

Application of Tensor Theory to Pulse Sequences

정 관 진

서 론

Tensor 하면 최근 3D로 white matter내의 섬유질을 떠나는 diffusion tensor를 연상한다. 하지만 여기서 다루는 tensor는 수학적 연산자(operator)이다. NMR 혹은 MRI에서 스판을 vector로 표시하고, 이 vector 스판이 90도 rf pulse에 의해서 z축에서 x-y plane으로 rotation되는 것을 vector diagram으로 나타낸다. 그런데 이 vector notation으로는 스판에 일어나는 여러 현상들을 수식적으로 모델 하는데 한계가 있다. 그래서 도입된 모델이 product operator와 tensor operator이다 (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 가능하다 (4, 5).

이 tensor는 물리적 의미를 떠나서 MRI sequence design에 아주 긴요한 수식적 정보를 제공하며, 더욱이 기본 공식이나 수식 전개가 비교적 단순하다. 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 않다 (Ref. 6의 Ch. 18내 Table 18.5).

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

기본 수학적 정의

우선 tensor notation은 T_{lm} 으로(irreducible tensor라고 한다). 여기서 subscript를 l 은 rank라고 하고 m 은 quantum number를 나타낸다. Rank는 통상 1이며 특별히

^{23}Na 등에서 rank가 2 이상의 값으로 발전하게 된다 (2, 5). 한편, quantum number는 우리가 일상 경험하는 proton NMR 신호의 경우에는 ± 1 이며, 0은 z component를 의미한다.

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

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

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

Single quantum의 경우에 국한하면, 식 [1]은 다시

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

로 정리된다. 여기서 $d_{mm'}^l(\theta)$ 은 reduced rotation matrix element이다. 이는 flip angle에 의한 signal amplitude를 결정하는 factor로서 $l=1$ 인 경우에 대해서만 표 1에 정리한다 (Ref. 1의 p. 88).

따라서 tensor operator의 장점은 rf pulse의 효과가 signal

표 1. Elements $d_{mm'}^l(\theta)$ of reduced rotation matrices

$$d_{11}^1 = d_{11}^1 = \sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2} (1 - \cos \theta)$$

$$d_{11}^1 = d_{11}^1 = \cos^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2} (1 + \cos \theta)$$

$$d_{01}^1 = d_{10}^1 = -d_{01}^1 = -d_{10}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta$$

$$d_{00}^1 = \cos \theta$$

여기서 $m = -m$

정관진

amplitude 뿐만 아니라 signal의 phase 까지 정리가 된다는 점이다. 물론 더 나아가서 off-resonance나 multiple quantum 까지도 다룰 수 있다 (2-5).

Spin Echo and Stimulated Echo

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

먼저 sequence를 rf pulse 위주로 나타내면

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

τ_n 은 rf pulses의 시간 간격을 나타낸다. 이제 이 rf pulse sequence에 대한 tensor의 변화를 density operator로 구해 본다. 각 rf pulse에 의한 tensor의 발전 관계는 그림 1의 state diagram을 참조하면 된다.

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

$$\sigma(0^-) = T_{10} \quad [4]$$

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

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

$$\begin{aligned} T_{10} &\xrightarrow{(\theta_1, \phi_1)} \sum_{m'=-1}^1 d_{m'0}^1(\theta_1) e^{-im'\phi_1} T_{1m'} \\ &= d_{10}^1(\theta_1) e^{i\phi_1} T_{11} + d_{00}^1(\theta_1) T_{10} + d_{-10}^1(\theta_1) e^{-i\phi_1} T_{11} \end{aligned} \quad [5]$$

따라서, 표 1을 사용하여 식 [5]를 정리하면

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

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

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

즉, z component는 0이 되고 transverse component가 생성이 되며, 검출된 신호는 T_{11} component만을 취하게 되는데, 개입되는 비례 상수를 편의상 무시한다면,

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

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 inhomogeneity 등이 있는 off-resonance frequency가 Ω 인 경우 tensor operator는 다음과 같이 정의된다 (7).

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

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

$$\sigma(\tau_1^-) = \cos \theta_1 T_{10} + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta_1 (e^{i\phi_1} e^{i\Omega\tau_1} T_{11} + e^{-i\phi_1} e^{-i\Omega\tau_1} T_{11}) \quad [10]$$

이후 부터는 T_{10} 에 해당하는 항은 편의상 생략하기로 한다.

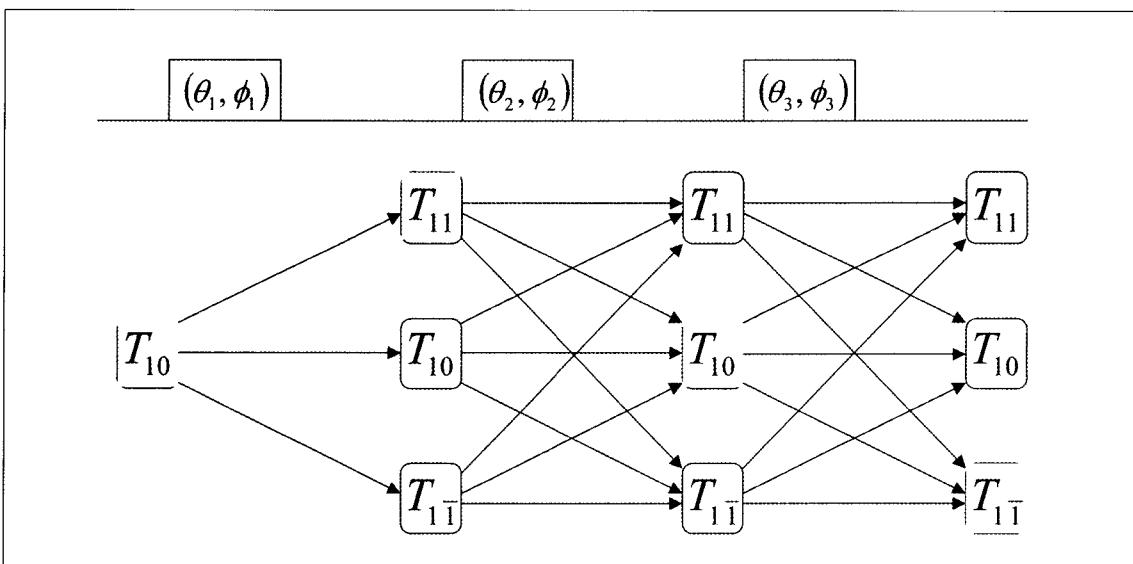


그림 1. Tensor state diagram for the sequence of 3 rf pulses.

Application of Tensor Theory to Pulse Sequences

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

먼저 각 tensor들에 대한 전개를 해보면,

$$T_{11} \xrightarrow{(\theta_2, \phi_2)} \sum_{m'=-1}^1 d_{m'1}^1(\theta_2) e^{i(1-m')\phi_2} T_{1m'} \\ = d_{11}^1(\theta_2) e^{i2\phi_2} T_{11} + d_{01}^1(\theta_2) e^{i\phi_2} T_{10} + d_{11}^1(\theta_2) T_{11} \quad [11]$$

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

여기서 spin echo로 검출 될 NMR 신호의 tensor pathway를 고려하면,

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

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

$$SE \sigma(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta_1 d_{11}^1(\theta_2) e^{i(-\phi_1+2\phi_2)} e^{i(-\alpha_1+2(\tau_1))} T_{11} \quad [14]$$

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

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

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,

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

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.

$$STE \sigma(2\tau_1 + \tau_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta_1 \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta_2 \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta_3 e^{i(-\phi_1+\phi_2+\phi_3)} T_{11} - \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} \sin \theta_1 \sin \theta_2 \sin \theta_3 e^{i(-\phi_1+\phi_2+\phi_3)} T_{1\bar{1}} \quad [17]$$

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 정리한 표 2를 살펴보면,

두 echo들의 신호 크기는 $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = \frac{\pi}{2}$ 일 때 같게 되며, spin echo가 최대가 되는 $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = \frac{\pi}{2}$ & $\phi_2 = \pi$ 일 때와 비교하여 볼 때 stimulated echo의 최대치는 spin echo의 0.5배이다. 그럼 2에 두 echo 신호 크기를 $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = \theta$ 로 동일한 경우에 대하여 그려 보았다. 한편 phase를 살펴보면 두 번 째 rf pulse의 phase인 ϕ_2 를 활용하면 두 echo를 구분할 수 있음도 알 수 있다.

여기서 분석된 결과는 RF flip angle을 맞추는데 응용될 수 있다. 식 [3]에 주어진 sequence로 spin echo와 stimulated echo를 얻은 후에 두 신호의 크기를 표 2를 사용하여 비교하면 flip angle을 정확히 계산할 수 있다. 즉,

$$\frac{\text{Stimulated echo}}{\text{Spin echo}} = 2 \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \quad [18]$$

이를 그래프로 그려보면 90도 근처에서 linear한 변화를 보임을 알 수 있다. 따라서 최소한 2 값의 flip angle에서 data를 받으면 flip angle이 90도인 점을 정확히 계산 할 수 있다.

표 2. Spin echo와 stimulated echo의 신호 분석

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

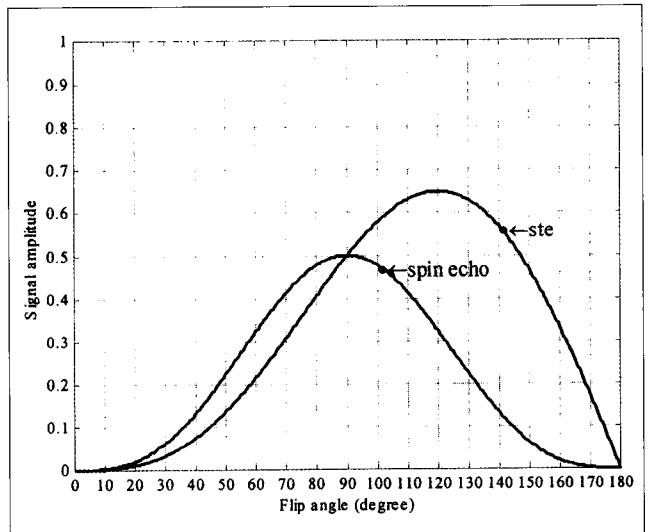


그림 2. Spin echo와 stimulated echo의 신호 크기. 세 개의 rf pulse가 같은 flip angle인 경우이다.

정관진

Data를 얻을 때 표 2에 주어진 phase cycling을 사용하면 원하지 않는 신호들을 제거하는데 활용할 수 있다.

결 론

Tensor라는 operator를 사용하면 임의의 rf pulse sequence에 의한 NMR 신호의 크기는 물론 phase shift 까지 를 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.

참 고 문 헌

1. Zare RN. Angular momentum: understanding spatial aspects in chemistry and physics. Wiley-interscience publication, John Wiley & Sons, 1988
2. Jaccard G., Wimperis S. and Bodenhausen G. J Chem Phys 1986;85:6282
3. van der Maarel J.R.C. Chem. Phys Lett 1989;155:288
4. Jung KJ. and Katz J. Mathematical analysis of generation and elimination of intersequence stimulated echo in double-quantum filtering. J Magn Reson 1997;124:232-236
5. Jung KJ. Tauskela JS. and Katz J. New double-quantum filtering schemes. J Magn Reson B 1996;112:103-110
6. Haacke EM. et al. Magnetic resonance imaging physical principles and sequence design. John Wiley & Sons, 1999
7. Jung KJ. and Katz J. Chemical-shift-selective acquisition of multiple-quantum-filtered ^{23}Na signal. J Magn Reson B 1996; 112:214-227