DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **24 avril 2018**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **BONNAL Thomas**

Titre de la thèse : « Développements de modèles optiques et de méthodes non supervisées de résolution des problèmes bilinéaires : application à l'imagerie vibrationnelle »

Résumé

La caractérisation fine des matériaux inorganiques nécessite d'avoir accès à des informations complémentaires de celles apportées par des techniques d'analyse élémentaire ou de diffraction. La spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier permet de caractériser les liaisons covalentes et l'environnement des groupes fonctionnels dans les matériaux. C'est donc une technique de choix pour l'étude des matériaux hydratés, amorphes ou sujets à des phénomènes de vieillissement. En couplant cette technique à une platine de déplacement, il est possible de réaliser des cartographies des phases sur quelques centimètres carrés : c'est la microscopie infrarouge. Cette thèse développe plus particulièrement l'utilisation de la lumière réfléchie au travers de l'étude de la réflexion spéculaire et de la réflexion totale atténuée (ATR).

Après une première partie se focalisant sur les méthodes d'acquisitions disponibles, une seconde partie s'attache à obtenir de manière non supervisée les cartographies chimiques associées aux concentrations relatives des différents composants présents dans la zone analysée. Des techniques de réduction de données et d'analyse factorielle sont mises en place afin d'estimer le nombre de composants chimiques et leurs spectres relatifs ; des problèmes de minimisation sous contraintes sont résolus pour extraire l'information chimique.

La réflexion spéculaire ne nécessite aucun contact avec l'échantillon et, de ce fait, n'entraine aucune altération de la surface analysée. C'est sur le papier une technique de choix pour suivre l'évolution d'un matériau. Cependant, elle souffre de la complexité d'interprétation liée à l'allure des spectres obtenus. Afin de développer la cartographie issue de la réflexion spéculaire, des modèles prenant en compte l'optique géométrique, l'optique ondulatoire, des corrections d'interférogrammes et des méthodes classiques d'homogénéisation ont été développés. Ce travail a permis d'aboutir à un modèle optique liant les spectres issus de la réflexion spéculaire avec les concentrations relatives des composants. Ce modèle tient compte de la polarisation, de l'angle d'incidence et utilise les constantes diélectriques du matériau. Ce modèle a été validé sur un matériau contenant trois composants distincts facilement identifiables en infrarouge et spécialement mis en forme pour cette étude.

Ce modèle a ouvert la voie à l'utilisation innovante de lumières polarisées elliptiquement pour déterminer l'indice de réfraction complexe d'un matériau. Ainsi, des spectroscopes infrarouges couplés à un accessoire de contrôle de l'angle d'incidence peuvent être utilisés en complément de l'ellipsométrie.