

AVIS DE SOUTENANCE D'UNE THESE DE DOCTORAT

Le Directeur de l'Ecole Nationale des Sciences Appliquées a le plaisir d'informer le public

qu'une soutenance de thèse de Doctorat en

«**Sciences et ingénierie**»

aura lieu le 17/07/2026 à 10H30 à l'ENSA, Kénitra

La Thèse sera présentée par Mr REDDAD KAMAL

Sous le thème :

Theoretical study of the impact of vacancy defect and doping on MgH_2 : DFT, KMC, and TPD predictive modeling

Devant le jury composé de :

Nom et Prénom	Titre	Etablissement
EL GANAOUI MOHAMMED	Président	Université de Lorraine, France
BAHMAD LAHOUCINE	Rapporteur	Faculté des Sciences, Rabat
MOUNKACHI OMAR	Rapporteur	Faculté des Sciences, Rabat
SAAD AOUATIF	Rapporteur	ENSA, Kénitra
WEN CHEN	Examineur	Université de Lorraine, France
RMILI AHMED	Examineur	ENSA, Kénitra
MGHAIUINI REDOUANE	Invité	ENSA, Kénitra
LABRIM HICHAM	Co-Directeur de thèse	Faculté des Sciences, Rabat
EL BOUAYADI RACHID	Directeur de thèse	ENSA, Kénitra

Nom et Prénom : REDDAD KAMAL
Date de soutenance : 17/07/2026
Directeur de Thèse : EL BOUAYADI RACHID

Sujet de thèse :

Theoretical study of the impact of vacancy defect and doping on MgH_2 : DFT, KMC, and TPD predictive modeling

Résumé:

L'hydrogène est considéré comme un vecteur énergétique prometteur pour les futurs systèmes énergétiques durables. Parmi les matériaux de stockage solide de l'hydrogène, l'hydruure de magnésium (MgH_2) présente un intérêt particulier grâce à sa grande capacité de stockage, son faible coût et l'abondance du magnésium. Cependant, son utilisation pratique reste limitée par sa forte stabilité thermodynamique et ses faibles cinétiques de désorption de l'hydrogène.

Cette thèse étudie l'amélioration des propriétés de désorption du MgH_2 en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), la modélisation prédictive de la désorption programmée en température (TPD) et les simulations Monte Carlo cinétiques (KMC). Les effets du dopage par des métaux de transition (Cu, Zn, Rh et Mo) ainsi que des défauts de lacunes sur les propriétés structurales, électroniques, thermodynamiques et cinétiques du MgH_2 sont analysés.

Les résultats montrent que le Cu, le Rh et le Mo améliorent significativement la désorption de l'hydrogène en affaiblissant les liaisons Mg-H et en réduisant les énergies d'activation. Le modèle TPD reproduit fidèlement les profils expérimentaux, tandis que les simulations KMC confirment une libération plus rapide de l'hydrogène dans le système dopé au Rh.

Mots-clés: Hydruure de magnésium; hydrogène; KMC; DFT; TPD; stockage d'hydrogène

Abstract:

Hydrogen is considered a promising energy carrier for future sustainable energy systems. Among solid-state hydrogen storage materials, magnesium hydride (MgH_2) is attractive due to its high hydrogen capacity, low cost, and abundance. However, its practical application is limited by high thermodynamic stability and slow hydrogen desorption kinetics. This thesis investigates the improvement of MgH_2 desorption properties using Density Functional Theory (DFT), predictive Temperature Programmed Desorption (TPD) modeling, and Kinetic Monte Carlo (KMC) simulations. The effects of transition metal doping (Cu, Zn, Rh, and Mo) and vacancy defects on the structural, electronic, thermodynamic, and kinetic behavior of MgH_2 are analyzed. The results show that Cu, Rh, and Mo significantly improve hydrogen desorption by weakening Mg-H bonding and reducing activation energies, while Zn exhibits a weaker effect. The developed TPD model successfully reproduces experimental desorption profiles, and KMC simulations confirm faster hydrogen release in Rh-doped MgH_2 . These findings provide useful insights for the design of improved hydrogen storage materials.

Keywords : Magnesium hydride; hydrogen; KMC; DFT; TPD; hydrogen storage