



Proposition de sujet de stage

Mise en place d'une méthodologie d'analyse de spectres Raman de fluides réactifs

Dans le contexte d'un projet de recherche européen visant la conception de fluides de travail réactifs au lieu qu'inertes pour des cycles thermodynamiques (www.univ-lorraine.fr/erc-reacher) nous proposons un travail de recherche visant l'analyse des signaux Raman de fluides réactifs en phase liquide et en phase gazeuse.

Une campagne de mesures expérimentales en Raman est en cours d'exécution au laboratoire LRGP visant à suivre la composition de différents fluides réactifs suivant des changements en température et en pression. Dans ce contexte, l'étudiant master devra mettre en place une méthodologie d'analyse des spectres préliminaires obtenus pour permettre l'identification des espèces présentes et la quantification de la composition du système pour différentes conditions expérimentales.

L'objectif du stage est donc d'appliquer et de développer des outils de chimiométrie pour exploiter de façon optimale des données spectrales Raman. Pour l'analyse de cette information moléculaire, l'étudiant devra (i) trouver le meilleur pré-traitement pour corriger les effets indésirables ou inhérents à la mesure sur les spectres (correction de ligne de base, spikes, etc.) et (ii) Appliquer différentes méthodes multivariées pour extraire les informations spectrales les plus pertinentes (ACP, MCR-ALS, ICA, etc.).

Le stage se tiendra au laboratoire LIEC et en collaboration avec le laboratoire LRGP.

Personnel impliqué : Marc OFFROY (LIEC), Philippe ARNOUX (LRGP), Olivier HERBINET (LRGP), Silvia LASALA (LRGP).

Durée du stage : 6 mois (mi-janvier – mi-juillet)

COMPETENCES REQUISES :

La candidate ou le candidat devra avoir des compétences solides en physico-chimie (notamment en spectroscopies), et en mathématique (notamment statistiques, calcul matriciel). Elle ou il devra également avoir un goût particulier et une certaine autonomie en programmation (MATLAB, VBA, PYTHON, R ou tout autre langage).