



## Avis de Soutenance

Monsieur Mohamed Amine LAHLOU NABIL

Présentera ses travaux en soutenance

Soutenance prévue le **mercredi 08 décembre 2021** à 14h00  
Lieu : UTBM site de Sevenans, Rue de Leupe, 90400, SEVENANS  
Salle : Grand Salon (Château)

Titre des travaux : Matériaux nanostructurés à base d'hydrures métalliques pour le stockage d'hydrogène dédiés aux véhicules électriques équipés de pile à combustible.

Ecole doctorale : SPIM - Sciences Physiques pour l'Ingénieur et Microtechniques

Section CNU : 33

Unité de recherche : Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne

Directeur de thèse : Nour-Eddine FENINECHE

Codirecteur de thèse : IOANA POPA  HDR  NON HDR

Soutenance :  Publique  A huis clos

Membres du jury :

<u>Nom</u>	<u>Qualité</u>	<u>Etablissement</u>	<u>Rôle</u>
M. Nour-Eddine FENINECHE	Professeur des universités	Université Bourgogne - Franche-Comté	Directeur de thèse
M. Youcef BOUHADDA	Directeur de recherche	Unité de recherche appliquée en énergie renouvelable	Examineur
M. Joan Josep SUNYOL	Professeur des universités	Universitat de Girona	Examineur
Mme Ioana POPA	Maîtresse de conférences	Université de Bourgogne Franche-comté	Co-directrice de thèse
M. Gilles CABOCHE	Professeur des universités	Université de bourgogne	Examineur
M. Chokri KHALDI	Professeur	ENSIT Université de Tunis	Rapporteur
M. Mohamed BOUOUDINA	Professeur	University of Bahrain	Rapporteur
M. Omar EL KEDIM	Professeur des universités	UTBM	Examineur

**Mots-clés :** Sorption/désorption, Nanostructures, Stockage d'hydrogène, Hydrures métalliques, Calculs DFT, Méthodes sol gel,

## Résumé de la thèse (en français) :

Le développement de l'hydrogène comme vecteur énergétique du 21<sup>ème</sup> siècle dépend fortement des performances de stockage. Aujourd'hui, plusieurs solutions sont envisagées pour stocker l'hydrogène. Chaque solution présente des avantages et des inconvénients selon certains critères : la masse, la capacité de stockage, la sécurité, la cinétique de la charge/décharge, etc. Pour les systèmes embarqués, un mode de stockage approprié est basé sur l'utilisation de matériaux solides, dont certains peuvent absorber l'hydrogène d'une manière réversible sous certaines conditions de température et de pression, pour former des hydrides. Ce mode est prometteur car les densités d'hydrogène stocké sous cette forme peuvent atteindre des valeurs supérieures à celles de l'hydrogène liquide. En plus de leurs propriétés de stockage, ces composés ont la capacité de convertir l'énergie chimique en chaleur en offrant une large gamme d'applications dans le domaine des pompes à chaleur. Pour rendre attractive cette technique de stockage, nous devons innover sur certains points, qui freinent le développement des matériaux comme l'amélioration de la capacité de stockage, les techniques d'élaboration, etc. Une bonne connaissance des paramètres structuraux de l'hydride est requise pour une bonne gestion de l'énergie échangée entre les piles à combustible et un réservoir d'hydride pour une application de véhicule. Les principaux objectifs de cette thèse sont les suivants : Le développement de nouveaux hydrides métalliques pour les réservoirs d'hydrogène. Pour cela, l'étude et le développement de nouveaux matériaux pour le stockage de l'hydrogène peuvent se faire à un niveau fondamental en utilisant une simulation basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). L'analyse de la stabilité des systèmes étudiés est faite en utilisant l'approximation de gradient généralisée (GGA). D'un point de vue expérimental, la caractérisation des matériaux élaborés par différents procédés est faite en utilisant plusieurs techniques : analyse thermogravimétrique, microscopie électronique à balayage, la diffraction des rayons X combinée avec la méthode de Rietveld pour vérifier la réalisation de la structure et ensuite étudier la sorption et la désorption de l'hydrogène.

## Abstract (in English):

The development of hydrogen as an energy vector for the 21<sup>st</sup> century is highly dependent on storage performance. Today, several solutions are being considered for storing hydrogen. Each solution has advantages and disadvantages according to certain criteria: mass, storage capacity, safety, charge / discharge kinetics, etc. For embedded systems, a suitable storage method is based on the use of solid materials, some of which can absorb hydrogen in a reversible manner under certain temperature and pressure conditions, to form hydrides. This mode is promising because the densities of hydrogen stored in this form can reach values higher than those of liquid hydrogen. In addition to their storage properties, these compounds have the ability to convert chemical energy into heat, offering a wide range of applications in the field of heat pumps. To make this storage technique attractive, we must innovate on certain points, which slow down the development of materials such as improving storage capacity, production techniques, etc. A good knowledge of the structural parameters of the hydride is required for a good management of the energy exchanged between the fuel cells and a hydride tank for a vehicle application. The main objectives of this thesis are: The development of new metal hydrides for hydrogen tanks. For this, the study and development of new materials for hydrogen storage can be done at a fundamental level using a simulation based on density functional theory (DFT). The analysis of the stability of the studied systems is made using the generalized gradient approximation (GGA). From an experimental point of view, the characterization of the materials produced by different processes is made using several techniques: thermogravimetric analysis, scanning electron microscopy, X-ray diffraction combined with the Rietveld method to verify the realization of the structure and then study the sorption and desorption of hydrogen.