

Table des matières

1	Objectifs pédagogiques de la LP	1
2	Objectifs et messages forts de la LP (disciplinaire)	1
3	Introduction générale de la leçon	2
4	Proposition de plan	2
4.1	Principe de la résonance magnétique nucléaire	2
4.2	Applications	4
5	Ouvertures possibles, prolongements et conclusion de la leçon	5
6	Subtilités de la leçon et points disciplinaires essentiels	5
7	Exercices de base et applications intéressantes pour la leçon	6
8	Bibliographie pour construire la leçon	6
9	Expériences illustratives, simulations numériques et exploitation pédagogique	6
10	Critique des choix pédagogiques de la leçon	6

1 Objectifs pédagogiques de la LP

- ▷ Présenter les phénomènes à l'origine de la résonance magnétique nucléaire, basé sur la notion de spin qui est purement quantique, et qui en fait un des rares phénomènes quantique dont on peut voir un effet macroscopique.
- ▷ Illustrer l'effet Zeeman et et une utilisation autre que la spectroscopie.
- ▷ Illustrer l'interaction entre un spin et un champ oscillant harmonique.
- ▷ Présenter une façon de traiter des systèmes purement quantique de façon macroscopique, et donc une façon de passer du microscopique au macroscopique.
- ▷ Définir le déplacement chimique et sa dépendance à l'environnement et expliquer le fonctionnement de la spectroscopie RMN.
- ▷ Expliquer comment l'encodage de la position se fait par l'amplitude du champ magnétique (gradient de champ) et comment il est possible de revenir à la position à 3D des protons ayant participé au signal.

2 Objectifs et messages forts de la LP (disciplinaire)

- ▷ Effet Zeeman sur un système de spin 1/2.
- ▷ Utilisation de la distribution de Boltzmann pour des spins.
- ▷ Précession d'un dipôle magnétique et de l'aimantation associée autour d'un champ constant.
- ▷ Prise en compte de l'environnement par la relaxation.
- ▷ Pulses π et $\pi/2$ et séquence d'écho de spin.
- ▷ Déplacement chimique et lien avec l'environnement d'un proton.
- ▷ Gradient de champ magnétique et codage des positions par la valeur du champ.
- ▷ Récupération d'images 3D à partir des signaux de RMN en IRM.

3 Introduction générale de la leçon

Niveau : Licence 3

Pré-requis :

- ▷ Moment cinétique en mécanique quantique
- ▷ Magnétisme et moments magnétique
- ▷ Spins et interactions avec un champ magnétique
- ▷ Mécanique du point
- ▷ Statistique de Boltzmann
- ▷ Transformée de Fourier

Vous avez peut-être déjà passé une IRM, une imagerie par résonance magnétique et vous vous êtes demandé "C'est quoi cette grosse machine dans laquelle ils m'envoient?", "Comment est-ce qu'elle fonctionne?" et "Comment les médecins arrivent à récupérer une image 3D de l'intérieur de mon corps?".

Dans ce cours, on va expliquer les principes à l'origine du phénomène de résonance magnétique nucléaire (RMN), et comment ils sont utilisés pour réaliser une image 3D du corps humain. Nous verrons aussi comment ce phénomène permet de déterminer la structure de molécules complexes.

4 Proposition de plan

4.1 Principe de la résonance magnétique nucléaire

Dans cette partie nous allons décrire les phénomènes à l'origine de la résonance magnétique nucléaire. Nous ne considérerons, dans la suite, que le cas du noyau d'hydrogène, qui possède un spin 1/2.

► Passage du microscopique au macroscopique

Tout d'abord nous allons voir comment les phénomènes quantiques peuvent être visibles à l'échelle macroscopique.

On considère un spin 1/2 dans un champ magnétique uniforme et constant \vec{B}_0 . Ce spin est associé à un moment magnétique $\vec{\mu}$. On va ainsi observer une levée de dégénérescence des niveaux d'énergie du noyau par effet Zeeman. L'écart entre les deux niveaux est $\hbar\omega_0 = \hbar\gamma B_0$ où γ est le facteur gyromagnétique du proton et ω_0 est appelée **pulsation de Larmor**.

Lorsque l'on considère un volume V composé de N spins, ces spins vont se répartir selon la distribution de Boltzmann :

$$\begin{cases} N_+ \propto \exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{2k_B T}\right) \\ N_- \propto \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{2k_B T}\right) \end{cases}$$

Ce qui donne, lorsque l'on regarde le rapport entre les deux, on obtient $\frac{N_+}{N_-} = \exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}\right) \simeq 1,00005$ pour $\frac{\omega_0}{2\pi} = 300\text{MHz}$ et $T = 300\text{K}$.

Pour avoir un outil que l'on peut mesurer, on va définir l'aimantation $\vec{M} = \frac{d\vec{\mu}}{dV}$ qui sera non nulle pour $\vec{B}_0 \neq 0$. L'aimantation va pouvoir varier dans le temps, et cette variation pourra être mesurée par induction dans des bobines.

► Précession et relaxation

On va s'intéresser maintenant à la dynamique de \vec{M} dans le champ uniforme et constant \vec{B}_0 .

En appliquant le théorème du moment cinétique sur les noyaux du volume que l'on considère, on obtient.

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{M} \wedge \vec{B}_0$$

Le rapport gyromagnétique permet d'écrire que $\vec{M} = \gamma\vec{L}$, ce qui donne $\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma\vec{M} \wedge \vec{B}_0 = -\gamma B_0 \vec{e}_z \wedge \vec{M}$. On reconnaît l'expression de la pulsation de Larmor $\omega_0 = -\gamma B_0$. On peut donc réécrire cette équation sous la forme

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \omega_0 \vec{e}_z \wedge \vec{M} \quad \text{Précession autour de } e_z \text{ à } \omega_0.$$

Il faut par ailleurs garder à l'esprit que notre système n'est, en pratique, pas isolé et peut interagir avec d'autres spins. Cette interaction avec l'environnement va avoir pour effet d'ajouter une relaxation de l'aimantation vers sa position d'énergie minimale, lorsque l'aimantation $\vec{M}_0 = M_0 \vec{e}_z$. On modélise cette relaxation par l'ajout de deux temps caractéristiques : T_1 le temps de relaxation longitudinal qui rend compte de la relaxation selon l'axe O_z et T_2 le temps de relaxation transverse qui rend compte de la relaxation dans le plan O_{xy} . Ces deux temps peuvent varier, en fonction de l'environnement, entre 100ms et quelques secondes. Les équations sont modifiées de la sorte :

$$\begin{cases} \frac{dM_x}{dt} = -\omega_0 M_y - \frac{M_x}{T_2} \\ \frac{dM_y}{dt} = \omega_0 M_x - \frac{M_y}{T_2} \\ \frac{dM_z}{dt} = -\frac{M_0 - M_z}{T_1} \end{cases} \quad \text{Équations de Bloch}$$

Lorsque t tend vers l'infini, on remarque qu'on a bien $\vec{M}(t) \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} \vec{M}_0 = M_0 \vec{e}_z$.

► Impulsion radiofréquence

On a vu que lorsque l'on laissait notre système évoluer librement, son aimantation s'oriente selon sa position d'équilibre $\vec{M}_0 = M_0 \vec{e}_z$. Il faut donc trouver un moyen de modifier \vec{M} pour le déplacer de sa position d'équilibre et pouvoir observer un signal.

On ajoute au champ \vec{B}_0 constant un champ magnétique $\vec{B}_1(t) = B_1 \cos(\omega_0 t) \vec{e}_x$ oscillant à la pulsation de Larmor. Ce champ peut se décomposer comme deux champs tournants, $\vec{B}_{1+}(t)$ tournant à $+\omega_0$ et un champ $\vec{B}_{1-}(t)$ tournant à $-\omega_0$. Seul le champ $\vec{B}_{1+}(t)$ sera en phase avec la précession et on pourra par la suite négliger le champ $\vec{B}_{1-}(t)$.

On se place, par changement de référentiel, dans le référentiel tournant à ω_0 autour de \vec{e}_z . L'équation donnant l'évolution de \vec{M} devient dans ce référentiel :

$$\left. \frac{d\vec{M}}{dt} \right|_{(\mathbb{R}_t)} = \omega_0 \vec{e}_z \wedge \vec{M} + \gamma \vec{B}_1 \wedge \vec{M} \Big|_{(\mathbb{R}_t)} = \left. \frac{d\vec{M}}{dt} \right|_{(\mathbb{R}_t)} + \omega_0 \vec{e}_z \wedge \vec{M}$$

D'où $\left. \frac{d\vec{M}}{dt} \right|_{(\mathbb{R}_t)} = -\gamma \frac{B_1}{2} \vec{e}_{x'} \wedge \vec{M}$. On retrouve une équation de précession, cette fois autour de $\vec{e}_{x'}$ à la pulsation $\omega_1 = -\gamma \frac{B_1}{2}$ dans le référentiel tournant. En passant dans le référentiel tournant, on remarque que le champ constant n'a plus d'influence sur la dynamique de \vec{M} (c'est lui qui faisait tourner \vec{M}). En pratique on a $\frac{\omega_1}{2\pi} \sim 500\text{kHz}$.

On peut ainsi définir deux temps particuliers : le temps de pulse π qui vaut $t_\pi = \frac{\pi}{\gamma B_1}$ qui correspond à une rotation de 180° autour de $\vec{e}_{x'}$, et le temps de pulse π qui vaut $t_\pi = \frac{\pi}{2\gamma B_1}$ qui correspond à une rotation de 90° autour de $\vec{e}_{x'}$.

Pour des valeurs de $B_1 \sim 1\text{T}$, ces deux temps sont de l'ordre de quelques ms, et donc sont très faibles devant les valeurs possibles de T_1 et T_2 . On pourra donc négliger la relaxation sur la durée de ces pulses.

► Écho de spin

Il est en général très difficile d'obtenir un champ magnétique parfaitement uniforme sur la dimension de l'échantillon sur lequel on utilise la résonance magnétique nucléaire. Les différents spins vont alors voir différentes valeurs du champ \vec{B}_0 et vont avoir différentes pulsation de Larmor et donc différentes vitesses de précession. (Animation sur les spins) Cette différence dans les pulsation de précession va entraîner un brouillage, et qui va augmenter le temps de relaxation transverse.

Pour résoudre ce problème, on peut utiliser une séquence simple qui est constituée uniquement des deux impulsions qu'on vient de définir, et qui est très pratique.

Après une impulsion $\pi/2$, qui place les spins dans le plan (O_{xy}) , on les laisse précesser pendant une durée τ ce qui a pour effet de déphaser les spins. On applique ensuite une impulsion π . Cette impulsion

aura pour effet de retourner les spins. Après un nouveau temps τ , on observe un signal identique à celui après le pulse $\pi/2$.

Pour comprendre l'effet de cette séquence, on peut utiliser une analogie avec des coureurs : le pulse $\pi/2$ correspond au top départ de la course. Les coureurs courent à des vitesses constantes mais différentes, ainsi certains coureurs seront en avance par rapport aux autres, et d'autres en retard. Le pulse π correspond aux coureurs se retournant et courant maintenant vers la ligne de départ, tout en conservant leur vitesse (en norme). Ainsi les coureurs en avance sont maintenant en retard et ceux étant en retard sont maintenant en avance, et tout le monde arrive sur la ligne de départ exactement au même instant.

La séquence d'écho de spin permet donc de s'affranchir des faibles inhomogénéités du champ magnétique.

Transition didactique : Comme on a pu le voir, la RMN est issue de phénomènes quantiques, mais peut fournir un signal macroscopique qui nous renseigne sur l'environnement des spins considérés.

La RMN a plusieurs applications dont on va détailler les plus courantes dans ce qui suit.

4.2 Applications

► Spectroscopie RMN

La RMN peut être appliquée à tout noyau possédant un spin non nul. En chimie, on applique la RMN au noyau d'hydrogène, qui est le noyau le plus prépondérant dans les molécules.

L'atome d'hydrogène possède un électron qui orbite autour du noyau. Cet électron va, en présence du champ statique \vec{B}_0 , créer un champ opposé $\vec{B}_{\text{écran}} = -\sigma \vec{B}_0$ qui va écranter le champ \vec{B}_0 . Le noyau d'hydrogène va ainsi voir un champ effectif $\vec{B}_{\text{eff}} = (1 - \sigma) \vec{B}_0$ plus faible, et le noyau d'hydrogène va ainsi résonner à la pulsation de Larmor effective $\omega_{\text{eff}} = (1 - \sigma)\omega_0$.

On définit alors le déplacement chimique $\delta = \frac{\omega_{\text{eff}} - \omega_{\text{ref}}}{\omega_{\text{ref}}} \times 10^6$ (ppm), qui permet d'avoir une grandeur indépendante de l'amplitude du champ \vec{B}_0 et qui varie entre 1 et 12 environ pour le noyau d'hydrogène.

L'environnement de l'atome d'hydrogène va avoir une forte influence sur la pulsation de Larmor effective et donc sur le déplacement chimique.

Si l'atome d'hydrogène est proche d'un groupe électronégatif, le groupement va attirer l'électron de l'atome d'hydrogène, ce qui va réduire l'écranage. La pulsation effective va donc augmenter, tout comme le déplacement chimique.

Si l'atome d'hydrogène est proche d'un groupement électropositif, le groupement va repousser les électrons de l'atome d'hydrogène, ce qui va augmenter l'écranage. La pulsation effective va donc diminuer, tout comme le déplacement chimique.

La transformée de Fourier du signal de FID permet de faire apparaître les différentes fréquences de résonance de l'espèce étudiée, et donc les différents déplacements chimiques associés. Les propriétés de la transformée de Fourier nous donnent aussi que l'aire sous un pic est proportionnel au nombre d'atome d'hydrogène ayant participé au signal.

La connaissance des déplacements chimiques usuels pour différents environnements, c'est-à-dire différents groupements proches des atomes d'hydrogène permet de retrouver la structure de la molécule dont on fait le spectre RMN.

► Imagerie par résonance magnétique (IRM)

L'IRM utilise la RMN pour obtenir une image en 3 dimensions de l'intérieur du corps. On doit répondre à deux questions : Comment récupérer l'information des positions des noyaux participant au signal de RMN, et comment différencier les tissus (par exemple un tissu sain d'un tissu cancéreux).

Pour récupérer l'information des positions, on code l'information de la position dans les pulsations ω_0 par des gradients de champs magnétiques selon les 3 directions d'observation.

Pour obtenir la nature des tissus, il faut mesurer les temps de relaxation transverse et/ou longitudinal. Ces deux temps de relaxation dépendent fortement des interactions entre spins et donc de la nature du tissu.

5 Ouvertures possibles, prolongements et conclusion de la leçon

On a pu voir dans cette leçon comment des phénomènes microscopiques et quantiques peuvent donner lieu à des phénomènes macroscopiques et mesurables. Bien sûr, cela nécessite des moyens énormes : des algorithmes de traitements de données et de calculs complexes sont développés, des aimants supraconducteurs sont nécessaires, et ici nous n'avons fait que survoler les principes de la spectroscopie RMN et de l'IRM, et qu'expliquer l'intérêt de la séquence d'écho de spin. De nombreuses autres séquences existent et permettent par exemple de pondérer les images en fonction des temps de relaxation et du degré de protonation, pour détecter plus facilement des éventuels cancer.

Ouvertures possibles :

- ▷ Utilisation de supraconductrices pour faire les aimants.
- ▷ Présentation d'une troisième utilisation pour mesurer des coefficients de diffusions (en appliquant la RMN à d'autres noyaux).
- ▷ Atomes à deux niveaux.
- ▷ Discuter de l'IRM, des méthodes de traitement des données, des autres séquences et des pondérations utilisées.
- ▷ Étude plus poussées des couplages entre les spins, qui explique la multiplicité des signaux en spectroscopie RMN.

6 Subtilités de la leçon et points disciplinaires essentiels

Questions posées pendant l'entretien :

- ▷ **Pourquoi les temps de relaxation sont-ils différents entre des tissus sains et des tissus cancéreux ?** Différence de densité de protons dans les deux tissus.
- ▷ **Pourquoi on observe des multiplets en spectroscopie RMN ?** Couplage entre les protons.
- ▷ **Ordre de grandeur du champ \vec{B}_0 dans une IRM ?** Quelques Tesla.
- ▷ **C'est quoi la définition du rapport gyromagnétique ?** L'explication simple se fait avec le modèle de la boucle de courant.
- ▷ Lien entre \vec{L} et \vec{S} ?
- ▷ **Relation entre l'aimantation et les spins (passage de la quantique au macro) ?** Passage fait en prenant des valeurs moyennes.
- ▷ **Comment faire en restant dans un traitement quantique ?** Utiliser le théorème d'Ehrenfest pour donner l'évolution de la valeur moyenne de l'aimantation.
- ▷ **Pourquoi il y a relaxation ?** Perte d'énergie par couplage avec les autres spins. Le transfert d'énergie et un transfert non radiatif, surtout pas radiatif.
- ▷ **Sur l'animation présentant l'écho de spin. Pourquoi les spins précessent à des pulsations différentes ?** Ils voient une amplitude différente du champs \vec{B}_0 car ce champ est globalement inhomogène : il est très difficile d'avoir un champ magnétique parfaitement homogène.
- ▷ **Comment faire pour mesurer T_2 ?** Plusieurs séquences d'écho de spin en faisant varier le temps entre les deux pulses.
- ▷ **Qu'est-ce que la FID et comment on la mesure ?** FID = Free Induction Decay. On la mesure avec une bobine (souvent celle générant les impulsions radio-fréquences).
- ▷ **Le temps de pulse $\pi/2$ dépend de B_1 . Quel est l'intérêt d'avoir une impulsion longue ou courte, et donc faut-il avoir un champ fort ou faible ?** La TF de la FID va donner des lorentziennes de largeur $\Delta f \sim \frac{1}{T_2^*}$. Prendre une impulsion courte permet d'avoir une impulsion de largeur spectrale grande et que chaque spin voit bien une impulsion $\pi/2$. Il faut comparer la largeur spectrale de l'impulsion et celle de la "raie".
- ▷ **Qu'est-ce qu'on mesure en IRM ?** On veut le nombre de protons (la densité de protons) au voisinage de là où on regarde. On veut donc mesurer T_2 .
- ▷ **Pourquoi avec juste une impulsion $\pi/2$ on ne mesure pas T_2 ?** On a les inhomogénéités du champ magnétique qui augmentent T_2 d'où l'intérêt de l'écho de spin pour s'affranchir des inhomogénéités du champ magnétique.
- ▷ **Quel type de relaxation ?** Relaxation non radiative.

Remarques de l'examineur :

- ▷ Il faut bien avoir en tête l'existence du facteur de Landé pour cette leçon (où il intervient dans les formules, ce qu'il lie, sa valeur, ...)
- ▷ Il ne faut pas oublier de parler de la méthode de détection et de la création des champs magnétiques impliqués.
- ▷ Dans la partie sur l'effet Zeeman et la répartition de Boltzmann, il faut bien préciser qu'en appliquant un champ magnétique fort, on obtient une faible séparation des niveaux sur laquelle on joue. La transition entre les deux niveaux n'est pas une transition optique (\sim GHz).
- ▷ Il reste à peaufiner un peu le passage du micro au macro si l'on garde cette approche. Pour un approche quantique pure, mettre les calculs sur diapo et ne pas les faire au tableau pour avoir le temps de traiter les applications.
- ▷ Pour l'IRM, il faut bien être au clair sur les deux aspects : le mapping qui se fait avec le gradient de champ, et la mesure de T_2 par écho de spin pour obtenir la densité de protons et revenir à la nature du tissu.

7 Exercices de base et applications intéressantes pour la leçon

- ▷ Démonstration de la précession de \vec{M} autour de \vec{e}_z : M_z et $||\vec{M}||$ sont constants et $M_{x,y}$ sont oscillants.
- ▷ Calcul quantique de la RMN : Effet Zeeman, Oscillations de Rabi, théorème d'Ehrenfest pour la valeur moyenne de l'aimantation, ...

8 Bibliographie pour construire la leçon

- ▷ Mécanique quantique, Dunod
- ▷ Physique quantique Tome 1, Fondements, Michel Le Bellac, Claude Cohen-Tannoudji, Franck Lalœ (p. 160)

9 Expériences illustratives, simulations numériques et exploitation pédagogique

- ▷ Animation sur l'écho de spin permettant de visualiser le déphasage entre les spins introduit par l'inhomogénéité du champ magnétique.
- ▷ Il existe une manip de RMN qui permet d'obtenir la FID d'un échantillon, en faisant varier les temps de pulse, l'intervalle entre les pulses, et en faire sa transformée de Fourier à l'aide d'un oscilloscope. Cette manip reste tout de même une boîte noire, pas sur qu'elle soit envoyée aux oraux, et il est nécessaire de l'avoir fait au moins une fois avant pour savoir comment elle fonctionne.

10 Critique des choix pédagogiques de la leçon

Le phénomène de résonance magnétique nucléaire est un phénomène purement quantique, mais il me semblait très compliqué de rester dans un raisonnement quantique tout le long de la leçon. J'ai donc décidé de présenter les phénomènes quantiques nécessaires à la compréhension de la RMN et de passer le plus vite possible sur un traitement classique avec l'aimantation moyenne de l'échantillon. Cela permet aussi de présenter un passage du microscopique au macroscopique aux élèves.

Les applications traitées sont classiques pour cette leçon, et présentent deux utilisations différentes de la RMN.

Le placement au niveau L3 est obligatoire pour pouvoir utiliser les résultats de mécanique quantique. Cette leçon se placerait en fin d'UE de mécanique quantique, après avoir vu la notion de moment cinétique en mécanique quantique, et l'interaction avec un champ électromagnétique (oscillations de Rabi).

Il est possible néanmoins de faire un traitement quantique de la RMN tout du long, mais les calculs doivent être mis sur diapo car cela prendrait trop de temps de les faire au tableau, et il ne resterait alors plus le temps de traiter des applications.