

# Postdoc (H/F) en AI/ML pour diffraction des rayons X

## Missions

Dans de nombreux domaines, tels que la lutte contre le changement climatique, la médecine, les technologies de l'information et de la communication, une découverte continue de nouveaux matériaux inorganiques est nécessaire. Dans ce contexte, notre objectif principal est d'accélérer la recherche de nouveaux matériaux, grâce à une méthodologie qui repose sur des méthodes de prédiction et de caractérisation. Grâce à nos partenaires à Sorbonne Université et au Synchrotron Soleil, des séquences de cristallisation suivies par DRX *in situ* de divers composés ternaires et quaternaires sont collectées. L'objectif du chercheur postdoctoral à l'IMN sera de développer des outils pour analyser automatiquement les séquences de cristallisation afin d'identifier les phases connues et inconnues et d'utiliser des algorithmes de machine learning pour aider les chimistes à synthétiser de nouveaux matériaux purs.

## Activités

Le postdoc sera en charge de la mise en place d'outils de machine learning pour la diffraction des rayons X. Cela impliquera :

- Le développement d'outils pour l'identification automatique des diagrammes de diffraction de chaque phases présentes dans une séquence de cristallisation en utilisant la factorisation par matrices non négatives et le clustering.
- L'identification et quantification automatisée de ces phases.
- L'utilisation d'algorithmes de deep learning de type LSTM et l'optimisation Bayésienne pour guider la synthèse de matériaux purs.

## Compétences attendues

Qualifications de base :

- Doctorat en science des matériaux, chimie, physique ou sciences computationnelles
- Expérience avec les techniques de science des rayons X (par exemple, tomographie, diffraction, etc.).
- Pratiques et techniques de développement logiciel pour les problèmes scientifiques computationnels et intensifs en données.
- Expérience complète en programmation en Python.
- Compétences en communication, capacité à communiquer efficacement avec les collaborateurs internes et externes et aptitude à travailler en équipe.

Qualifications souhaitées :

- Expérience avec les méthodes de machine learning et les frameworks de deep learning.
- Expérience en machine learning appliqué (par exemple, des projets réussis ayant utilisé le ML pour résoudre des problèmes scientifiques).
- Expérience et compétences en recherche interdisciplinaire impliquant des informaticiens et des chimistes/physiciens.

## Contexte de travail

L'Institut des Matériaux de Nantes Jean Rouxel (<https://www.cnrs-imn.fr/>) rassemble plus de 150 chercheurs et doctorants. À travers la conception et la caractérisation de nouveaux matériaux, la démarche du laboratoire

conduit à l'optimisation d'un large éventail de propriétés en vue d'applications, telles que les cellules photovoltaïques, les piles à combustibles, les batteries pour véhicules électriques, les nanotechnologies ou encore les matériaux pour l'optique tels que les LEDs. L'équipe MIOPS dans laquelle s'effectuera le travail est spécialisée en synthèse et caractérisation de matériaux inorganiques et hybrides organique-inorganique avec des propriétés optiques, optoélectroniques, ou magnétiques. Le contrat est financé par le PEPR DIADEM.

**Salaire**

Entre 3021€ (sans expérience) et 4208€ (jusqu'à 7ans d'expérience) brut mensuel, selon expérience.

**Durée**

Minimum 18 mois.

**Contact**

David Berthebaud (David.BERTHEBAUD@cnsr-immn.fr)

Romain Gautier (Romain.Gautier@cnsr-immn.fr)

Olivier Hernandez (Olivier.HERNANDEZ@cnsr-immn.fr)