UNIVERSITÉ D'ARTOIS

# Avis de Soutenance

## Monsieur Elohan VEILLON

## Molécules et Matière Condensée

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés
*Conception de modèles génératifs à base de diffusion pour la découverte de nouvelles structures cristallographiques*

Travaux dirigés par Monsieur Adlane SAYEDE et Monsieur Zied BOURAOUI

Soutenance prévue le ***vendredi 27 novembre 2026*** à 14h00
Lieu : Université d'Artois Faculté des Sciences Jean Perrin Bâtiment B, 2e étage Rue Jean Souvraz 62300 Lens
Salle : des Thèses

**Composition du jury proposé**

| | | |
|---|---|---|
| M. Adlane SAYEDE | Université d'Artois | Directeur de thèse |
| Mme Houria KABBOUR | Nantes Université | Rapporteure |
| M. Miguel COUCEIRO | Universidade de Lisboa | Rapporteur |
| M. Zied BOURAOUI | Université d'Artois | Co-directeur de thèse |
| M. Marc PLANTEVIT | EPITA Research Laboratory (LRE) | Examinateur |
| M. David DELL'ANGELO | Université d'Artois | Examinateur |
| Mme Astrid KLIPFEL | Université d'Artois | Invitée |

**Résumé :**

Afin de mieux lutter contre l'urgence du réchauffement climatique, une attention croissante est attelée a accélérer le développement de nouveaux matériaux possédant des propriétés spécifiques comme les semi-conducteurs et la catalyse hétérogène. Une voie prometteuse pour la production d'énergie est de passer des énergies fossiles à la production d'hydrogène vert via la photocatalyse, cependant les photocatalyseurs connus pour cette tâche sont encore trop peu efficaces. Pour accélérer la découverte de nouveaux photocatalyseurs, des modèles d'IA générative sont développés pour réaliser la tâche de design inverse consistant à proposer des nouveaux matériaux candidats à partir de propriétés ciblées. Cependant, les métriques utlisées pour évaluer et comparer les performances des modèles ne sont pas standardisées dans la communauté, ce qui conduit à des incohérences et des biais dans les évaluations, ralentissant les progrès du domaine. Les objectifs de cette thèse sont de développer une librairie qui rassemble les métriques les plus populaires et évalue leur comportement pour différencier celles qui réalisent des mesures de bonne qualité et ouvrir la voie vers la construction d'un ensemble de métriques standards pour la génération de nouveaux matériaux, et de proposer un nouveau chemin de recherche dans la conception de modèles génératifs qui pourrait résoudre certaines des limites majeures de l'état de l'art actuel.