

Nom et Prénom : LOUDAINI ABDELJALIL

Date de soutenance : 01/10/2022

Directeur de Thèse : AGGOUR MOHAMMED

Sujet de Thèse :

La réfrigération magnétique : de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) au système de réfrigération magnétique, une nouvelle approche théorique et numérique

Résumé :

Ce travail de doctorat a été réalisé conjointement au laboratoire de Systèmes Électroniques, Traitement de l'information, Mécanique et Énergétique à la faculté des sciences de Kenitra et au laboratoire de la Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires à la faculté des sciences de Rabat, Maroc.

La réfrigération magnétique est une technologie de rupture pour produire du froid qui n'utilise pas de gaz à effet de serre et est plus efficace que la réfrigération à compression de gaz. Elle est basée sur l'effet magnétocalorique, une propriété de certains matériaux à changer de température lorsqu'ils sont soumis à une variation de champ magnétique.

La première partie des travaux réalisés durant cette thèse a été dédiée à l'étude des propriétés structurales, électroniques, magnétiques et magnétocaloriques des composés $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{MnO}_3$ et AlFe_2B_2 (avec $x=0, 0.1, 0.2, 0.3$) en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), combinée avec la méthode de simulation Monte Carlo.

Le deuxième volet consistait à développer un modèle numérique permettant de simuler le fonctionnement du cycle de réfrigération magnétique avec régénération active, afin de prédire les performances thermiques du cycle et pour évaluer et comparer les performances du composé AlFe_2B_2 dans les conditions réelles de fonctionnement dans un bloc réfrigérant.

Mots clés : Réfrigération magnétique, Effet magnétocalorique, Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT), simulation Monte Carlo, Réfrigération Magnétique à Régénération Active.

Abstract:

This doctoral work was carried out in Laboratory of Electronic Systems, Information Processing, Mechanics and Energetics, Faculty of Sciences, University Ibn Tofail Kenitra, in conjunction with Laboratory of Condensed Matter and Interdisciplinary Sciences, Faculty of Sciences, Mohammed V University, Rabat, Morocco.

Magnetic refrigeration is a good alternative to gas compression refrigeration systems because it does not involve the use of greenhouse gases and it is more efficient. This technology is based on the magnetocaloric effect, which manifests itself as a temperature change of a magnetocaloric material upon changing the magnetic field.

The first part of this work was to study of the structural, electronic, magnetic and magnetocaloric properties of $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{MnO}_3$ and AlFe_2B_2 (with $x=0, 0.1, 0.2, 0.3$) Compounds by means of density functional theory (DFT) method in combination with Monte Carlo simulation.

The second part is focused on the development of a numerical model to simulate the operation of active magnetic refrigeration cycle (AMR) in order to predict thermal performances of the cycle and to test and analyzed the performances of AlFe_2B_2 compound in practical working conditions in a refrigerant bed, and to study the influence of maincycle parameters on the system's performance.

Keywords : Magnetic Refrigeration, Magnetocaloric effect, Density Functional Theory (DFT), Monte Carlo simulation, Active Magnetic Regenerative Refrigeration.