

PROPOSITION DE SUJET DE THESE

Intitulé : L'intelligence artificielle appliquée à la microscopie électronique en transmission

Référence : **Domaine-Département-Année-Numéro d'ordre**

(à rappeler dans toute correspondance)

Début de la thèse : 01/10/2025

Date limite de candidature : 05/07/2025

Mots clés

Structures de basse dimension, Intelligence artificielle, microscopie électronique en transmission

Profil et compétences recherchées

Physicien(ne) ayant une formation dans le domaine des matériaux, nanomatériaux ou plus généralement en sciences des matériaux. Bonne connaissance de de la physique du solide, de la matière condensée et de la physique statistique, ainsi qu'un goût prononcé pour la simulation numérique. Des pré-requis en IA sont un plus mais pas essentiels. Diverses collaborations sont également à prévoir, et donc les échanges scientifiques seront encouragés.

Présentation du projet doctoral, contexte et objectif

Depuis plusieurs années, les nanoparticules (NP) se sont imposées comme la base de nouvelles classes de matériaux dont les propriétés opèrent une rupture scientifique et technologique avec leurs parents 3D. Parmi toutes les techniques d'analyse de ces objets de taille infiniment petite, la microscopie électronique en transmission (MET) est l'une des plus adaptées car elle permet des études structurales et chimiques avec une précision inégalée. Toutefois, le MET génère des images présentant un rapport signal/bruit, un contraste et une résolution spatio-temporelle dégradés, qui nuisent à la quantification et à l'interprétation fiable des données. De plus, l'extraction d'informations structurales à partir de ces images repose sur une acquisition manuelle qui ne permet pas une analyse statistique des données introduisant un biais humain au stade du post-traitement. Récemment, l'avènement d'algorithmes d'intelligence artificielle (IA) type "machine learning" ou "deep learning" a montré des performances exceptionnelles dans les tâches de classification visuelle. Ces nouvelles techniques se sont avérées révolutionnaires dans un certain nombre de domaines et on peut s'attendre à ce qu'elles aient un impact similaire sur la microscopie électronique. Ainsi, depuis quelques années, le LEM a développé une activité de recherche dans ce domaine émergent [1-3] et qui ne cesse de grandir en Europe mais également en Asie et aux USA.

L'objectif général du stage sera de développer un cadre unique basé sur des algorithmes de « deep learning » pour la microscopie in situ en milieux gazeux et liquide permettant l'acquisition et l'analyse automatisée, à haut débit et en temps réel de séquences d'images MET. Notre approche consistera à constituer un ensemble de données selon deux étapes. La première sera de générer par des simulations à l'échelle atomique des configurations structurales de NPs qui reposent essentiellement sur un formalisme de type liaisons fortes intégré dans des codes de relaxations structurales de type Dynamique Moléculaire ou Monte Carlo. La seconde étape consistera à simuler des images de MET à partir des configurations issues des calculs atomistiques incluant le bruit instrumental et les imperfections de l'optique du microscope. Cette base de données numériques sera ensuite intégrée dans de codes d'IA pour analyser les données expérimentales MET de NPs dans le vide, sous gaz ou encore en milieu liquide.

On peut noter que ce travail sera fait en collaboration avec Maxime Moreaud de l'IFPEN (expertise en IA) ainsi que le laboratoire MPQ (Université Paris Cité) pour la partie expérimentale où les caractérisations des NPs seront effectuées par un MET de dernière génération. Une telle synergie regroupant plusieurs laboratoires nationaux est cruciale pour aborder cette recherche ultra-compétitive au niveau international.

Une thèse en cotutelle ONERA-IFPEN est envisagée.

Références :

D. Förster *et al*, Carbon (2020)

R. Moreau *et al.*, (soumis)

A. Moncomble *et al.*, (soumis)

Collaborations envisagées

IFPEN et MPQ (Univ. Paris Cité)

Laboratoire d'accueil à l'ONERA

Département : Matériaux et Structures

Lieu (centre ONERA) : CC

Contact : AMARA Hakim

Tél. : 01 46 73 48 90 Email hakim.amara@onera.fr:

Directeur de thèse

Nom : Hakim AMARA

Laboratoire : LEM

Tél. : 01 46 73 48 90

Email : hakim.amara@onera.fr

Pour plus d'informations : <https://www.onera.fr/rejoindre-onera/la-formation-par-la-recherche>