

Projet AMN

Réunion 1.

Introduction:

- Ce projet est une interface entre la chimie, et surtout l'informatique, l'électronique ...
- On étudie surtout la méthode EMMA qui sert à déminer les interférences sur les signaux mesurés.

Spectromètres AMN:

- 3 composants principaux
- Utilisent des aimants supraconducteurs générant un champ magnétique statique stable B_0 (par convention).
 - Une console électronique pour manipuler le champ ainsi que recevoir les résultats
 - Une sonde qu'on place au niveau de l'aimant, notamment pour placer l'échantillon d'analyse, elle émet des impulsions radiofréquences

Principe: Notre champ B_0 va créer des niveaux énergétiques, puis on va exciter l'échantillon avec des impulsions radiofréquences puis mesurer l'énergie les variations d'énergie lors du retour à l'équilibre.

• Le signal RMN est naturellement faible, on doit l'amplifier pour le mesurer, à cause de ça on ne peut pas négliger les interférences externes.

• Le résultat est sous la forme: $I = f(t)$, on va le traiter avec une transformée de Fourier pour obtenir

$$I = h(f)$$

(Hz) ou déplacement chimique (ppm),
déplacement chimique (ppm).

$$\delta_f = \frac{v - v_{\text{ref}}}{f} \times 10^6$$

v :
fréquence.

Etat de EMMA (1.0):

Implémentation expérimentale **OK!**

- Méthode de génération d'impulsions formées **laborieuse**

• Déconvolution difficile (Topspin)

• Génération de la shaped pulse (Topspin + Excel + bidouilles).

- Optimisation automatique de la shaped pulse **inexistante**.

Objectifs EMMA (2.0):

1) Proposer une nouvelle méthode intégrée pour générer la shaped pulse:
• à partir d'un FID

• à partir d'un spectre

• à partir d'un spectre déconvolué.

2) Module d'optimisation de la shaped pulse.

La méthode intégrée doit nécessairement être basée sur Topspin et inclure :

- module de déconvolution plus fluide
- méthode de création simple de la shaped pulse
- Optimisation automatisée des principaux paramètres de la shaped pulse.