Application of Tensor Theory to Pulse Sequences

정 관 진

한국과학기술원 뇌과학연구센터 fMRI 연구실

Tensor 하면 최근 3D로 white matter내의 섬유질을 멋있게 그려 내는 diffusion tensor를 연상합니다. 하지만 여기서 다룰 tensor는 수학적 연산자(operator)입니다. NMR 혹은 MRI에서 스핀을 vector로 표시하고, 이 vector 스핀이 90도 rf pulse에 의해서 z축에서 x-y plane으로 rotation되는 것을 vector diagram으로 나타냅니다. 그런데 이 vector notation으로는 스핀에 일어나는 여러 현상들을 수식적으로 모델 하는데 한계가 있습니다. 그래서 도입된 모델이 product operator와 tensor operator입니다 (1, 2, 3). 한 예로 우리가 다루는 proton NMR 신호가 single quantum인데 ^{23}Na 등에는 multiple quantum 신호가 생기게 되며 이는 vector로는 나타낼 수가 없으며 tensor로 분석이 가능합니다 (4, 5).

이 tensor는 물리적 의미를 떠나서 MRI sequence design에 아주 긴요한 수식적 정보를 제공하며, 더욱이 기본 공식이나 수식 전개가 비교적 단순해서 MRI를 전공하시는 분들에게는 꼭 소개해 드리고 싶습니다. 가령 spin echo sequence에서 echo 신호의 크기와 rf flip angle과의 관계는 나와 있고 또 Bloch equation을 computer로 돌리면 바로 예측이 되는데 반하여, 90도와 180도 rf pulse의 위상이 echo 신호의 위상에 어떠한 수식으로 영향을 주는지 수식적으로 제시할 수 있는 방법은 주어져 있지 않습니다. (Ref. 6의 Ch. 18내 Table 18.5)

본 강의에서는 tensor 이론 중에서 single quantum에 적용되는 범위에서 실제 sequence design에 필요한 내용을 정리하고, spin echo와 stimulated echo를 분석하여 보이고자 합니다.

기본 수학정 정의

우선 tensor notation은 T_{lm}으로 (좀 더 자세히는 irreducible tensor라고 합니다), 여기서 subscript들 l은 rank라고 하고 m은 quantum number를 나타냅니다. Rank는 통상 1이며 특별히 ^{23}Na 등에서 rank가 2 이상의 값으로 발전하게 됩니다 (2, 5). 한편, quantum number는 우리가 일상 경험하는 proton NMR 신호의 경우에는 ±1이며, 0는 z component를 의미하게 됩니

다.

Spin에 가해지는 flip angle이 θ 이고 축 x' 축으로 부터 ϕ 인 rf pulse를 (θ,ϕ) 으로 나타내면, tensor T_{lm} 는 rf pulse에 의해서 다음과 같이 전개됩니다.

$$T_{lm} \xrightarrow{(\theta,\phi)} \sum_{m'=-l}^{l} d^{l}_{m'm}(\theta)\exp[i(m-m')\phi]\ T_{lm'}, \qquad [1]$$

m' 은 rf pulse 후의 quantum number 혹은 coherence order를 나타냅니다.

Single quantum의 경우에 국한하면, 식 [1]은 다시

$$T_{11} \xrightarrow{(\theta,\phi)} \sum_{m'=-1}^{1} d^{1}_{m'm}(\theta)\exp[i(m-m')\phi]\ T_{1m'} \qquad [2]$$

로 정리될 수 있다. 여기서 $d^{l}_{m'm}(\theta)$ 은 reduced rotation matrix element 입니다. 이는 flip angle에 의한 signal amplitude를 결정하는 factor로서 $l=1$ 인 경우에 대해서만 표 1에 정리하였습니다 (Ref. 1의 p. 88).

표 1

Elements $d^{l}_{m'm}(\theta)$ of reduced rotation matrices

$d^{1}_{1\bar{1}} = d^{1}_{\bar{1}1} = \sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{1}{2}(1-\cos\theta)$
$d^{1}_{11} = d^{1}_{\bar{1}\bar{1}} = \cos^2\frac{\theta}{2} = \frac{1}{2}(1+\cos\theta)$
$d^{1}_{01} = d^{1}_{\bar{1}0} = -d^{1}_{0\bar{1}} = -d^{1}_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta$
$d^{1}_{00} = \cos\theta$

여기서 $\bar{m} = -m$.

따라서 tensor operator의 장점은 rf pulse의 효과가 signal amplitude 뿐만 아니라 signal의 phase 까지 정리가 된다는 점입니다. 물론 더 나아가서 off-resonance나 multiple quantum 까지도 다룰 수 있지만 말입니다 (2 - 5).

Spin Echo and Stimulated Echo

이제 tensor의 유용성을 spin echo와 나아가 stimulated echo의 경우에 적용을 해 보겠습니다.

먼저 sequence를 rf pulse 위주로 나타내면

$$(\theta_1, \phi_1) \to \tau_1 \to (\theta_2, \phi_2) \to \tau_2 \to (\theta_3, \phi_3) \to \tau_3 , \qquad [3]$$

τ_n은 rf pulses의 간격을 나타냅니다. 이제 이 rf pulse sequence에 대한 tensor의 변화를 density operator로 구해 봅니다.

(가) 첫번 째 **rf** (θ_1, ϕ_1)를 가하기 직전, $t = 0^-$:

$$\rho(0^-) = T_{10} . \qquad [4]$$

의미는 m = 0, 즉 z component만이 존재하는 fully relaxation이 되어 있는 상태입니다. 이 식에서 비례 상수는 편의상 1로 놓았습니다.

(나) 첫번 째 **rf** (θ_1, ϕ_1)를 가한 직후, $t = 0^+$:

$$T_{10} \xrightarrow{(\theta_1, \phi_1)} \sum_{m'=-1}^{1} d^1_{m'0}(\theta_1) e^{-im'\phi_1} T_{1m'}$$

$$= d^1_{\bar{1}0}(\theta_1) e^{i\phi_1} T_{1\bar{1}} + d^1_{00}(\theta_1) T_{10} + d^1_{10}(\theta_1) e^{-i\phi_1} T_{11} \qquad [5]$$

따라서, 표 1을 사용하여 식 [5]를 정리하면

$$\sigma(0^+) = \cos\theta_1 \, T_{10} + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\theta_1 \left(e^{i\phi_1} T_{1\bar{1}} + e^{-i\phi_1} T_{11} \right). \qquad [6]$$

식 [6]을 이해하기 위하여 $\theta_1 = \frac{\pi}{2}$인 경우를 대입하면,

$$\sigma(0^+) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{i\phi_1} T_{1\bar{1}} + e^{-i\phi_1} T_{11} \right). \qquad [7]$$

즉, z component는 0이 되고 transverse component가 생성이 되며, 검출된 신호는 $T_{1\bar{1}}$ component만을 취하게 되는데, 개입되는 비례 상수를 편의상 무시한다면,

$$s(0^+)=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi_1}e^{i\phi_R}, \qquad [8]$$

ϕ_R 은 receiver의 phase를 나타낸다. 즉, 신호는 가해진 rf pulse의 phase에 비례하는 영향을 받게 된다.

(다) 두번 째 rf (θ_2, ϕ_2)를 가하기 직전, $t=\tau_1^-$:

만약에 field inhomogeneity등이 있는 off-resonance frequency가 Ω인 경우 tensor operator는 다음과 같이 정의된다 (7).

$$T_{lm} \xrightarrow{\Omega t} e^{-im\Omega t}\, T_{lm}. \qquad [9]$$

윗 식에서 재미있는 점은 phase shift가 quantum number m에 비례한다는 사실이다. 즉, multiple quantum 신호는 더 빠른 속도로 phase shift가 유기된다. 한편 m = 0인 경우에는 phase shift가 없다. 따라서 식 [6]의 density operator는

$$\sigma(\tau_1^-)=\cos\theta_1\, T_{10} \;+\; \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta_1\left(e^{i\phi_1}\; e^{i\Omega\tau_1}\, T_{1\bar{1}} + e^{-i\phi_1}\; e^{-i\Omega\tau_1}\, T_{11}\right). \qquad [10]$$

이후 부터는 T_{10}에 해당하는 항은 편의상 생략하기로 한다.

(라) 두번 째 rf (θ_2, ϕ_2)를 가한 직후, $t=\tau_1^+$:

먼저 각 tensor들에 대한 전개를 해보면,

$$T_{11} \xrightarrow{(\theta_2,\phi_2)} \sum_{m'=-1}^{1} d^1_{m'1}(\theta_2)\, e^{i(1-m')\phi_2}\, T_{1m'}$$
$$= d^1_{\bar{1}1}(\theta_2)\, e^{i2\phi_2}\, T_{1\bar{1}} \;+\; d^1_{01}(\theta_2)\, e^{i\phi_2} T_{10} + d^1_{11}(\theta_2)\, T_{11} \qquad [11]$$

$$T_{1\bar{1}} \xrightarrow{(\theta_2,\phi_2)} \sum_{m'=-1}^{1} d^1_{m'\bar{1}}(\theta_2)\, e^{-i(1+m')\phi_2}\, T_{1m'}$$
$$= d^1_{\bar{1}\bar{1}}(\theta_2)\, T_{1\bar{1}} \;+\; d^1_{0\bar{1}}(\theta_2)\, e^{-i\phi_2} T_{10} + d^1_{1\bar{1}}(\theta_2)\, e^{-i2\phi_2}\, T_{11} \qquad [12]$$

여기서 spin echo로 검출 될 NMR 신호의 tensor pathway를 고려하면,

$$T_{10} \xrightarrow{(\theta_1,\phi_1)} T_{11} \xrightarrow{(\theta_2,\phi_2)} T_{1\bar{1}}. \qquad [13]$$

따라서 spin echo로 이르는 density operator는 식 [10]의 T_{11}항과 식 [11]로부터,

$$SE\ \sigma(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\theta_1\, d^1_{\bar{1}1}(\theta_2)\, e^{i(-\phi_1+2\phi_2)}\, e^{i(-\Omega\tau_1+\Omega(t-\tau_1))}\, T_{1\bar{1}}. \qquad [14]$$

Off-resonance가 refocus되는 $t=2\tau_1$일 때의 spin echo를 정리하면,

$$\begin{aligned} SE\ \sigma(2\tau_1) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\theta_1 \sin^2\frac{\theta_2}{2}\ e^{i(-\phi_1+2\phi_2)}\, T_{1\bar{1}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\theta_1 \sin^2\frac{\theta_2}{2}\ e^{i\phi_1}\ e^{i2(-\phi_1+\phi_2)}\, T_{1\bar{1}}. \qquad [15] \end{aligned}$$

우리가 상식적으로 알고 있는 바와 같이 $\theta_2=\pi$일 때 가장 큰 echo를 형성한다. 재미있는 점은 phase shift인데, 90도와 180도 rf phase 차의 2배가 echo에 나타난다. 물론 inhomogeneity에 의한 phase shift가 $\tau_2=\tau_1$일 때 보상이 되어 영향을 안주게 되는 것도 확인이 된다 (7).

(마) 세번 째 rf (θ_3,ϕ_3)를 가한 직후, $t=\tau_1+\tau_2^+$:

이 때 검출될 stimulated echo(STE)에 이르는 tensor pathway를 살펴보면,

$$T_{10} \xrightarrow{(\theta_1,\phi_1)} T_{11} \xrightarrow{(\theta_2,\phi_2)} T_{10} \xrightarrow{(\theta_3,\phi_3)} T_{1\bar{1}}. \qquad [16]$$

따라서, 식 [5]의 T_{11} 항과 식 [11]의 T_{10} 항으로부터 density operator는

inhomogeneity가 보상되는 시간인 $\tau_3=\tau_1$에서 다음과 같이 구해진다.

$$\begin{aligned} STE\ \sigma(2\tau_1+\tau_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta_1 \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta_2 \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta_3\, e^{i(-\phi_1+\phi_2+\phi_3)}\, T_{1\bar{1}} \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}}\sin\theta_1\ \sin\theta_2\ \sin\theta_3\, e^{i(-\phi_1+\phi_2+\phi_3)}\, T_{1\bar{1}}. \qquad [17] \end{aligned}$$

STE의 신호 크기는 $\theta_1=\theta_2=\theta_3=\frac{\pi}{2}$일 때 최대이며, phase shift는 첫 두 rf pulse의 위상차에 비례하고 세번 째 rf pulse의 위상에 비례한다.

(바) **Spin echo와 stimulated echo와의 비교:**

식 [15]와 [17]를 표 2로 정리 하면,

표 2
Spin echo와 stimulated echo의 신호 분석

	Spin echo	Stimulated echo
Amplitude	$\sin\theta_1 \sin^2\dfrac{\theta_2}{2}$	$\dfrac{1}{2}\sin\theta_1\ \sin\theta_2\ \sin\theta_3$
Phase	$\phi_1+2(\phi_2-\phi_1)$	$-\phi_1+\phi_2+\phi_3$

표 2를 살펴보면 두 echo들의 신호 크기는 $\theta_1=\theta_2=\theta_3=\dfrac{\pi}{2}$ 일 때 같게 되며, spin echo가 최대가 되는 $\theta_1=\dfrac{\pi}{2}\ \&\ \theta_2=\pi$ 일 때와 비교하여 볼 때 stimulated echo의 최대치는 spin echo의 0.5배 이다. 그림 1에 두 echo 신호 크기를 $\theta_1=\theta_2=\theta_3=\theta$ 로 동일한 경우에 대하여 그려 보았다. 한편 phase를 살펴보면 두번 째 rf pulse의 phase인 ϕ_2를 활용하면 두 echo를 구분할 수 있음도 알 수 있다.

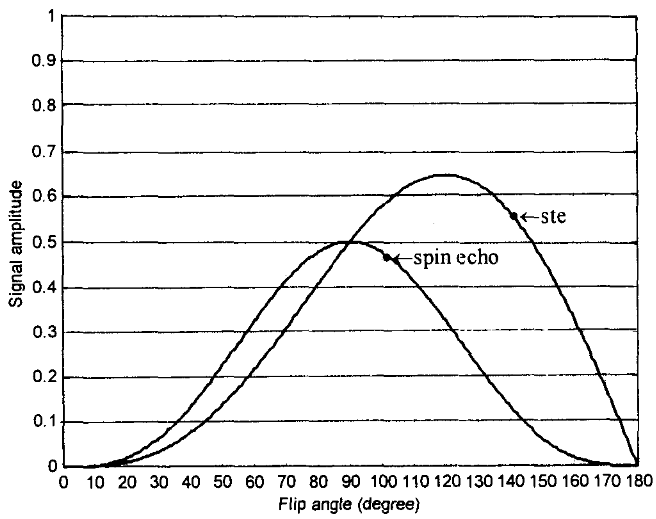

그림. 1. Spin echo와 stimulated echo의 신호 크기. 세개의 rf pulse가 같은 flip angle인 경우이다.

결 론

Tensor라는 operator를 사용하면 임의의 rf pulse sequence에 의한 NMR 신호의 크기는 물론 phase shift 까지를 수학적으로 분석할 수 있다. 더욱이 NMR 신호의 여러 coherence order의 pathway를 추적하기 용이하여 복잡한 sequence에서 일어날 수 있는 여러 echo들을 체계적으로 분석하게 해 준다. 이는 원하는 echo 신호만을 선별하는 방법, 즉 phase cycling이나 gradient pulse를 활용하는 방법들을 알아내는데 매우 유용하다. 나아가서 proton MRI 만을 다루시던 분들이 신기하게 느껴지는 multiple quantum 신호를 해석할 수 있다.

References

1. R.N. Zare, "Angular Momentum: Understanding Spatial Aspects in Chemistry and Physics," Wiley-Interscience Publication, John Wiley & Sons, 1988.
2. G. Jaccard, S. Wimperis, and G. Bodenhausen, *J. Chem. Phys.* **85**, 6282 (1986).
3. J. R. C. van der Maarel, C*hem. Phys. Lett.* **155**, 288 (1989).
4. K.J. Jung and J. Katz, "Mathematical Analysis of Generation and Elimination of Intersequence Stimulated Echo in Double-Quantum Filtering," *J. Magn. Reson.* **124**, 232 – 236 (1997).
5. K. J. Jung, J. S. Tauskela, and J. Katz, "New Double-Quantum Filtering Schemes," *J. Magn. Reson. B* **112**, 103 - 110 (1996).
6. E.M. Haacke, et al., "Magnetic Resonance Imaging, Physical Principles and Sequence Design," John Wiley & Sons, 1999.
7. K. J. Jung and J. Katz, "Chemical-Shift-Selecitve Acquisition of Multiple-Quantum-Filtered ^{23}Na Signal," *J. Magn. Reson. B* **112**, 214 - 227 (1996).