



## Ecole Doctorale - 104

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

**ETABLISSEMENT** : Centrale Lille

**Laboratoire(s) de Rattachement** : Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS)

**Domaine scientifique, Spécialité** :

**DS4 | Chimie des matériaux**

**Direction de thèse** : POURPOINT Frédérique, MCF, frederique.pourpoint@centralelille.fr

**Co-direction** :

**Titre de la thèse** : Amélioration de l'adsorption de H<sub>2</sub> dans les MOF : étude innovante par RMN sous pression

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

Dans la quête de solutions énergétiques durables et propres, le rôle de l'hydrogène en tant que vecteur énergétique s'avère essentiel. Les composés hybrides nanoporeux, Metal-Organic Frameworks (MOF), se présentent comme une voie particulièrement prometteuse pour le stockage de l'hydrogène. Ils offrent plusieurs avantages, notamment leur capacité à adsorber le dihydrogène ainsi qu'une grande stabilité au cours des cycles d'adsorption et de désorption.

Cependant, malgré ce potentiel, l'utilisation des MOF à l'échelle industrielle demeure limitée. Pour y remédier, il est indispensable de modifier leur structure afin d'améliorer leur capacité et leur température de stockage de l'hydrogène, mais aussi d'accroître leur sélectivité dans les procédés de séparation de gaz. Pour éviter un long processus d'essais/erreurs, rendu encore plus complexe par la grande diversité des MOF, il est crucial de disposer d'une compréhension des paramètres influençant l'interaction de l'hydrogène avec ces matériaux.

La Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) est couramment utilisée pour caractériser la structure des MOF, mais très peu employée pour étudier l'interaction entre H<sub>2</sub> et ces matériaux. Ce projet de thèse vise à examiner des aspects jusqu'ici inexplorés du mécanisme d'adsorption de l'hydrogène – notamment la localisation des molécules de H<sub>2</sub> adsorbées au sein des MOF et la nature de leurs interactions avec la charpente du matériau. L'analyse détaillée de ces résultats permettra d'améliorer les capacités de capture et de détection de l'hydrogène dans des solides poreux. Nous nous appuyons notamment sur les possibilités de caractérisation dans le cadre de l'infrastructure RMN à très hauts champs avec le spectromètre 1,2 GHz (infranalytics), ainsi que sur la sonde RMN haute pression récemment achetée.

Les objectifs visés sont ainsi :

- La synthèse des MOF et l'insertion de l'hydrogène à différentes pressions
- Information sur l'interaction H<sub>2</sub> / MOF par RMN
- L'amélioration raisonnée de l'adsorption d'hydrogène dans les MOF

**Date de recrutement envisagée** : 01/10/202

**Contact (adresse e-mail)** : [frederique.pourpoint@centralelille.fr](mailto:frederique.pourpoint@centralelille.fr)

**Remarques/commentaires supplémentaires** : Thèse environnée par le projet IUF de F. Pourpoint



## Ecole Doctorale - 104

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

**INSTITUTION:** Centrale Lille

**Laboratory(s) to which they are attached :** Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS)

**Scientific field, Specialty :**

**DS4 | Materials Chemistry**

**Thesis supervision :** POURPOINT Frédérique, MCF, frederique.pourpoint@centralelille.fr

**Co-supervision :**

**Thesis title: Improving H<sub>2</sub> adsorption in MOFs: innovative study using high pressure NMR**

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

In the pursuit for sustainable and clean energy solutions, hydrogen emerges as a key energy carrier. Nanoporous hybrid compounds, known as metal-organic frameworks (MOFs), offer a particularly promising avenue for hydrogen storage. They offer several advantages, including their ability to adsorb dihydrogen and their high stability during adsorption and desorption cycles.

However, despite this potential, the use of MOFs on an industrial scale remains limited. To overcome this, it is essential to tailor their structure in order to improve their hydrogen storage capacity and operating temperature, as well as to improve their selectivity in gas separation processes. To avoid a time-consuming trial-and-error approach, further complicated by the wide variety of MOFs, it is crucial to understand the parameters that influence the interaction of hydrogen with these materials.

Nuclear Magnetic Resonance (NMR) is commonly used to characterize the structure of MOFs, but is rarely used to study the interaction between H<sub>2</sub> and these materials. This thesis project aims to examine previously unexplored aspects of the hydrogen adsorption mechanism, in particular the location of adsorbed H<sub>2</sub> molecules within MOFs and the nature of their interactions with the material's framework. A detailed analysis of these results will improve hydrogen capture and detection capabilities in porous solids. This work will leverage the advanced characterization resources of the ultra high field NMR infrastructure, including the 1.2 GHz spectrometer (infranalytics), and the recently acquired high-pressure NMR probe.

The objectives are therefore:

- The synthesis of MOFs and insertion of hydrogen at different pressures
- Information on H<sub>2</sub>/MOF interaction by NMR
- The rational improvement of hydrogen adsorption in MOFs

**Planned recruitment date:** 01/10/2026

**Contact (email address) :** [frederique.pourpoint@centralelille.fr](mailto:frederique.pourpoint@centralelille.fr)

**Additional Notes/Comments:** Surrounded by the F. Pourpoint IUF's project