Julia → 9 min

まとめ

- JuliaによるNMRスペクトルのシミュレーションの紹介をしました。
- 計算速度はScilabやPythonと比べかなり速い。
粉末パターンシミュレーションにおいて、これは非常に重要。
- 理論モデルを簡単に計算できるので、計算ガチ勢ではない実験系研究者にJuliaは有用。
- Juliaを使ったNMRスペクトルや磁性関連の計算例が下記ページにあります。
<https://nbviewer.jupyter.org/github/MamoruYogi/julia/tree/master/>
「Julia NMR yogi」とかでググっても出てくるとおもいます。