

DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE LILLE 1 SCIENCES ET TECHNOLOGIES

N° d'ordre : 41924

NOM/PRENOM DU CANDIDAT : ABOU FADEL Maya

Ecole doctorale : Sciences de la matière, du rayonnement et de l'Environnement (SMRE)

Laboratoire : Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman (LASIR)

Discipline : Optique, Lasers, Physico-Chimie et Atmosphère

JURY :

- | | | |
|---------------------------|-----------------------|---|
| - Directeur(s) de thèse : | Dr. Ludovic DUPONCHEL | Professeur à l'Université de Lille, Directeur de la thèse |
| | Dr. Hervé VEZIN | DR CNRS, Co-Directeur de la thèse |
| - Rapporteurs : | Dr. Mario CHIESA | Professeur à l'Université de Turin |
| | Dr. Anna DE JUAN | Professeur à l'Université de Barcelone |
| | Dr. Sylvie CHOUA | MCF HDR à l'Université de Strasbourg |
| - Examineurs : | Dr. François TROMPIER | CR IRSN |
| | Dr. Douglas RUTLEDGE | Professeur à AgroParisTech |

SOUTENANCE : 3 décembre 2015, 10h, Amphi Lebon Polytech'Lille

TITRE DE LA THESE :

Apports de la chimométrie à la spectroscopie de Résonance Paramagnétique Electronique : nouvelles perspectives de traitement de données spectrales à dimensions spatiales (imagerie) et / ou temporelles.

RESUME :

La spectroscopie de Résonance Paramagnétique Electronique (RPE) est incontestablement devenue une technique de choix pour la caractérisation des matériaux complexes quand ceux-ci possèdent des électrons non appariés (ions de transitions, terres rares, défauts, radicaux organiques...). A l'instar de la résonance magnétique nucléaire, la RPE génère des données spectrales multidimensionnelles (2D, 3D...) et depuis peu une imagerie spatiale mais aussi spectrale/spatiale. Il est ainsi étonnant de voir que malgré la grande quantité de données spectrales à explorer et la complexité des signaux RPE, il n'existe quasiment pas au niveau international d'exploitation des méthodes de traitements de données multivariées, méthodes largement proposées en chimométrie. L'objectif de cette thèse est ainsi de développer de nouveaux outils pour le traitement de ces données spectrales RPE, d'établir de nouvelles méthodologies d'analyse et d'en évaluer leurs performances. Les deux axes principalement étudiés seront l'imagerie spectroscopique et la spectroscopie résolue en temps. Nous démontrerons dans ce travail que la mise en œuvre de méthodes dites de «résolutions multivariées de courbes» permet d'extraire simultanément et sans a priori toutes les cartographies chimiques et les spectres associés des composés purs présents dans l'échantillon étudié. Cette méthodologie sera aussi exploitée afin d'extraire les spectres RPE d'espèces intermédiaires lors d'un suivi cinétique.