



Bourse de thèse Université de Bourgogne Franche-Comté

Approche micro-macro des phénomènes liés au stockage d'hydrogène sous forme solide : application au développement d'hydrures propres

36 mois, à partir de septembre 2017

Salaire net mensuel ≈ 1400€ ou 1600€ avec une mission d'enseignement

Ecole Doctorale SPIM : Sciences Pour l'Ingénieur et Microtechniques

Institut FEMTO-ST

Thème de recherche M2SC au Département Mécanique Appliquée,

Dr. Anne Maynadier

03 81 66 60 76

Anne.Maynadier@univ-fcomte.fr

Dr HDR. David Chapelle

03 81 66 60 29

David.Chapelle@univ-fcomte.fr

Avant-propos :

Depuis 2015, le thème M2SC ('Méthodologie et expérimentation pour les Matériaux et les Structures en environnement Complexe') a rejoint FCLAB, pour y constituer l'axe 4 Stockage solide de l'hydrogène. La demande reçoit le soutien technique de l'entreprise MAHYTEC.

Mots Clés : stockage hydrogène, hydrure, morphologie, micro-structuration

Projet :

Le sujet de recherche que nous proposons est multidisciplinaire : Mécanique, Sciences des matériaux et Chimie. Il concerne la **compréhension fondamentale des mécanismes d'hydruration de matériaux intermétalliques** soumis à des conditions extérieures sévères que sont ici l'atmosphère hydrogène et les conditions de confinement sous pression et température. L'hydruration est le mécanisme induit par l'absorption (dissociation H₂, diffusion et positionnement sur les sites interstitiels) d'hydrogène au sein de la maille cristalline engendrant un changement de phase et une dilatation importante du matériau (jusqu'à 40%). Sous l'effet de la dilatation, le matériau décrépète et devient pulvérulent ; la poudre s'affine au cours des cycles (absorption-désorption) et la taille des particules décroît.

Le **stockage d'hydrogène sous forme solide** repose sur cette réaction de H₂ gazeux avec des poudres métalliques afin de former des hydrures et ce de manière réversible. Ces réactions sont exothermiques à l'absorption et endothermiques à la désorption. Le déploiement opérationnel et économiquement viable du vecteur hydrogène en stockage solide nécessite encore la levée de plusieurs verrous scientifiques sur lesquels travaille activement le thème M2SC du département Mécanique Appliquée du FEMTO-ST. L'optimisation d'un hydrure respectueux de l'environnement, la mise au point de son procédé d'élaboration et la prise en compte de son comportement thermomécanique dans la conception de son contenant sont notamment des points clés.

Sujet de thèse :

Le sujet proposé fait suite aux travaux de thèse de M. Ali Zeaiter (« Caractérisation d'alliages Ferro-Titane dédiés au stockage de l'hydrogène ; méthodologie d'accroissement des cinétiques de désorption ») dont la soutenance est prévue au printemps 2017. Ces travaux ont mis en exergue des problématiques plus amont qui doivent être abordées dans le programme de recherche détaillé ci-après.

Le projet de thèse a pour objectif global d'augmenter notre compréhension du lien entre



- la structure microscopique de l'hydrure (phases en présence, géométrie de la maille cristalline, endommagement),
- la morphologie mésoscopique de la poudre (taille et morphologie des grains, fissuration...),
- les capacités fonctionnelles de stockage (capacité maximale de stockage massique, cinétiques d'absorption/désorption, pressions et températures de travail, stabilité au cyclage)
- les champs mécaniques et thermiques vus par l'hydrure et son réservoir à l'échelle macroscopique (réaction exo/endo-thermique et fort changement de volume en espace confiné).

Chacun de ces items impacte fortement la conception et le développement de réservoirs de stockage d'hydrogène sous forme solide. Pourtant, ces aspects sont souvent étudiés de manière découplée, la raison essentielle étant qu'ils font appel à des compétences diverses : métallurgie, thermodynamique des changements de phases, mécanique des poudres, modélisation multi-échelle et multiphysique...

Le doctorant recruté dans le thème M2SC pourra, pour mener ce projet, s'appuyer sur les diverses compétences des membres de l'équipe. Le pôle « calcul scientifique » (Arnaud Lejeune) et le thème « Propriétés mécaniques des matériaux en couche minces » (Yves Gaillard) seront également sollicités pour le développement de modèles numériques et la caractérisation mécaniques aux faibles échelles respectivement. L'équipe a de plus récemment établi des contacts avec des membres du LERMPS à Montbéliard pour les aspects micro-caractérisation métallurgique (DRX in situ).

Le travail de thèse proposé, appliqué à un objectif industriel et un enjeu sociétal fort (stockage d'énergie propre), permettra à l'étudiant de travailler à la fois expérimentalement sur la caractérisation d'hydrure et numériquement à la modélisation et la simulation du comportement de l'hydrure, à l'échelle du cristal, du grain de poudre ou du réservoir entier. La problématique de couplages multi-physiques à toutes les échelles structure ce travail.

Le recrutement d'un doctorant en septembre 2017 interviendrait à un moment particulièrement opportun. En effet, l'étudiant pourra profiter du transfert de compétences d'Ali Zeaiter, Docteur dirigé par Ph. Nardin et D. Chapelle qui travaille actuellement comme post-doctorant sur la thématique.

Profil du candidat :

Le candidat, de niveau master, devra avoir une formation dans le domaine de la Mécanique et devra disposer des connaissances en mécanique des milieux continus et science des matériaux. Curieux et volontaire, le candidat devra s'investir sur le sujet afin d'acquérir les spécificités inhérentes aux matériaux intermétalliques, à leur étude et à leur caractérisation.

Compétences souhaitées : Cristallographie et/ou métallurgie du solide, mécanique du solide, thermique, instrumentation/expérimentation, modélisation et simulation numérique (Ansys, Comsol...), programmation (Matlab, Maple, Labview...) .

Bien sûr nous n'attendons pas de candidats possédant toutes ces compétences simultanément !

Collaborations : **MaHyTec** (Contact : Dominique PERREUX) : Créée en 2008, l'entreprise vise au développement de solution de stockage par voie solide et gazeuse de l'hydrogène. L'entreprise s'implique dans de nombreux projets de recherche de type partenarial, national mais aussi à l'international, pour promouvoir l'hydrogène et les matériaux composites en s'appuyant sur une solide expérience dans le domaine des matériaux. Elle apportera son soutien matériel (matière première...) et un regard industriel (faisabilité...) pour la partie applicative de ce travail.