

Résonance Magnétique Nucléaire

Principes de base

Jean-Marc Nuzillard

Master CSNM, Reims

1 Rappels

1.1 Phénomènes périodiques

Dans le temps : période T , fréquence ν , $\nu = 1/T$, pulsation ω , $\omega = 2\pi\nu$.

Dans l'espace : longueur d'onde λ , nombre d'onde n , $n = 1/\lambda$, vecteur d'onde \vec{k} , $k = 2\pi n$.

Propagation à la vitesse c : $\lambda = cT$.

1.2 Nombres complexes

Les nombres complexes sont de la forme $a + ib$ où a et b sont des nombres réels et $i^2 = -1$. On a les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \text{si } z &= a + ib \\ \text{alors } z &= |z| \exp(i\theta) \quad \text{avec } \theta = \arg(z) \\ \exp(i\theta) &= \cos\theta + i \sin\theta \\ |z| &= \sqrt{a^2 + b^2} \\ a &= |z| \cos\theta \\ b &= |z| \sin\theta \end{aligned}$$

Un plan vectoriel muni d'une base orthonormée (\vec{i}, \vec{j}) est isomorphe au "plan" complexe engendré par 1 et i . le nombre complexe $z = a + ib$ et le vecteur $\vec{u} = a\vec{i} + b\vec{j}$ se correspondent. Une rotation d'angle ϕ du vecteur \vec{u} correspond à la multiplication de z par $\exp(i\phi)$. Si un vecteur $\vec{u}(t=0)$ tourne à la pulsation ω , alors $\vec{u}(t)$ correspond à $z(t=0) \exp(i\omega t)$

2 Aimantation

2.1 Rapport gyromagnétique d'un noyau atomique

La résonance magnétique nucléaire a été mise au point initialement pour mettre en évidence expérimentalement le moment magnétique des noyaux atomiques. Pour un noyau isolé

$$\vec{M} = \gamma \vec{\sigma}$$

\vec{M} : moment magnétique d'un noyau

γ : rapport gyromagnétique

$\vec{\sigma}$: moment cinétique interne (de spin)

$$\begin{aligned} \|\vec{\sigma}\| &= \hbar \sqrt{s(s+1)} \quad \text{avec } s = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots \\ \sigma_z &= m_s \hbar \quad \text{avec } m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s \end{aligned}$$

où $\hbar = h/2\pi$ et h est la constante de Planck ($6,63 \cdot 10^{-34}$ J.s).

2.2 Interaction avec un champ magnétique \vec{B}_0

L'énergie d'interaction entre un moment magnétique \vec{M} et un champ magnétique \vec{B}_0 est

$$E = -\vec{M} \cdot \vec{B}_0$$

Par convention \vec{B}_0 est aligné avec le vecteur \vec{k} du référentiel du laboratoire $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$, d'axes Ox, Oy, Oz : $\vec{B}_0 = B_0 \cdot \vec{k}$.

$$E = -M_z B_0$$

$$E = -\gamma \sigma_z B_0$$

$$E = -\gamma m_s \hbar B_0$$

2.3 Transitions entre niveaux d'énergie

Elles sont induites par une onde électromagnétique de fréquence ν :

$$\begin{aligned}\Delta E &= h\nu = \hbar\omega && \text{condition de résonance} \\ |\Delta m_s| &= 1 && \text{règle de sélection des transitions} \\ \text{d'où } \nu &= \gamma B_0 / 2\pi \\ \text{ou } \omega &= \gamma B_0 \\ \text{et donc } E &= -m_s \hbar\omega\end{aligned}$$

La fréquence de résonance ν est comprise entre quelques MHz et quelques centaines de MHz. Elle se situe donc dans le domaine des radiofréquences.

2.4 Populations, cas $s = 1/2$

Il n'y a que deux niveaux énergétiques possibles, correspondant à $m_s = +1/2$ (état +) et $-1/2$ (état -)

$$\begin{aligned}m_s = +1/2 & \text{ et } E_+ = -1/2 \cdot \hbar\omega \\ m_s = -1/2 & \text{ et } E_- = +1/2 \cdot \hbar\omega\end{aligned}$$

Si N est le nombre total de noyaux, p_+ et p_- les populations des états + et -, alors $N = p_+ + p_-$. Les populations obéissent à la loi de Boltzman :

$$\begin{aligned}p_{\pm} &= Z e^{-E_{\pm}/kT} \quad \text{où } k \text{ est la constante de Boltzman} \\ p_{\pm} &= Z e^{\pm 1/2 \cdot \hbar\omega/kT} \\ p_{\pm} &= Z(1 \pm 1/2 \cdot \hbar\omega/kT) \quad \text{car } \hbar\omega \ll kT\end{aligned}$$

et donc

$$\begin{aligned}N &= 2Z \\ p_+ - p_- = \Delta p &= N \hbar\omega / 2kT\end{aligned}$$

2.5 Moment magnétique total

On désigne provisoirement par \vec{M} la somme de tous les moments magnétiques individuels de l'échantillon. Le système étudié présente une symétrie de révolution autour de l'axe Oz

$$\mathcal{M}_x = \mathcal{M}_y = 0$$

Sur l'axe Oz :

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_z &= p_+ M_{z+} + p_- M_{z-} \quad \text{avec } M_{z+} = 1/2 \cdot \gamma \hbar = -M_{z-} \\ \mathcal{M}_z &= M_{z+} \Delta p \\ \mathcal{M}_z &= \frac{N \hbar^2 \gamma^2 B_0}{4kT}\end{aligned}$$

Par la suite \vec{M} désignera le vecteur moment magnétique total, aussi appelé vecteur aimantation. Toutes les expériences de RMN ont pour but la manipulation de l'aimantation de l'échantillon et l'observation de son retour vers l'équilibre.

3 Retour vers l'équilibre

3.1 Déplacement chimique

Pour un noyau de nature donnée (^1H , ^{13}C , ...) le champ magnétique existant au niveau d'un noyau n'est pas égal à celui imposé de l'extérieur :

$$B_0^{\text{local}} = B_0(1 - \sigma)$$

où σ est appelé constante d'écran. On préfère caractériser un noyau par son déplacement chimique, défini à partir d'une substance de référence :

$$\begin{aligned}\delta &= \frac{\nu - \nu_{\text{ref}}}{\nu_{\text{ref}}} \times 10^{-6} \\ \text{où } \nu &= \gamma B_0^{\text{local}} / 2\pi\end{aligned}$$

La substance de référence est le tétraméthylsilane $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$ pour les noyaux ^1H , ^{13}C , ^{29}Si .

3.2 Précession

Le mouvement de retour à l'équilibre de l'aimantation \vec{M} se décompose en deux mouvements élémentaires, l'un de précession (ou rotation) et l'autre, dû aux phénomènes de relaxation.

$$\begin{aligned}\text{à l'équilibre : } \vec{M} &= M_0 \cdot \vec{k} \\ \text{hors équilibre : } \vec{M} &= M_z \cdot \vec{k} + \vec{M}_{xy}\end{aligned}$$

\vec{M}_{xy} tourne dans le plan Oxy à la fréquence ω , égale à celle de résonance. Le sens de la rotation est inverse du sens trigonométrique si γ est positif et B_0 dans la direction de \vec{k} . Algébriquement,

$$\omega = -\gamma B_0$$

3.3 Relaxation

3.3.1 Les temps T_1 et T_2

M_z et M_{xy} reviennent à leur valeur initiale (M_0 et 0) selon les équations différentielles

$$\frac{dM_z}{dt} = -\frac{1}{T_1}(M_z - M_0)$$

$$\frac{dM_{xy}}{dt} = -\frac{1}{T_2}(M_z - 0)$$

dont la solution est

$$\begin{aligned} M_z(t) - M_0 &= (M_z(0) - M_0) \exp\left(-\frac{t}{T_1}\right) \\ M_{xy}(t) &= M_{xy}(0) \exp\left(-\frac{t}{T_2}\right) \end{aligned}$$

Les temps T_1 et T_2 sont appelés temps de relaxation longitudinale (parallèle à B_0) et transversale (perpendiculaire à B_0), respectivement. Des expériences spécifiques de RMN en permettent la mesure.

3.3.2 Le temps T_2^*

L'aimantation transversale décroît toujours plus rapidement que ne l'indique la valeur de T_2 "vraie". Le champ \vec{B}_0 n'est en effet pas parfaitement homogène (constant) dans le volume de l'échantillon. La fréquence de résonance d'un noyau de déplacement chimique déterminé varie donc selon sa position. Au cours de leur précession les vecteurs \vec{M} correspondants se décalent les uns par rapport aux autres. Il en résulte un affaiblissement du signal, même en l'absence de relaxation. Ainsi

$$M_{xy}(t) = M_{xy}(0) \exp\left(-\frac{t}{T_2^*}\right)$$

où T_2^* est le temps de relaxation transversal apparent, avec $T_2^* < T_2$.

4 Passage hors équilibre

4.1 Le champ \vec{B}_1

L'aimantation est mise hors équilibre par action d'un champ magnétique alternatif \vec{B}_1 de direction perpendiculaire (Ox , arbitrairement) à \vec{B}_0 , appliqué pendant une courte durée (impulsion de quelques μs , **PW** ou **P1**, pulse width).

$$B_1(t) = 2B_1^{\max} \cos(\omega^{\text{rf}}t + \phi)$$

L'exposant "rf" signifie : radiofréquence. $\vec{B}_1(t)$ peut s'exprimer comme la somme de deux composantes tournant dans le plan Oxy aux fréquences ω et $-\omega$:

$$\begin{aligned} \vec{B}_1(t) &= B_1^{\max}(\cos(\omega^{\text{rf}}t + \phi) \cdot \vec{i} + \sin(\omega^{\text{rf}}t + \phi) \cdot \vec{j}) \\ &+ B_1^{\max}(\cos(\omega^{\text{rf}}t + \phi) \cdot \vec{i} - \sin(\omega^{\text{rf}}t + \phi) \cdot \vec{j}) \end{aligned}$$

La seule composante qui agit sur l'aimantation est celle dont la fréquence de rotation ν^{rf} est voisine de la fréquence de résonance (la première composante, arbitrairement). L'angle ϕ est la phase de l'impulsion. La valeur de ν^{rf} est la somme d'une fréquence "de base" exprimée en MHz et d'une valeur en Hz (**01**) destinée au réglage fin.

4.2 Le référentiel tournant

L'analyse des phénomènes est simplifiée si on les regarde depuis un système d'axes $OXYZ$ tel que :

- les axes Oz et OZ sont confondus.
- le plan OXY tourne autour de Oz à la fréquence ν^{rf} .

Dans le référentiel $OXYZ$ "tournant" :

- la pulsation du précession est $\Omega = \omega - \omega^{\text{rf}}$. Tout se passe comme si B_0 est réduit à un B_0 efficace : $B_0^{\text{eff}} = B_0^{\text{local}} + \omega^{\text{rf}}/\gamma$.
- le champ \vec{B}_1 est immobile. L'angle entre \vec{B}_1 et l'axe OX est la phase de l'impulsion.

Des noyaux tels que $\Omega = 0$ ($\nu = \nu^{\text{rf}}$) sont dits "en résonance". Les autres sont "hors résonance". La grandeur Ω est appelée "offset" (décalage).

4.3 Nutation

Le terme "nutation" désigne le mouvement du vecteur aimantation pendant l'application d'une impulsion RF. Il s'agit, dans le référentiel tournant, d'un mouvement de rotation autour de l'axe du vecteur \vec{B}_1^{eff} à la pulsation $\Omega_1^{\text{eff}} = \gamma B_1^{\text{eff}}$, avec :

$$\begin{aligned} \vec{B}_1^{\text{eff}} &= \vec{B}_0^{\text{eff}} + \vec{B}_1 \\ \Omega_1 &= -\gamma B_1^{\max} \\ \text{et donc } \Omega_1^{\text{eff}} &= \sqrt{\Omega_1^2 + \Omega^2} \end{aligned}$$

Si l'impulsion est de durée τ , \vec{M} tourne d'un angle $\Omega_1^{\text{eff}}\tau$, angle de nutation.

Dans le cas où $\Omega \ll \Omega_1$, le champ \vec{B}_1^{eff} est identique à \vec{B}_1 et l'angle de nutation θ vaut $\gamma B_1 \tau$. La trajectoire de \vec{M} s'effectue dans le plan perpendiculaire à \vec{B}_1 , indépendamment de l'offset Ω . Pour un angle θ donné, la condition $\Omega \ll \Omega_1$ est d'autant plus facile à réaliser que τ est court ; ce sera toujours considéré comme vrai par la suite (il n'y aura pas d'"effet d'offset").

5 Le signal de RMN

5.1 Origine

Le champ \vec{B}_1 est créé par une "bobine" conductrice d'axe Ox traversée par un courant électrique. Le mouvement de retour à l'équilibre de \vec{M} induit dans la bobine une force électromotrice $e(t)$ proportionnelle à M_x et à ω et donc à $\gamma^3 B_0^2 / T$. L'aimantation transversale tournant à la fréquence ν par rapport au référentiel du laboratoire, la composante M_x varie de manière sinusoïdale amortie à la même fréquence.

$$e(t) = k \cdot \sin(\omega t + \phi) \cdot \exp(-t/T_2^*)$$

La phase ϕ est décalée de celle de l'impulsion, d'une quantité inconnue mais constante et indépendante de l'offset. Le facteur $\exp(-t/T_2^*)$ traduit la décroissance de l'aimantation due à la relaxation transversale et aux inhomogénéités de \vec{B}_0 . Le facteur k est proportionnel à l'aimantation transversale présente immédiatement après l'impulsion, c'est-à-dire à $M_0 \sin \theta$.

5.2 Le signal complexe

Les variations de $e(t)$ sont trop rapides pour être analysées directement. Après amplification e subit une "détection synchrone en quadrature". Tout se passe comme si on mesure simultanément deux grandeurs $s_x(t)$ et $s_y(t)$ proportionnelles aux composantes M_x et M_y de \vec{M} et mesurées dans le référentiel tournant :

$$\begin{aligned} s_x(t) &= A \cos(\Omega t + \phi) \cdot \exp(-t/T_2^*) \\ s_y(t) &= A \sin(\Omega t + \phi) \cdot \exp(-t/T_2^*) \end{aligned}$$

Ces deux grandeurs sont réunies pour former le signal complexe $s(t)$:

$$\begin{aligned} s(t) &= s_x(t) + i s_y(t) \\ s(t) &= A \cdot \exp(i(\Omega t + \phi)) \cdot \exp(-t/T_2^*) \end{aligned}$$

Les signaux issus de la précession libre (en présence de B_0 seul) de \vec{M} sont désignés sous le terme "FID" (free induction decay).

5.3 Le bruit

L'agitation thermique des électrons dans le métal de la bobine et les circuits électroniques de traitement (amplification, détection, ...) introduisent un signal aléatoire, le bruit, qui se superpose au signal (reproductible) réellement issu de l'échantillon. Le bruit $b(t)$, de moyenne nulle, est caractérisé par son écart-type σ :

$$\sigma^2 = \langle b^2(t) \rangle$$

où $\langle \dots \rangle$ désigne la valeur moyenne. L'écart-type du bruit est proportionnel à $\omega^{1/2}$. Le rapport signal sur bruit (S/B) varie donc comme $\gamma^{5/2} B_0^{3/2}$.

L'amélioration du rapport S/B peut s'obtenir par accumulation de signaux. En co-additionnant **NS** (number of scans) FID, le signal reproductible est multiplié par **NS** alors que l'écart-type du bruit est multiplié par **NS**^{1/2}. Le rapport S/B est alors augmenté d'un facteur **NS**^{1/2}.

Entre l'enregistrement de deux FID consécutives, il convient d'attendre que l'aimantation soit revenue à une position proche de l'équilibre. Le délai correspondant (RD, relaxation delay, ou D1) vaut de 1 à 5 fois T_1 ; il est placé avant l'impulsion de RF. L'aimantation avant impulsion prend un état stationnaire, pour lequel le FID est réellement reproductible. Ainsi, **DS** (dummy scans, dummy = muet) séquences délai-impulsion-acquisition sont effectuées avant tout enregistrement. Leur FID n'est pas additionné aux **NS** suivantes.

5.4 Échantillonnage et numérisation

La détermination des fréquences de résonance nécessite l'enregistrement du FID. Le FID est donc mesuré à intervalles réguliers (échantillonnage) et les valeurs obtenues sont transformées en valeurs numériques (numérisation). Pour échantillonner correctement un signal dont la fréquence est comprise entre $-\text{SW}/2$ et $\text{SW}/2$ (**SW** : spectral width, largeur spectrale) il faut que la fréquence d'échantillonnage soit **SW** (condition de Shannon). Une valeur numérique complexe est donc produite toutes les $1/\text{SW}$ secondes.

Exemple : A 500 MHz, une largeur spectrale de 10 ppm correspond à **SW** = 5 kHz. Les mesures sont donc effectuées toutes 200 μs (**DW**, dwell time). La mesure de 16K valeurs complexes (**TD** = 32K, time domain) dure 3.2 s (**AQ**, acquisition time).

La numérisation du signal est effectuée par un convertisseur analogique-numérique (CAN). Une tension électrique est convertie en un nombre qui lui est proportionnel. Il faut que la tension appliquée à l'entrée soit comprise entre deux limites, au delà desquelles la conversion est erronée. Le gain de l'amplificateur du signal (**RG**, receiver gain) doit donc être ajusté de manière à ce que la tension à mesurer reste dans les limites imposées. La sortie du CAN produit des nombres codés sur un nombre fini b de bits. Il n'y a donc que 2^b valeurs de sortie possibles, alors qu'il y en a une infinité en entrée. Le CAN introduit donc une erreur de transcription, appelée bruit de numérisation. Son influence est minimale lorsque toute la gamme de tensions d'entrée est utilisée.

Le FID numérisé n'est pas directement utilisable et doit être traité pour fournir un spectre.

6 Transformation de Fourier

Comme précédemment, on considère un échantillon qui ne possède qu'une unique fréquence de résonance. La généralisation aux situations réelles est immédiate.

Cette section traite de la transformation du FID en spectre. Un spectre est une fonction d'une variable de fréquence (ou de déplacement chimique, ce qui revient au même) qui indique comment chaque fréquence est représentée dans un signal.

6.1 Définition

Soit un signal $s(t)$ tel que

$$s(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} S(\Omega) \cdot \exp(i\Omega t) d\Omega$$

Cette expression signifie que ce signal résulte de l'addition d'une infinité de signaux élémentaires, et que chaque composante de fréquence Ω ($\exp(i\Omega t)$) est d'amplitude $S(\Omega)$. Le spectre de $s(t)$ est donc $S(\Omega)$. Le calcul de ce spectre s'obtient par :

$$S(\Omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} s(t) \cdot \exp(-i\Omega t) dt$$

Cette relation exprime le spectre $S(\Omega)$ comme le résultat de la transformation de Fourier (TF) appliquée au signal $s(t)$. On dit aussi que $S(\Omega)$ est la transformée de Fourier (TF, aussi) de $s(t)$.

De même qu'il n'est pas possible d'enregistrer $s(t)$ pour toutes les valeurs de t (il faut échantillonner le signal pendant une durée finie), il n'est pas possible de calculer $S(\Omega)$ pour toutes les valeurs de Ω . Une méthode numérique performante (algorithme de Cooley-Tukey) permet de calculer la TF d'un signal complexe mesuré en $\mathbf{TD}/2$ valeurs de t espacées régulièrement de $1/\mathbf{SW}$. Le résultat est un spectre calculé pour $\mathbf{SI} = \mathbf{TD}/2$ (size) fréquences comprises entre $-\mathbf{SW}/2$ et $\mathbf{SW}/2$.

6.2 Linéarité

La TF possède de nombreuses propriétés, dont la linéarité :

$$\mathbf{TF}(a \cdot s_1(t) + b \cdot s_2(t)) = a \cdot \mathbf{TF}(s_1(t)) + b \cdot \mathbf{TF}(s_2(t)) \quad (a, b) \in \mathcal{C}^2$$

Ainsi, le spectre d'un échantillon possédant de multiples résonances est la somme des spectres élémentaires correspondants à chaque résonance.

6.3 Le spectre élémentaire

Le signal produit par N noyaux identiques s'écrit

$$s(t) = A \exp(i\Omega_0 t) \exp(-t/T_2^*) \quad (t \geq 0)$$

où $\Omega_0 = 2\pi\nu_0$ et ν_0 est l'offset de la résonance exprimé en Hz. L'amplitude A est un nombre réel proportionnel à N . Le signal $s(t)$ est considéré comme nul pour $t < 0$, c'est un signal causal. Une expression plus générale de $s(t)$ inclut un facteur de phase $\exp(i\phi)$. Ce cas sera analysé ultérieurement.

Par application de la définition de la TF :

$$\begin{aligned} S(\Omega) &= AT_2^* \frac{1}{1 + ((\Omega - \Omega_0)T_2^*)^2} + AT_2^* \frac{-i(\Omega - \Omega_0)T_2^*}{1 + ((\Omega - \Omega_0)T_2^*)^2} \\ S(\Omega) &= \mathcal{A}(\Omega) + i\mathcal{D}(\Omega) \end{aligned}$$

Les représentations graphiques des fonctions \mathcal{A} et \mathcal{D} sont appelés courbes d'absorption et de dispersion. La fonction \mathcal{A} est la fonction de Lorentz $1/(1+x^2)$. Les raies d'absorption en RMN sont lorentziennes. Une telle raie est symétrique et localisée autour de $\Omega = \Omega_0$, elle possède une largeur à mi-hauteur en Hz $\Delta\nu_{1/2}$ telle que :

$$\pi\Delta\nu_{1/2}T_2^* = 1$$

Une raie a pour hauteur AT_2^* , d'autant plus importante que \vec{B}_0 est plus homogène, puisqu'à la limite $T_2^* = T_2$. La surface d'une raie, mesurée par son intégrale de $-\infty$ à $+\infty$, ne dépend que de A (et pas de T_2^*) et est donc proportionnelle au nombre des noyaux N qui en sont à l'origine. Cette propriété est à la base de l'utilisation quantitative de la RMN. Une raie en dispersion (la fonction \mathcal{D}) est moins localisée que la raie en absorption correspondante. Il est donc moins facile de distinguer des raies en dispersion de fréquences proches que les raies en absorption. Seules ces dernières sont représentées sur un spectre.

6.4 Phasage

Dans le cas général d'un spectre comportant plusieurs raies, la phase $\phi(\Omega)$ de chaque composante varie linéairement (en première approximation) de ϕ_0 à $\phi_0 + \phi_1$ en allant d'une extrémité à l'autre de la fenêtre spectrale. Ainsi chaque composante du signal s'écrit

$$s(t) = A \exp(i\phi(\Omega_0)) \exp(i\Omega_0 t) \exp(-t/T_2^*).$$

Un déphasage indépendant de Ω est introduit par les divers circuits électroniques du spectromètre. L'impossibilité physique d'utiliser la bobine pour la mesure du signal immédiatement après la fin de l'impulsion RF oblige à intercaler un délai (\mathbf{DE}) entre impulsion et acquisition. Pendant ce délai les diverses aimantations \vec{M} de l'échantillon tournent d'un angle proportionnel à leur offset. La phase d'un signal est donc une fonction affine ($f(x) = ax + b$) de l'offset. Après TF du signal on obtient

$$\begin{aligned} S(\Omega) &= \exp(i\phi) \cdot (\mathcal{A} + i\mathcal{D}) \\ S(\Omega) &= (\mathcal{A} \cdot \cos \phi - \mathcal{D} \cdot \sin \phi) + i(\mathcal{A} \cdot \sin \phi + \mathcal{D} \cdot \cos \phi) \end{aligned}$$

dont la partie réelle est un mélange de raies en absorption et en dispersion. Un spectre en absorption pure est obtenu en calculant $\exp(-i\phi(\Omega)).S(\Omega)$ et en n'en gardant que la partie réelle. La fonction $\phi(\Omega)$ dépend des paramètres ϕ_0 (PHC0) et ϕ_1 (PHC1), ajustés afin que les raies spectrales soient symétriques.

6.5 Filtrage numérique

Cet ensemble de techniques désigne les opérations appliquées au FID avant le calcul de la TF. Il s'agit de remplacer $s(t)$ par le produit $s(t).f(t)$ où la fonction $f(t)$ est choisie de manière à réaliser l'effet désiré. Le cas le plus fréquent est l'amélioration du rapport S/B en choisissant $f(t) = \exp(-\lambda t)$. Qualitativement, on donne moins de poids aux mesures effectuées pour les plus grandes valeurs de t , celles où le bruit est proportionnellement plus important que le signal. On introduit aussi une sorte de relaxation artificielle qui élargit et diminue l'amplitude des raies spectrales après TF. La valeur optimale de λ est $1/T_2^*$. Le paramètre de traitement du FID correspondant est **LB** (line broadening), l'élargissement des raies qu'il provoque, exprimé en Hz : $\text{LB} = \lambda/\pi$.

Lorsque le bruit est très peu intense il est possible d'utiliser la même stratégie avec $\text{LB} < 0$. La fin du FID est tronqué en introduisant dans $f(t)$ un facteur gaussien $\exp(-kt^2)$ de paramètre **GB** (gaussian bell) fonction de k . Le spectre obtenu présente un rapport S/B plus faible, mais des raies plus fines et de forme non-lorentziennes.

Un FID contenant **TD/2** complexes est transformé par TF en d'autant de nombres complexes. Ainsi les **TD** réels du FID sont convertis en **TD/2** réels tracés dans le spectre. Il y a perte d'informations. Elles peuvent être restaurées en complétant le FID par **TD** zéros. La partie réelle du spectre contient alors **TD** valeurs. Cette opération est appelée "zero-filling". Le nombre de points dans le spectre est alors **SI** = **TD**. Pour **SI** = $2 \times \text{TD}$, $4 \times \text{TD}$, ... le zero-filling réalise une interpolation des points du spectre où **SI** = **TD**.

7 Enregistrement d'un spectre

- Préparation
 - introduction de l'échantillon dans la sonde (et donc dans \vec{B}_0)
 - réglage électrique de la sonde (accord, adaptation d'impédance)
 - mise en rotation de l'échantillon
 - régulation de la température
 - réglage de l'homogénéité et de la stabilité de \vec{B}_0 ("shim", "lock").
- Acquisition
 - choix de **RG**, **NS**, **O1**, **SW**, **DS**, **RD**, **PW**, **TD**

- exécution du programme d'acquisition
- éjection de l'échantillon
- Traitement
 - choix de **LB**, **GB**, **SI**
 - filtrage numérique
 - transformation de Fourier
 - phasage
 - intégration
 - liste des raies ("peak picking")
 - tracé
 - archivage