

ANNEXE

Stages d'été 2026 à l'Institut Courtois

Stage 1

Superviseur : Olivier Fontaine, Département de chimie

Titre : Prédire les propriétés de surface à partir de données de « stylo électrochimique » par modélisation et IA

Les propriétés d'une surface (composition, hétérogénéité, état d'oxydation, mouillabilité, activité électrochimique) gouvernent des phénomènes clés en électrochimie. Notre laboratoire développe un nouveau concept de "stylo électrochimique", un dispositif permettant de réaliser des mesures électrochimiques locales et rapides sur une surface, en générant des cartographies expérimentales riches mais difficiles à interpréter directement. Pour exploiter pleinement ces données, il est nécessaire de relier les signatures électrochimiques aux propriétés physico-chimiques de la surface.

Dans ce projet, l'étudiant(e) construira un pipeline de modélisation et d'apprentissage automatique pour prédire des propriétés de surface à partir des signaux du stylo électrochimique. L'étudiant(e) sera encadré(e) par un postdoctorant, à l'interface chimie–physique–données, avec un objectif concret : transformer un instrument émergent en outil de diagnostic quantitatif des surfaces.

Stage 2

Superviseur : Alex Hernandez-Garcia, Département d'informatique et recherche opérationnelle

Titre : Apprentissage automatique génératif pour la découverte de matériaux

L'intelligence artificielle et l'apprentissage automatique offrent la possibilité d'accélérer la découverte de nouveaux matériaux fonctionnels pour la durabilité. Récemment, un groupe de recherche interdisciplinaire, de Mila et de l'Institut Courtois a développé CrystalGFN, un modèle génératif de structures cristallines intégrant des connaissances en cristallographie et en physique afin de guider la génération de matériaux présentant des propriétés et des contraintes désirables. Après des résultats prometteurs sur des tâches synthétiques, l'objectif est d'étendre le modèle pour répondre aux besoins de la découverte de matériaux, notamment pour la conception d'électrocatalyseurs et la découverte de nouveaux électrolytes solides pour les batteries tout-solide. Ce stage s'adresse à des étudiant(e)s ayant un solide bagage en apprentissage automatique et en programmation.

Stage 3

Superviseur : Carlos Silva, Département de physique

Titre : Calcul performant de dynamiques quantiques avec des réseaux de neurones tensoriels

À des échelles de temps de l'ordre du millionième de milliardième de seconde, le comportement de la matière est fortement quantique. Notre laboratoire cherche à comprendre comment les propriétés macroscopiques émergent de ce comportement sous l'effet de stimuli lumineux ultrarapides. Pour interpréter ces expériences, il est nécessaire de simuler la dynamique quantique de la matière après son interaction avec ces flashes lumineux. Dans ce projet, l'étudiant(e) contribuera à rendre ces modélisations beaucoup plus performantes grâce à des outils d'intelligence artificielle, notamment les réseaux de neurones tensoriels. L'étudiant(e) sera supervisé(e) par un professionnel de recherche expérimenté et un doctorant, au sein d'un groupe de recherche dynamique, expérimental et théorique.

Stage 4

Superviseur : William Witczak-Krempa, Département de physique

Titre : Transitions de phase induites par la mesure dans les architectures quantiques

Les transitions de phase induites par la mesure constituent une nouvelle classe de transitions hors équilibre, où la nature même des mesures en physique quantique joue un rôle central. Les spins ou qubits sont soumis à une excitation périodique alternant évolution unitaire et mesures. La transition est contrôlée par la fraction de spins mesurés. À faible taux de mesure, l'évolution engendre de nombreuses interactions menant à une décohérence locale (« scrambling »). À l'autre extrême, des mesures très fréquentes détruisent l'intrication. Un nouvel état de la matière émerge entre ces deux régimes. Des études préliminaires montrent que l'étendue spatiale de l'intrication près de la transition dépasse largement celle observée à l'équilibre. Le stagiaire étudiera la nature de l'intrication en fonction de la fraction de spins mesurés et utilisera des méthodes d'apprentissage automatique pour identifier des schémas de mesure optimaux pour l'intrication multipartite. Le projet pourra inclure l'exécution de circuits quantiques sur du matériel quantique réel.

Stage 5

Superviseur : Audrey Laventure, Département de chimie

Titre : Mise en place d'une méthodologie de standardisation des données issues de la conception automatisée de cellules tandem photovoltaïques

L'objectif général du projet est d'accélérer le criblage d'un large éventail de paramètres de procédés afin de permettre la fabrication de cellules photovoltaïques tandem à haute performance. Le projet repose sur une plateforme robotisée intégrant des outils d'intelligence artificielle pour mettre en place une boucle de rétroaction appuyée par une base de données dédiée contenant les paramètres de fabrication ainsi que les propriétés et performances résultantes des dispositifs. Le stage vise à établir une méthodologie de standardisation des données multimodales générées afin de contribuer à la création de cette base de données.

Stage 6

Superviseur : François Schiettekatte, Département de physique

Titre : Modèle d'IA des effets des collisions multiples et du pile-up en spectrométrie de rétrodiffusion Rutherford

La spectrométrie de rétrodiffusion Rutherford (RBS) consiste à bombarder un matériau avec des atomes accélérés par des millions de volts et à mesurer l'énergie des atomes rétrodiffusés afin d'en déterminer la composition, notamment pour des couches minces et des nanomatériaux. Bien que les principes de base soient simples et qu'un spectre puisse être simulé en quelques millisecondes, la prise en compte d'effets comme les collisions multiples et le pile-up peut porter le temps de simulation à plusieurs minutes, voire heures. Cela ralentit considérablement la constitution d'ensembles de données d'entraînement réalistes pour des réseaux neuronaux destinés à interpréter des milliers de mesures. L'objectif du projet est d'évaluer la possibilité de créer un modèle d'IA, à partir de données expérimentales et de simulations, capable de reproduire ces effets complexes et de générer des simulations réalistes en un temps réduit.

Stage 7

Superviseur : Houari Sahraoui, Département d'informatique et recherche opérationnelle

Titre : Exploration adaptative des paramètres d'un canon plasma par GFlowNets

Ce stage vise à adapter les GFlowNets, une approche d'apprentissage par renforcement, afin d'explorer efficacement l'espace des paramètres d'un canon plasma dans le but de modifier les propriétés physico-chimiques d'un matériau selon des objectifs prédéfinis. L'étudiant(e) développera une méthode combinant des approches fondées sur des données expérimentales et des modèles théoriques du procédé plasma. Cette hybridation permettra d'accélérer l'apprentissage, de guider l'exploration vers les paramètres les plus prometteurs et d'optimiser le procédé tout en réduisant le nombre d'expériences nécessaires.

Stage 8

Superviseur : Mickael Dollé, Département de chimie

Titre : Automatisation d'une technique de caractérisation haut débit pour la synthèse haut débit de matériaux

La synthèse haut débit de matériaux fonctionnels nécessite des techniques de caractérisation rapides permettant d'identifier les compositions d'intérêt. L'objectif de ce stage est d'automatiser, sous Linux, l'ensemble de la chaîne allant de la collecte de données à la gestion des calculs sur un serveur local pour une technique d'analyse de changement de phase parallélisée à l'aide d'une caméra thermique.

Stage 9

Superviseur : Antonella Badia, Département de chimie

Titre : Développement d'un co-scientifique IA pour assister les utilisateurs lors de mesures en microscopie à sonde locale

Ce projet constitue la première composante d'un co-scientifique IA destiné à guider les utilisateurs dans la réalisation d'expériences de microscopie à sonde locale (SPM). Il porte sur le développement d'un modèle de langage multimodal de grande taille (MLLM) intégrant une expertise spécifique à la SPM et interagissant de manière naturelle avec les usagers. L'étudiant(e) évaluera la capacité de différents LLMs à intégrer des données textuelles et visuelles issues de l'environnement de microscopie, incluant manuels d'instrumentation, protocoles et fichiers journaux (texte), ainsi que captures d'interface, images de

microscopie et spectres (visuel). Cette analyse visera à identifier l'architecture la plus robuste pour l'assistance en temps réel et la recommandation de conditions de mesure adaptées.

Stage 10

Superviseur : Pierre-Luc Bacon, Département d'informatique et recherche opérationnelle

Titre : Découverte de réfrigérants à faible impact climatique par modèles de langage et apprentissage par renforcement

Les réfrigérants utilisés en climatisation et en réfrigération contribuent fortement au réchauffement climatique, d'où la nécessité de développer des alternatives plus durables. Ce stage s'appuie sur Refgen, une chaîne existante de génération de molécules combinant apprentissage automatique et contraintes issues de la physique. L'objectif est d'améliorer la qualité des molécules proposées, en particulier leur stabilité et leur synthétisabilité, tout en conservant de bonnes propriétés thermodynamiques. Le travail portera sur la préparation et l'enrichissement des données, l'ajout de nouveaux critères et prédictors (stabilité, faisabilité de synthèse), et leur intégration dans les processus d'optimisation. Une attention particulière sera accordée à l'évaluation à l'aide de modèles thermodynamiques et de simulations de cycles frigorifiques.

Stage 11

Superviseur : Delphine Bouilly, Département de physique

Titre : Analyses de corrélations dans l'assemblage de nanocapteurs en graphène

Nous développons des nanocapteurs à base de graphène (GFETs) pour la détection de biomarqueurs en médecine personnalisée. Ces capteurs étant assemblés à partir de procédés complexes, nous cherchons à comprendre l'influence du vaste espace des paramètres de fabrication sur leurs performances. Dans ce stage, l'étudiant(e) analysera des jeux de données existants issus de la microscopie, de la spectroscopie et de mesures électriques afin d'identifier des corrélations entre conditions de fabrication et performance, en utilisant des techniques de science des données, d'analyse d'images et d'apprentissage automatique. Ce stage s'adresse à des étudiant(e)s possédant de solides compétences en programmation, un intérêt pour la science des données et une curiosité pour des problématiques interdisciplinaires.

Stage 12

Superviseur : Will Skene, Département de chimie

Titre : Détection optique de gaz par nez électronique

Vous êtes-vous déjà demandé comment apprendre à une puce à « sentir » ? Rejoignez-nous pour construire un « nez électronique » de taille micrométrique capable de détecter des mélanges complexes de gaz. Vous concevrez des réseaux de polymères intelligents, les intégrerez dans des micropuces et lirez leurs signaux par voie optique, tout en développant des compétences en microfabrication, ingénierie des dispositifs et intelligence artificielle pour des applications concrètes de détection.

Stage 13

Superviseur : Kevin Wilkinson, Département de chimie

Titre : Apprentissage automatique et analyses multivariées avancées pour identifier les nanomatériaux manufacturés dans l'environnement

Notre groupe étudie la détection des nanoparticules fabriquées par l'humain dans l'environnement afin d'évaluer les risques environnementaux. Cette tâche est complexe, car ces particules sont extrêmement rares par rapport aux particules naturelles comme la poussière ou le sel marin. Nous collectons d'importants ensembles de données provenant de l'air, de l'eau et du sol à l'aide d'un instrument spécialisé mesurant la composition chimique de milliers de particules par minute. Nous utilisons un outil Python appelé *IsotopeTrack* pour analyser ces données. Le stage vise à améliorer ce logiciel en le rendant plus convivial et mieux structuré, en y ajoutant des analyses statistiques avancées, des visualisations de haute qualité et des outils d'apprentissage automatique pour identifier automatiquement les nanoparticules manufacturées.

Stage 14

Superviseure : Madisen Holbrook, Département de physique

Titre : Analyse et visualisation des données de structure électronique à l'échelle atomique dans les matériaux quantiques

Notre groupe utilise la microscopie à effet tunnel (STM) pour mesurer directement les propriétés électroniques et la structure à l'échelle atomique des matériaux, ce qui permet de visualiser le paysage électronique nanoscopique qui gouverne le comportement des particules dans les matériaux quantiques. Par exemple, les électrons se déplaçant dans un cristal peuvent se diffuser sur des imperfections atomiques,

produisant des motifs d'interférence qui peuvent être visualisés pour révéler les propriétés du matériau dans l'espace des moments.

Ces mesures génèrent des cartes spectrales bidimensionnelles des états électroniques permis en fonction de l'énergie et de la position, produisant ainsi de vastes ensembles de données spectroscopiques riches en information, qui nécessitent une analyse avancée.

Dans ce projet, l'étudiant développera des outils basés sur Python pour analyser et visualiser des données de spectroscopie STM acquises sur des matériaux quantiques. Le travail portera sur le traitement des mesures de spectroscopie, la construction de cartes spectrales bidimensionnelles et l'application de techniques basées sur la transformée de Fourier pour interpréter les interférences entre particules. L'étudiant travaillera avec de vraies données expérimentales et contribuera directement aux analyses utilisées dans des recherches en cours.

Ce stage convient particulièrement à un étudiant intéressé par la physique, la science des matériaux et l'informatique scientifique, et met l'accent sur l'acquisition de compétences pratiques en analyse de données et en visualisation scientifique.