

Approche hybride par intelligence artificielle et modélisation physique pour l'analyse ellipsométrique en temps réel de matériaux nanostructurés et complexes

Projet : IA Cluster ENACT AMI Thèse IA – Lorraine Nord

Thématique d'excellence : IA Pour l'ingénierie et la découverte scientifique

Contact : yann.battie@univ-lorraine.fr

Contexte scientifique :

Le Laboratoire de Chimie Physique – Approche Multi-échelles des Milieux Complexes (LCP-A2MC) de Metz dispose d'une plateforme ellipsométrique de pointe, couvrant un large domaine spectral de l'ultraviolet à l'infrarouge lointain (250 nm à 35 μm). Cette plateforme permet la caractérisation précise de matériaux complexes tels que les films minces, les nanostructures et les matériaux chiraux, en mesurant des propriétés optiques comme l'indice de réfraction, l'épaisseur, la rugosité, les fonctions diélectriques ou les réponses plasmoniques.

Des études récentes menées par notre groupe ont démontré l'efficacité de l'utilisation de réseaux de neurones artificiels pour l'analyse rapide des données ellipsométriques, notamment dans la caractérisation de films nanocomposites [1-3]. L'intégration de l'IA dans ce domaine offre des perspectives prometteuses pour l'automatisation et l'amélioration de la précision des analyses.

L'objectif de cette thèse est de concevoir une approche hybride combinant intelligence artificielle (IA) et modélisation physique afin de renforcer l'interprétation automatique des données issues de l'ellipsométrie spectroscopique. Cette approche reposera sur le développement d'algorithmes d'apprentissage automatique, notamment des réseaux de neurones profonds, capables d'analyser des données complexes tout en tenant compte des variations spectrales et angulaires inhérentes aux mesures. Ces modèles seront entraînés sur des bases de données mixtes, composées de spectres simulés et expérimentaux, puis couplés à des modèles physiques classiques (Cauchy, Tauc-Lorentz, Drude, EMA) afin de guider ou contraindre l'apprentissage et garantir la validité physique des prédictions. Une phase clé consistera à générer une base de données de simulations ellipsométriques, en explorant un large éventail de paramètres optiques, géométriques et matériaux, tout en incluant les effets d'anisotropie, de rugosité, de structuration chirale ou multicouche. Les modèles d'IA développés permettront ensuite d'automatiser la modélisation inverse, c'est-à-dire l'extraction rapide et fiable des paramètres caractéristiques des matériaux (indices optiques, épaisseurs, porosité, etc.) à partir de spectres mesurés, avec une évaluation comparative des performances par rapport aux méthodes traditionnelles d'ajustement non linéaire (par exemple, Levenberg-Marquardt). Cette méthodologie sera appliquée à la caractérisation en temps réel de matériaux nanostructurés et chiraux étudiés au sein du LCP-A2MC, et portera

sur des systèmes variés tels que des films nanocomposites dopés, des couches chirales obtenues par GLAD, des matériaux bio-inspirés ou encore des structures plasmoniques. Une attention particulière sera portée à la validation expérimentale, en comparant les résultats issus de l'IA aux analyses traditionnelles pour en évaluer la robustesse, la précision et la capacité à détecter des caractéristiques subtiles, comme les singularités dans les spectres optiques. Enfin, les retours issus des modèles permettront d'optimiser les protocoles expérimentaux de synthèse des structures des matériaux et d'analyse, en adaptant les conditions de mesure pour maximiser la qualité des données acquises et améliorer la caractérisation globale des matériaux.

Ce travail sera réalisé au laboratoire LCP-A2MC de l'université de Lorraine sous la direction de Yann BATTIE et de Aotmane En Naciri. Le ou la candidat(e) devra être titulaire d'un Master 2 ou d'un diplôme d'ingénieur en physique, science des matériaux, optique, nanosciences ou intelligence artificielle appliquée aux sciences physiques. Une formation interdisciplinaire incluant le traitement de données, la modélisation physique et les méthodes numériques sera fortement valorisée. Le profil recherché combine une solide compréhension de l'optique et des matériaux, ainsi qu'un intérêt avéré pour l'intelligence artificielle appliquée. Des connaissances en modèles ellipsométriques seraient un plus, tout comme un goût prononcé pour l'expérimentation et la modélisation.

[1] Battie, Y., Valero, A. C., Horwat, D., & Naciri, A. E. (2022). Rapid ellipsometric determination and mapping of alloy stoichiometry with a neural network. *Optics Letters*, 47(8), 2117-2120.

[2] Mansour, Y., Battie, Y., En Naciri, A., & Chaoui, N. (2019). Artificial neural network for the classification of nanoparticles shape distributions. *Optics Letters*, 44(13), 3390-3393.

[3] Kfoury, P., Battie, Y., Naciri, A. E., Voue, M., & Chaoui, N. (2024). Rapid ellipsometric imaging characterization of nanocomposite films with an artificial neural network. *Optics Letters*, 49(3), 574-577.