

## Offre de Stage en Data Science et Intelligence Artificielle pour la Recherche de Nouveaux Matériaux Semi-conducteurs pour l'Énergie

### Contexte :

L'Institut des Matériaux de Nantes Jean Rouxel (IMN) et le Laboratoire des Sciences du Numérique (LS2N) s'associent pour proposer un stage de six mois dans le domaine de la recherche de nouveaux matériaux semi-conducteurs pour l'énergie. Ce projet vise à combiner l'expertise de l'IMN en matière de machine learning pour la découverte de nouveaux matériaux avec les compétences reconnues du LS2N dans le domaine des réseaux profonds, notamment les Graph Neural Networks (GNN).

**Durée :** 6 mois

**Période :** février/mars à Juillet/aout 2024

### Sujet :

Le projet s'appuiera sur les avantages des Graph Neural Networks (GNN), des algorithmes d'apprentissage automatique capables d'analyser des structures de réseaux complexes, telles que les structures atomiques des matériaux. La collecte de données sur les propriétés de différents matériaux semi-conducteurs permettra de former un modèle GNN pour prédire leurs propriétés en fonction de leur structure atomique. Plus précisément, chaque atome sera représenté en tant que nœud du graphe, et les liaisons entre les atomes seront représentées par les arêtes. Cette représentation graphique des structures atomiques des matériaux sera utilisée comme entrée pour le modèle GNN. La sortie du réseau sera la prédiction des propriétés des matériaux semi-conducteurs associées à ces structures atomiques. Cette approche novatrice permettra d'identifier rapidement des candidats prometteurs pour des matériaux semi-conducteurs adaptés aux applications photovoltaïques et thermoélectriques.

### Profil Recherché :

Étudiant(e) en Master 2 ou en 5ème année de cursus ingénieur avec une spécialisation en Data Science, Intelligence Artificielle, Machine Learning, ou domaine connexe. Une connaissance préalable en science des matériaux serait un atout. Compétences requises en programmation, notamment en Python, et une bonne compréhension des concepts liés aux réseaux profonds.

### Lieu du Stage :

Le stage se déroulera à Nantes entre l'IMN (Encadrants : David Berthebaud et Romain Gautier) et le LS2N (Encadrant : Harold Mouchère), offrant ainsi une opportunité unique de travailler au sein de deux institutions de recherche de premier plan.

### Candidature :

Envoyez votre CV, et lettre de motivation à [david.berthebaud@cnr-s-imn.fr](mailto:david.berthebaud@cnr-s-imn.fr) et [harold.mouchere@univ-nantes.fr](mailto:harold.mouchere@univ-nantes.fr).

## Internship Offer in Data Science and Artificial Intelligence for the Discovery of New Semiconductor Materials for Energy

### Context:

The Jean Rouxel Institute of Materials in Nantes (IMN) and the Laboratory of Digital Sciences (LS2N) are joining forces to propose a six-month internship in the field of researching new semiconductor materials for energy. This project aims to combine the expertise of IMN in machine learning for the discovery of new materials with the recognized skills of LS2N in the field of deep networks, including Graph Neural Networks (GNN).

**Duration:** 6 months

**Period:** February/March to July/August 2024

### Subject:

The project will leverage the advantages of Graph Neural Networks (GNN), machine learning algorithms capable of analyzing complex network structures, such as the atomic structures of materials. Collecting data on the properties of different semiconductor materials will be used to train a GNN model to predict their properties based on their atomic structure. Specifically, each atom will be represented as a node in the graph, and the connections between atoms will be represented by edges. This graphical representation of atomic structures will be used as input for the GNN model. The network's output will be the prediction of semiconductor material properties associated with these atomic structures. This innovative approach will enable the rapid identification of promising candidates for semiconductor materials suitable for photovoltaic and thermoelectric applications.

### Profile Sought:

Master's level student or 5th-year engineering student specializing in Data Science, Artificial Intelligence, Machine Learning, or a related field. Prior knowledge in materials science would be an asset. Required programming skills, especially in Python, and a good understanding of concepts related to deep networks.

### Internship Location:

The internship will take place in Nantes, bridging IMN (Supervisors: David Berthebaud and Romain Gautier) and LS2N (Supervisor: Harold Mouchère), providing a unique opportunity to work within two leading research institutions.

### Application:

Send your CV and motivation letter to [david.berthebaud@cnrns-imn.fr](mailto:david.berthebaud@cnrns-imn.fr) and [harold.mouchere@univ-nantes.fr](mailto:harold.mouchere@univ-nantes.fr).