



## Ecole Doctorale - 104

Sciences de la Matière, du Rayonnement  
et de l'Environnement

**ETABLISSEMENT : Université de Lille**

**Laboratoire(s) de Rattachement :** Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS) et Centre de Recherche Lille Neuroscience et Cognition (LiNCog)

**Domaine scientifique, Spécialité :**

**DS4 | Chimie des matériaux**

**Direction de thèse :** LAFON Olivier, professeur Univ. Lille, olivier.lafon@univ-lille.fr

**Co-direction :** LOPES Renaud, maître de conférences praticien hospitalier Univ. Lille, renaud.lopes@univ-lille.fr

**Titre de la thèse : Accroître la résolution des spectres RMN de liquides et de solides grâce à l'apprentissage automatique entraîné sur des données RMN à très hauts champs**

### SUJET DE THESE (environ 1/2 page)

Ces dernières années, le développement d'aimants RMN produisant des champs magnétiques d'intensité supérieure à 23 T pour lesquels la fréquence de Larmor des protons,  $\nu^0(^1\text{H})$ , dépasse 1 GHz, a permis d'enregistrer des spectres RMN avec une résolution inégalée, permettant de distinguer des environnements chimiques proches dans les molécules ou les matériaux. Ce gain en résolution est particulièrement utile pour déterminer la structure à l'échelle atomique de macromolécules biologiques, telles que les protéines, ou de matériaux inorganiques et hybrides contenant des noyaux quadripolaires de spin  $I \geq 1$ , tels que  $^{27}\text{Al}$  ou  $^{17}\text{O}$ . Cependant, un frein à l'utilisation de la spectroscopie RMN à ultra hauts champs est le coût élevé des aimants RMN capables de produire des champs magnétiques supérieurs à 23 T. Du fait de ce coût élevé, le nombre d'aimants RMN ultra-hauts champs est beaucoup plus faible que celui d'aimants à plus bas champ.

L'objectif de ce sujet de thèse est d'explorer comment les gains en résolution obtenus grâce aux spectromètres RMN à ultra-hauts champs peuvent être transférés vers des spectres enregistrés à plus bas champs grâce à l'utilisation d'outils basés sur l'apprentissage automatique (*machine learning, deep learning*). Cette approche nécessite d'entraîner des outils d'apprentissage automatique sur des jeux de données RMN simulés et expérimentaux obtenus à différents champs magnétiques allant de 9,4 à 28,2 T (soit  $400 \text{ MHz} \leq \nu^0(^1\text{H}) \leq 1,2 \text{ GHz}$ ). Elle sera testée sur différents types d'échantillons, tels que des protéines ou des petites molécules en solution mais également des matériaux inorganiques et hybrides contenant des noyaux quadripolaires. Ce projet bénéficiera de la présence à Lille de spectromètres RMN avec différents champs et notamment d'un spectromètre RMN 1,2 GHz unique en France.

**Date de recrutement envisagée : 01/10/2026**

**Contact (adresse e-mail) :** [olivier.lafon@univ-lille.fr](mailto:olivier.lafon@univ-lille.fr), [renaud.lopes@univ-lille.fr](mailto:renaud.lopes@univ-lille.fr)

**Remarques/commentaires supplémentaires :** Thèse financée par l'initiative d'excellence de l'Université de Lille dans le cadre du projet interdisciplinaire IMMENSE





**Ecole Doctorale - 104**

Sciences de la Matière, du Rayonnement  
et de l'Environnement

**INSTITUTION:** University of Lille

**Laboratory(s) to which they are attached :** Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS) et Lille Neuroscience & Cognition (IEMN)

**Scientific field, Specialty :**

**DS4 | Materials Chemistry**

**Thesis supervision :** LAFON Olivier, professor Univ. Lille, olivier.lafon@univ-lille.fr

**Co-supervision :** LOPES Renaud, associate professor Univ. Lille, renaud.lobes@univ-lille.fr

**Thesis title: Enhancing the resolution of NMR spectra of liquids and solids using machine learning trained on very high field NMR data**

**THESIS SUBJECT (about 1/2 page)**

In recent years, the advent of NMR magnets producing magnetic fields higher than 23 T, in which Larmor frequency,  $\nu^0(^1\text{H})$ , exceeds 1 GHz, has enabled the acquisition of NMR spectra with unparalleled resolution, allowing to separate similar chemical environments in molecules or materials. This gain in resolution is particularly useful for determining the atomic-scale structure of biological macromolecules, such as proteins, or inorganic and hybrid materials containing quadrupolar nuclei, such as  $^{27}\text{Al}$  or  $^{17}\text{O}$ . However, the use of ultra-high field NMR spectroscopy is limited by the cost of NMR magnets producing magnetic fields higher than 23 T. Owing to this high cost, the number of ultra-high field NMR magnets is much scarcer than that of lower field magnets.

This project aims at exploring how the resolution gains obtained with ultra-high field NMR spectrometers can be transferred to spectra recorded at lower fields through the use of machine learning-based tools. This approach requires training machine/deep learning tools on simulated and experimental NMR datasets obtained at different magnetic fields ranging from 9.4 to 28.2 T (i.e.,  $400 \text{ MHz} \leq \nu^0(^1\text{H}) \leq 1.2 \text{ GHz}$ ). It will be tested on different types of samples, such as proteins or small molecules in solution, as well as inorganic and hybrid materials containing quadrupolar nuclei. This project will benefit from the presence in Lille of NMR spectrometers with different fields, including a 1.2 GHz NMR spectrometer that is unique in France.

**Planned recruitment date:** 01/10/2025

**Contact (email address) :** [olivier.lafon@univ-lille.fr](mailto:olivier.lafon@univ-lille.fr), renaud.lobes@univ-lille.fr

**Additional Notes/Comments:** Thesis funded by the University of Lille's Excellence Initiative as part of the IMMENSE interdisciplinary project

