

SUJET DE THESE

Développement d'outils de chimométrie de fusion de données pour repousser les limites d'analyse d'appareils conventionnels en physico-chimie

Marc Offroy (LIÉC, UMR CNRS 7360), marc.offroy@univ-lorraine.fr

Contexte : Ce sujet de thèse s'inscrit dans le projet ICEEL Carnot Transverse intitulé **TRANSFUSION** (200 k€ sur 2024-2027) pour Techniques de chimométrie Avancées de Fusion de données pour repousser les limites d'analyse d'appareils conventionnels.

Aujourd'hui, les instruments en nanosciences se doivent d'être toujours de plus en plus performants pour visualiser et analyser des échantillons aux petites échelles. L'interprétation de ces données nécessite la mise en œuvre d'outils mathématiques performants pour extraire les informations les plus pertinentes et ce sans a priori. L'objectif du projet doctoral est donc d'appliquer et de mettre au point des méthodes originale d'analyse de données pour les nanosciences, où de nombreux domaines de recherche sont concerné comme la physique, la chimie ou la biologie. Pour ce faire nous avons choisi de travailler sur quatre méthodes d'analyse : l'imagerie hyperspectral Raman, la sonde de Castaing, la microscopie à Force Atomique (AFM) couplé au Raman, sur lesquels des méthodes de fusions de données seront développées pour caractériser des échantillons de type biomasse, matériaux innovants et biologique. Ce choix se justifie pour plusieurs raisons : (i) ces techniques instrumentales permettent une caractérisation moléculaire, élémentaire ou mécanique en surface et/ou en volume autour d'une résolution spatiale latérale et azimutale de 1 μ m, mais aussi par le fait que (ii) l'ensemble des partenaires du projet **TRANSFUSION**, à savoir le **LERMAB**, **GeoResources**, **LCPME**, **LMOPS**, **TJFU** et **LIÉC**, les utilisent pour caractériser leurs échantillons complexes. Le travail du doctorant s'articulera autour de 3 workpackage (WP) distincts sur 3 années :

- WP1 : Comprendre et améliorer la résolution spatiale des différentes techniques. Le LIÉC utilise déjà des méthodes algorithmiques pour le faire.
- WP2 : Identification des sources moléculaires, élémentaires, ou mécanique sur chacun des instruments (méthode de démixage de signaux).
- WP3 : Proposer une méthode dite de fusion de données (e.g. topologie).

Au-delà d'une approche interdisciplinaire et pluridisciplinaire de la recherche, ce projet doctoral vise à proposer une nouvelle approche d'analyse de données en chimométrie avec pour objectif de repousser les limites actuelles d'instruments conventionnels lors de la génération de données spatiales couplées à des informations de chimie élémentaire, moléculaire et mécanique avec comme credo : vers le plus petit, le plus rapidement possible, avec traitement intégré et coût compétitif.

Mots clés : Chimométrie, chimie analytique, chimie physique, traitement de données, imagerie, super-résolution.

Compétences : Le (la) candidat(e) devra avoir des compétences solides en physico-chimie et en mathématiques (notamment statistiques, calcul matriciel). Il (Elle) devra également avoir une certaine autonomie en programmation (MATLAB, ou PYTHON, ou R, ou FORTRAN ou autre) et un goût particulier pour l'expérimentation.

Lieu du stage : Nancy, Université de Lorraine, LIÉC, UMR CNRS 7360