



Offre de contrat de thèse de doctorat

Défauts et déformations dans les polycristaux oxydes : mesures *in situ* de diffusion des rayons X et développement de réseaux de neurones profonds pour l'analyse de données massives



L'offre de thèse présentée ici s'inscrit dans le contexte d'une collaboration au long cours menée depuis une quinzaine d'années et qui implique les laboratoires IRCER (CNRS – Université de Limoges), PIMM (CNRS – Arts et Métiers Paris), Institut Néel (CNRS Grenoble) et IRIG (CEA Grenoble). Les projets de recherche développés concernent tous des matériaux oxydes polycristallins et ils sont fortement orientés vers des mesures de diffusion ou diffraction des rayons X utilisant la source synchrotron ESRF à Grenoble. Il s'agit d'une manière générale de comprendre les couplages entre transitions de phases, défauts structuraux, fluctuations de compositions et déformations locales intra-et-inter-cristalline. Ces projets collaboratifs sont pour une large part, financés par l'Agence Nationale de la Recherche (ANR).



Les mesures connues sous le nom de "microdiffraction de Laue", consistent à cartographier les échantillons à l'aide d'un faisceau de rayons X polychromatiques sub-micrométrique hautement focalisés. Pour chaque position du faisceau de rayons X, le diagramme de diffraction enregistré émane d'un seul ou de quelques cristaux. Ces diagrammes contiennent de nombreuses taches de diffraction et, lorsqu'il s'agit d'étudier des ensembles de cristaux nanométriques, ou qui contiennent une forte densité de défauts, ces taches de diffraction sont complexes et présentent parfois plusieurs maxima. Ce projet traite de l'application de réseaux de neurones profonds pour l'inversion de ces données de diffraction des rayons X dans le contexte de la détermination des caractéristiques nanostructurales des matériaux concernés. Il est bien connu que cette tâche est entravée par le « problème de phase », qui décrit le fait que la phase des rayons X diffractés est perdue dans l'expérience de diffraction, de sorte que les informations de l'espace réel ne peuvent pas être obtenues par une simple inversion des données. Ce problème est généralement contourné en simulant les données expérimentales avec un modèle physique. Si ce type d'approche s'avère très efficace, le principal inconvénient est le temps nécessaire pour mener la simulation à bien, qui peut être de quelques minutes, voire de plusieurs heures selon la complexité du problème. Ces caractéristiques sont devenues incompatibles avec les colossales quantités de données qui sont aujourd'hui enregistrées autour des sources synchrotrons.

Nous nous concentrerons sur l'analyse des défauts et déformations dans des matériaux polycristallins, principalement à base d'oxydes, où des stimuli externes (hautes températures par exemple) engendrent de profonds bouleversements de la microstructure consécutifs à des changements de phases structuraux. Le travail consistera à (i) développer un modèle numérique à même de décrire la distribution d'intensité dans des diagrammes de microdiffraction Laue, (ii) générer numériquement des données représentatives de données réelles de manière à (iii) concevoir, entraîner et optimiser un réseau de neurones convolutif (CNN) dédié à l'analyse nanostructurale en temps réel. Les performances du CNN seront évaluées grâce à des mesures qui seront réalisées au cours de ce travail.

La thèse se déroulera à l'IRCER Limoges (<https://www.ircer.fr/>) en collaboration étroite avec le laboratoire PIMM où sont développées les approches de micromécanique qui relient cristallographie et déformations locales. Les mesures de microdiffraction Laue seront réalisées sur la ligne BM32 de l'ESRF. Elles seront associées à des mesures complémentaires de cartographies locales de l'espace réciproque au travers de campagnes d'expériences menées sur la ligne BM02 avec un faisceau monochromatique. Les développements numériques pourront s'appuyer sur les serveurs disponibles à l'IRCER.

Compétences requises :

Cristallographie, Programmation, Physique de la matière condensée, Micromécanique

co-directeurs de thèse :

René Guinebrière, Professeur des Universités, rene.guinebriere@unilim.fr

Alexandre Boulle, Directeur de Recherche CNRS, alexandre.boulle@cnsr.fr