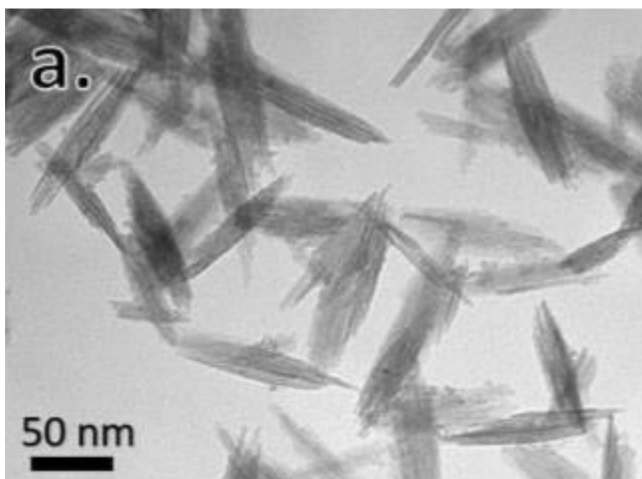


Caractérisation pluridisciplinaire de nanoparticules d'oxyhydroxyde de fer

Les particules d'oxyde de fer (magnétite et/ou maghémite) sont couramment utilisées comme agents de contraste pour l'Imagerie par Résonance Magnétique (IRM) en recherche biomédicale [1]. Cependant, elles induisent un contraste négatif car elles diminuent la valeur de T_2 des tissus où elles s'accumulent, ce qui mène à une disparition rapide du signal RMN. Afin de privilégier un contraste IRM positif (marqué par une augmentation du signal), il convient d'utiliser des agents de contraste pour lesquels le rapport entre T_1 et T_2 est proche de l'unité. Avec des particules de magnétite ou maghémite, cela implique d'utiliser des particules de très petite taille et de faible aimantation. Dans ce travail, nous explorerons une autre piste, en étudiant les propriétés physico-chimiques, magnétiques et RMN de nanoparticules d'oxyhydroxyde de fer comme la goethite et l'akaganeite, dont l'aimantation est naturellement faible car ces composés sont antiferromagnétiques alors que la magnétite et la maghémite sont ferrimagnétiques [2]. Les échantillons étudiés seront constitués de suspensions de nanoparticules utilisées comme compléments de fer à injecter. Outre les mesures de la taille des particules et de leurs propriétés magnétiques, leur effet sur les temps de relaxation RMN de l'eau à différents champs magnétiques, pHs et températures sera également étudié. Si le temps le permet, une modélisation théorique du mécanisme de relaxation pourrait être réalisée.



Nanoparticules de goethite [3]

Références :

1. Gossuin et al, WIRE, WIRE: Nanomed Nanobiotechnol, 2009,1(3), p. 299
2. Cornell and Schwertmann, 2nd Edition, Weinheim : Wiley-VCH, 2003
3. Avolio et al, Phys. Chem. Chem. Phys., 2019,21, 18741-18752

Contact : ou yves.gossuin@umons.ac.be ou quoc-lam.vuong@umons.ac.be

Relaxation magnétique nucléaire induite par des nanoparticules superparamagnétiques avec enrobage

Les nanoparticules superparamagnétiques sont utilisées dans le domaine biomédical en raison de leurs propriétés magnétiques, de leur faible toxicité et de leur facilité de synthèse. Elles sont notamment utilisées comme agents de contraste en imagerie par résonance magnétique car elles agissent sur les temps de relaxation des protons de l'eau. Plus ces temps varient, plus ces agents de contraste sont efficaces. Les temps de relaxation peuvent être prédites par des modèles faisant intervenir les interactions entre les protons et les nanoparticules. Habituellement, le mouvement des protons est modélisé une diffusion homogène autour des nanoparticules. Or, expérimentalement, ces nanoparticules sont souvent enrobées d'une couche organique potentiellement perméable à l'eau afin de les stabiliser et/ou de les rendre moins toxiques – un enrobage qui n'est pas pris en compte dans la théorie. Cet enrobage peut pourtant modifier le mouvement des molécules d'eau et donc avoir une influence non négligeable sur les temps de relaxation.

Dans ce projet théorique, nous proposons de prendre en compte l'influence de l'enrobage de très petites nanoparticules dans les modèles de relaxation magnétique nucléaire. Nous nous appuyons sur le formalisme dit « de Redfield » - un développement rigoureux basé sur la mécanique quantique. Plus précisément, le projet consistera à calculer numériquement les densités spectrales issues de cette théorie, en incluant la couche d'enrobage de la nanoparticule, via des méthodes de Monte Carlo.

L'étudiant devra d'abord étudier le formalisme de Redfield et écrira l'entièreté du code permettant le calcul numérique de ce modèle. Selon l'envie de l'étudiant, des tentatives de résolution analytique sont également envisageables. Le choix du langage de programmation est laissé libre à l'étudiant.

Contacts :

quoclam.vuong@umons.ac.be ou

yves.gossuin@umons.ac.be

