A mágneses rezonancia módszer elvi alapja

Legyen most a mágneses mező olyan, hogy az állandó z irányú $\mathbf{B}_0$ mellett, a rá merőleges síkban egy $\mathbf{B}_1$ nagyságú mágneses mező is jelen van, amely ω szögsebességgel forog az $x-y$ síkban. A Schrödinger egyenlet most is érvényes:

$$i\hbar\frac{d|\Psi\rangle}{dt} = H|\Psi\rangle,$$

ahol most $H = \mathfrak{m}\mathbf{B}\boldsymbol{\sigma} = \mathfrak{m}(B_x\sigma_x + B_y\sigma_y + B_z\sigma_z)$.

$$i\hbar\frac{dc_+}{dt} = \varepsilon_+ c_+ + \mathfrak{m}B_1 e^{-i\omega t}c_-$$

$$i\hbar\frac{dc_-}{dt} = \varepsilon_{-0} c_- + \mathfrak{m}B_1 e^{+i\omega t}c_+$$

Ha a jobb oldalon a második tagok nem lennének akkor a két egyenlet független lenne, és a megoldások a korábbi $c_\pm(0)e^{-i\varepsilon_\pm t/\hbar}$ alakúak lennének. Ezért második tagok által egymáshoz csatolt egyenletek megoldását a $c_+ = b_+(t)e^{-i\varepsilon_+ t/\hbar}$ $c_- = b_-(t)e^{i\varepsilon_+ t/\hbar}$ alakban:

$$i\hbar\frac{db_+}{dt} = \mathfrak{m}B_1 e^{-i(\omega-\omega_1)t}b_-$$

$$i\hbar\frac{db_-}{dt} = \mathfrak{m}B_1 e^{+i(\omega-\omega_1)t}b_+$$

Vezessük be az

$$\omega_0 - \omega = \Delta$$

jelölést, amely tehát a $|+\rangle$ és $|-\rangle$ spinsajátállapotok közötti ω_0 Bohr frekvencia és a B_1 mező ω körfrekvenciájának különbsége, továbbá az

$$\frac{\mathfrak{m}B_1}{\hbar} = \frac{\Omega_0}{2}$$

jelölést, ahol Ω_0 szintén frekvencia dimenziójú és a B_1 mező erősségével arányos.

$$i\dot{b}_+ = \frac{\Omega_0}{2}e^{i\Delta t}b_-$$

$$i\dot{b}_- = \frac{\Omega_0}{2}e^{-i\Delta t}b_+ \qquad \#$$

Ez a differenciálegyenletrendszer egyszerűen megoldható. Deriváljuk pl. az első egyenletet még egyszer, és a föllépő $\dot{b}_-$-t ill $\dot{b}_+$-t fejezzük ki a második és az első egyenletből:

$$i\ddot{b}_+ = i\Delta\frac{\Omega_0}{2}e^{i\Delta t}b_- + \frac{\Omega_0}{2}e^{i\Delta t}\dot{b}_- = i\Delta\frac{\Omega_0}{2}e^{i\Delta t}\frac{i\dot{b}_+}{\frac{\Omega_0}{2}e^{i\Delta t}} + \frac{\Omega_0}{2}e^{i\Delta t}\left(-i\frac{\Omega_0}{2}e^{-i\Delta t}b_+\right) =$$

$$= -\dot{b}_+ - i\frac{\Omega_0^2}{4}b_+ \qquad \#$$

Ebből rendezéssel

$$\ddot{b}_+ - i\Delta\dot{b}_+ + \frac{\Omega_0^2}{4}b_+ = 0 \qquad \#$$

A megoldást a szokásos $e^{\lambda t}$ alakban keresve, a karakterisztikus egyenlet

$$\lambda^2 - i\Delta\lambda + \frac{\Omega_0^2}{4} = 0, \qquad \#$$

amelyből a gyökök,

$$\lambda_{12} = \frac{i\Delta}{2} \pm i\sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + \frac{\Omega_0^2}{4}} =: \frac{i\Delta}{2} \pm i\frac{\Omega}{2} \qquad \#$$

ahol

$$\Omega = \sqrt{\Delta^2 + \Omega_0^2}$$

Az általános megoldás így

$$b_+ = c_1 e^{\lambda_1 t} + c_2 e^{\lambda_2 t} \qquad \#$$

$$b_- = \frac{2i}{\Omega_0}\dot{b}_+ e^{-i\Delta t} = \frac{2i}{\Omega_0}(c_1\lambda_1 e^{\lambda_1 t} + c_2\lambda_2 e^{\lambda_2 t})e^{-i\Delta t} \qquad \#$$

a_1 és a_2 t a kezdeti föltételek szabják meg. Pl. ha $t = 0$ esetén a spin az alsó $|-\rangle$ állapotban volt, akkor

$$0 = b_+(0) = c_1 + c_2 \qquad \#$$

$$1 = b_-(0) = \frac{2i}{\Omega_0}(c_1\lambda_1 + c_2\lambda_2) = \frac{2i}{\Omega_0}(\lambda_1 - \lambda_2)c_1 = \frac{2i}{\Omega_0} i\Omega c_1 \qquad \#$$

alapján $c_1 = -\frac{\Omega_0}{2\Omega}$, $c_2 = -\frac{\Omega_0}{2\Omega}$, amiből

$$b_+(t) = \frac{\Omega_0}{2\Omega} e^{\frac{i\Delta}{2}t}(e^{i\Omega t} - e^{-i\Omega t}) = -i\frac{\Omega_0}{\Omega}(\sin\frac{\Omega}{2}t)e^{\frac{i\Delta}{2}t} \qquad \#$$

Annak valószínűsége, hogy a spin a fölső állapotba kerül:

$$|b_+|^2 = \left(\frac{\Omega_0}{\Omega}\right)^2 \sin^2\frac{\Omega}{2}t = \left(\frac{\Omega_0}{\Omega}\right)^2(1 - \cos\Omega t) \qquad \#$$

azaz Ω körfrekvenciával oszcillál, ezt nevezzük Rabi oszcillációnak . I. I. Rabi, aki ezt az elméletet kidolgozta, majd atommagok mágneses momentumának meghatározására használta, 1944-ben kapott Nobel díjat. Az alábbiakban vázoljuk az ezen az eredményen alapuló kísérleti módszert, majd néhány további nagyjelentőségű eredményt, amely szintén ehhez az elmélethez kapcsolódik

A ref: b+ eredmény szerint a fölső nívóra való tényleges átmenet csak akkor következik be ténylegesen ha $\Omega = \Omega_0$, mert ekkor $|b_+|^2 = 1$ lesz $t_+ = \frac{\pi}{2\Omega}$ idő múlva, és a spin ilyenkor a $|+\rangle$ és $|-\rangle$ állapotok között oszcillál Ω_0 körfrekvenciával, amelyet Rabi frekvenciának nevezünk. A paraméterek változtatásával az $\Omega = \Omega_0$ eset élesen, rezonanciaszerűen következik be. Ennek elérése érdekében ω-t azaz a forgó mágneses mező szögsebességét változtatják, s az $\omega_0 - \omega = \Delta = 0$ ponthoz érve valóban $\Omega = \Omega_0$ lesz, azaz alkalmas időpillanatokban $|b_+|^2$ eléri az 1-et. Egy másik módszer az, hogy rögzitett ω esetén a B_0 mágneses mezőt és ezáltal az $\omega_0 = \frac{\varepsilon_+ - \varepsilon_-}{\hbar} = \frac{2\mathfrak{m}}{\hbar}B_0$ Bohr frekvenciát változtatják amíg el nem érik a $\Delta = 0$ pontot. Rabi módszerét atomnyaláb (vagy molekulanyaláb) módszernek nevezik mert a meghatározandó nágneses momentumú mag valamilyen atom vagy molekula alkotórésze, amelyek nyalábként haladnak át a forgó mágneses mezőt tartalmazó tartományon. A rezonancia esetén az $\frac{\mathfrak{m}B_1}{\hbar} = \frac{\Omega_0}{2}$ összefüggésből az $\mathfrak{m}$ értéke meghatározható. Megjegyezzük még, hogy forgó mágneses mező helyett elegendő a $\mathbf{B}_0$-ra merőleges síkban *egyenes mentén* ω körfrekvenciával és B_1 amplitúdóval *rezgő* mágneses mezőt is alkalmazni, ekkor az előbbi elméleti levezetést finomítani kell. (A kísérleti részleteket illetően lsd. Atomfizika.) A fönti egyenletek jelentik az elméleti hátterét az NMR (Nuclear Magnetic Resonance) rövidítéssel jelzett mag- mágneses rezonancia módszernek is, amely egy igen pontos anyagvizsgálati spektroszkópiai eljárás (F. Bloch és E. M. Purcell Nobel díj 1952).

A módszer átvihető arra az esetre is, ha a H_0-nak megfelelő két sajátállapotot energiája nem egy erős mágneses mező miatt különbözik egymástól mint egy atommagban, hanem a kérdéses részecske, pl. egy atom, már eleve, belső szerkezeténél fogva különböző energiájú állpotokkal rendelkezik. Ha az atom (tehát nem atommag) esetén két, külső mező nélküli, stacionárius állapotát jelenti a $|+\rangle$ és a $|-\rangle$ szimbólum, és ezek között között indukál átmenetet egy mikrohullámú üregben jelen lévő oszcilláló elektromos mező, a végbemenő folyamat lényegében ugyanaz mint amit a fönti matematikai megoldás megad, csak itt az oszcilláló elektromos mezőhöz az atom nem a mágneses, hanem elektromos dipólusmomentuma révén csatolódik. Ezen kívül, ha kezdetben az atom állapota éppen a nagyobb energiájú $|+\rangle$ állapot, akkor a rezgés során a kezdetben az atomi gerjesztésben jelenlévő $\varepsilon_+ - \varepsilon_-$ energiatöbblet átkerül az üreg rezgésének energiájába, amely azután további átmenetet indukálhat újabb atomi objektumokon, s így egyre több energia jut a rezgő mezőbe. Az első ilyen atomi rendszer amellyel ezt megvalósították az ammóniamolekula volt, ez volt az ammóniamézer (mikrohullámú lézert). Ennek az elvnek e a fölismeréséért, illetve ezt követően a látható tartományban alkalmazott koherens elektromágneses rezgést keltő hasonló elven működő lézer gondolatának kidolgozásáért kapott Nobel díjat C. Townes, N. Bászov és A. Prohorov 1964-ben.

A Rabi módszert fejlesztette tovább tanítványa N. Ramsey. Módszerében az atomok bizonyos τ ideig áthaladtak a forgó mágneses mezőn és ezáltal a $b_+(\tau)e^{-i\varepsilon_+\tau/\hbar}|+\rangle + b_-(\tau)e^{-i\varepsilon_-\tau/\hbar}|-\rangle$ állapotba kerülnek, majd azt elhagyva állapotuk csak az $e^{-i\varepsilon_+ t/\hbar}$ illetve $e^{-i\varepsilon_+\tau/\hbar}$ faktoroknak révén változik. Ezután egy második mágneses mező ismét befolyásolja a b_+ és b_- függvényeket is, s ezáltal az $\varepsilon_+ - \varepsilon_-$ különbség még pontosabban meghatározható. Az atomok tehát két egymástól térben elválasztott Rabi típusú rezgésének vizsgálatával a rezonanciafrekvencia egészen különleges pontossággal határozható meg. A mai időstandardot, a másodperc definícióját adó atomóra, a cézium atom két úgynevezett hiperfinom nívója között végbemenő Rabi típusú oszcilláció frekvenciája rögziti, amelyet a Ramsey féle szeparált mezők módszerével lehet pontosan meghatározni. Módszeréért N. Ramsey 1989-ben kapott Nobel díjat.