

Développement d'algorithmes d'intelligence artificielle pour l'analyse haut-débit de données de diffraction des rayons X

Ce sujet de thèse est proposé dans le cadre du projet SYNEART, un programme de recherche financé par le plan d'investissement France 2030 et le programme exploratoire PEPR DIADEM. Le poste est ouvert à l'IRCER (Institut de Recherche sur les Céramiques – Limoges, France) en étroite collaboration avec le GREMAN (Matériaux, Microélectronique, Acoustique et Nanotechnologies – Tours, France).

Contexte

L'architecture des processeurs actuels est limitée par le goulot d'étranglement de Von Neumann, où la séparation de la mémoire et des unités de traitement est à l'origine d'une grande inefficacité énergétique, problème devenant critique dans le cas d'applications d'intelligence artificielle (IA). Le projet SYNEART vise à résoudre ce problème en exploitant les propriétés physiques des films minces de ferroélectriques relaxeurs afin de produire des dispositifs neuromorphiques. Comparativement aux ferroélectriques conventionnels, les ferroélectriques relaxeurs se caractérisent par des nanorégions polaires et un paysage énergétique « plat », ce qui leur permet de présenter plusieurs états stables, en faisant ainsi des candidats idéaux pour le développement de synapses et de neurones artificiels présentant une consommation d'énergie bien inférieure à celle de la technologie CMOS traditionnelle.

Afin d'accélérer la découverte des combinaisons optimales « composition chimique/épaisseur/électrode », le projet SYNEART propose de mettre en œuvre des approches de synthèse à haut débit (dépôt combinatoire par ablation laser pulsé - CPLD) et une caractérisation haut débit assistée par l'IA.

Objectifs

Le doctorant ou la doctorante contribuera spécifiquement à la caractérisation et à l'analyse à haut débit accélérées par l'IA. Les objectifs principaux sont :

- analyse DRX à haut débit : des mesures de diffraction des rayons X (DRX) par micro-faisceau seront effectuées sur des bibliothèques de compositions synthétisées par CPLD, avec un intérêt particulier pour les cartographies de l'espace réciproque (RSM) en 2D et 3D, enregistrées dans plusieurs géométries. Des chaînes de gestion et de traitement des données spécifiques seront développées.

- apprentissage profond : le volume massif de données générées constitue un défi majeur pour les méthodes d'analyse conventionnelles. L'objectif est de développer et de mettre en œuvre des réseaux de neurones profonds pour automatiser l'analyse des données, permettant une reconnaissance rapide des phases, de la symétrie (polaire/non-polaire, cubique, etc.) et des paramètres de maille.

La personne recrutée pourra s'appuyer sur l'expertise de l'IRCER et du GREMAN dans le domaine de la croissance et de la caractérisation de couches minces [1, 2] ainsi que dans l'analyse avancée de données DRX, incluant le développement d'algorithmes d'apprentissage profond [3, 4].

Profil du candidat ou de la candidate

Formation : Master (ou équivalent) en science des matériaux, physique de la matière condensée, cristallographie, ou mathématiques appliquées / science des données avec un fort intérêt pour les applications physiques.

Expertise technique : maîtrise de la programmation pour le traitement de données et le calcul scientifique.

Compétences transversales : capacité à travailler dans un environnement interdisciplinaire. Bonnes capacités de communication pour collaborer avec les différents laboratoires de recherche du projet (SPMS, IRCER, GREMAN, LPMC). Une bonne maîtrise de l'anglais est requise, tant à l'écrit qu'à l'oral.

Salaire, durée du contrat

Le contrat sera établi pour une durée de trois ans à compter du 1^{er} octobre 2026. Le salaire brut mensuel est de ~2300€.

Contact

Alexandre Boulle (alexandre.boulle@cnrs.fr)

Jerome Wolfman (wolfman@univ-tours.fr)

References

[1] C. Daumont, Q. Simon, S. Payan, P. Gardes, P. Poveda, M. Maglione, B. Negulescu, N. Jaber, J. Wolfman, "Tunability Investigation in the $BaTiO_3$ - $CaTiO_3$ - $BaZrO_3$ Phase Diagram Using a Refined Combinatorial Thin Film Approach", *Coatings* 11, 1082 (2021).

[2] Nadaud, G. F. Nataf, N. Jaber, B. Negulescu, F. Giovannelli, P. Andreazza, P. Bernal, J. Wolfman "Enhancement of

piezoelectric properties in a narrow cerium doping range of $Ba_{(1-x)}Ca_xTi_{(1-y)}Zr_yO_3$ evidenced by high throughput experiment", ACS Applied Electronic Materials 6, 7392 (2024).

[3] A. Boule, A. Debelles, "Convolutional neural network analysis of x-ray diffraction data: strain profile retrieval in ion beam modified materials", Machine Learning: Science and Technology 4, 015002 (2023).

[4] A. Souesme, R. Guinebretière, O. Castelnau, A. Boule, "High-throughput determination of crystallite size and microstrain from X-ray diffraction data with deep neural networks", to appear in Machine Learning: Science and Technology (2026).