

PhotoModes

Ce projet prévoit de constituer le premier lien entre les études fondamentales génétiques et fonctionnelles de la photosynthèse (produisant et décrivant des mutants) et le génie des procédés visant à améliorer la productivité des microalgues en produits de réserves. La production de biomasse algale en condition de phototrophie stricte est limitée par l'efficacité des mécanismes énergétiques de la photosynthèse. L'enjeu du projet est de décrire, à l'aide d'une approche expérimentale et théorique (modélisation), les conséquences des limitations au niveau moléculaire sur différents paramètres macroscopiques tel que le taux de croissance, l'accumulation de lipides ou d'amidon en pourcentage du poids sec. L'étude se basera sur l'utilisation simultanée de 4 photobioréacteurs ultra instrumentés et sur l'utilisation de 7 souches de *C. reinhardtii* de type sauvage ou mutantes. Le grand nombre de données physiologiques obtenues par cette approche expérimentale devrait permettre d'identifier les facteurs limitant la conversion photosynthétique dans diverses conditions environnementales et de contribuer à générer un modèle de croissance photosynthétique robuste.

CAPSOL

Un des enjeux de l'utilisation des ENR comme substitut des énergies fossiles ou fissibles est l'utilisation de procédés de conversion électrique et/ou thermique à haut rendement. Ceci ne peut se faire qu'au travers du développement de technologies innovantes utilisant des mécanismes de conversion de l'énergie solaire à haut rendement. L'objectif du projet CAPSOL est d'étudier et d'analyser un nouveau concept non encore exploré et exploité : la conversion thermoionique de l'énergie solaire concentrée. Cette étude exploratoire nous permettra de développer et de tester en lumière artificielle ou naturelle un prototype de diode thermoionique

EnerNet

Ce projet s'inscrit à l'intersection des thèmes récents de recherche de l'équipe TES du laboratoire Promes de Perpignan (économie mathématique appliquée au domaine de l'énergie) et du département PSI développées au laboratoire de Génie Chimique de Toulouse (optimisation des réseaux d'eaux et d'énergie et étude de l'optimisation des réseaux d'H₂ via les travaux de M. Boix et L. Montastruc, la thèse de S. De Léon, depuis 2010). Le travail proposé vise à développer un outil innovant pour le dimensionnement et la gestion de couplage de réseaux d'eaux et d'énergie dans un écoparc industriel (EIP) en prenant en compte divers critères d'optimisation (coût, production d'énergie, impacts environnementaux, ...). La stratégie de résolution de résolution à mettre en place passe par la prise en compte d'un système économique concurrentiel non coopératif. Le résultat de cette proposition de recherche ouvrira de larges perspectives sur le choix et la gestion du vecteur énergétique en fonction des procédés présents dans l'EIP.

TURBHO

Le projet est un premier pas vers le développement d'un système de récupération de l'énergie des vagues innovant. Il s'agit d'un dispositif combinant un convergent focalisant l'énergie des vagues sur une turbine dont le couple est contrôlé. Par sa simplicité, ce système pourrait constituer une rupture technologique dans ce domaine. L'objectif du projet est de fournir une caractérisation du champ de vagues émis par ce dispositif lorsque la turbine fonctionne en pompe et est pilotée de manière à générer un débit oscillant. En effet, la performance énergétique de ce dispositif houlomoteur est intimement liée à sa capacité à générer des vagues. Un montage expérimental sera réalisé et testé dans les bassins d'essais hydrodynamiques au laboratoire LHEEA.

SIMMEPAC

L'amélioration des performances, de la durabilité, et le déploiement de convertisseurs d'énergie efficaces et peu coûteux nécessitent des stratégies numériques multi-échelles allant de la modélisation des réacteurs de fabrication à celle du fonctionnement du dispositif complet, en passant par la modélisation de la synthèse des composants. Cette approche est développée dans ce projet pour modéliser un réacteur de pulvérisation magnétron dédié à l'élaboration de la phase catalytique d'électrodes de piles à combustible, l'étude de sa réactivité et du fonctionnement de la pile à combustible à membrane échangeuse de protons concernée. Les simulations fluides et moléculaires sont utilisées à l'échelle pertinente pour identifier les paramètres cruciaux du fonctionnement du réacteur, ceux de la fabrication d'éléments du cœur de pile, et ceux du fonctionnement de la pile afin d'en connaître les corrélations et de fournir un outil prédictif décrivant les processus du fonctionnement du dispositif pile à combustible de l'échelle nanométrique à l'échelle macroscopique.

MEZIFAL

Ce projet cible l'exploration d'une stratégie simple et innovante pour développer des membranes à base de ZIF-8 confiné dans les pores d'un support céramique en α -Al₂O₃, en combinant la technique ALD (Atomic Layer Deposition), appliquée au dépôt de ZnO, et la conversion de cet oxyde en ZIF-8. Cette méthode permettra la mise en œuvre d'un protocole original pour la production d'un nouveau matériau membranaire composite (ZIF-8/ α -Al₂O₃) présentant une bonne résistance thermo-mécanique et une faible sensibilité à la formation de défauts par rapport aux couches minces supportées. Un choix judicieux des conditions de dépôt de ZnO par ALD, et des conditions de réaction pour la conversion en ZIF-8 (formulation de la solution, température, durée, utilisation de micro-ondes,...), permettra de générer des matériaux originaux de composition, morphologie et microstructure contrôlées. La caractérisation physico-chimique des membranes ZIF-8/ α -Al₂O₃, couplée à l'étude de leurs performances pour la séparation de gaz permettra de comprendre et maîtriser les mécanismes de formation d'un matériau membranaire optimisé sur des supports céramique industriels et applicable à la séparation du dihydrogène.

Near-field heat engine/Nanoengine

Over 60% of energy that is used in industry is lost as low grade waste heat (temperatures less than 200°C). However, few thermodynamic cycles can use these low temperature streams effectively; particularly when system mass is a consideration, as in the transportation sector. Our objective in this project is to provide a mechanism to capture low grade waste heat for power generation. The technology, which will be developed in the course of this project, is based on the near-field radiative heat transfer between a hot and a cold body. The past decade has leveraged breakthrough in the field and recent results have opened the way to near-field thermophotovoltaic conversion where a hot source tunnels, through a narrow gap, thermal photons to a photovoltaic device. The main goal of the project is to develop a smart heat engine based on the transduction of low quality heat into mechanical work using near-field radiative processes and to bring significant advancement over the state of the art in solid-state thermal energy recovery systems.

ALABAMA

Face à l'explosion de la demande en systèmes électriques embarqués et à la répartition inégale du lithium sur Terre, des problèmes géopolitiques peuvent apparaître et entraîner une hausse importante des coûts. Il est donc nécessaire d'envisager des systèmes pouvant se substituer durablement aux batteries Li-ion. Parmi ceux actuellement envisagés, les batteries Mg-ion reçoivent un intérêt particulier. Abondant et léger, le magnésium offre des capacités théoriques dépassant celles du lithium, mais les prototypes actuels de batteries Mg-ion utilisent des électrolytes réactifs et peu respectueux de l'environnement. Substituer le magnésium par de

nouveaux matériaux d'insertion permettrait l'usage d'électrolytes plus conventionnels. Le très bon comportement des alliages métalliques dans les systèmes Li-ion et la richesse des diagrammes de phase avec le magnésium font des intermétalliques des candidats de choix. L'objectif du projet ALABAMA est de comprendre le comportement électrochimique d'intermétalliques par des caractérisations expérimentales et théoriques dans le but d'améliorer les performances par l'optimisation de la formulation d'électrode.

SCOOT

Ce projet de recherche s'inscrit dans une meilleure compréhension de l'activité thermoélectrique de différentes classes d'oxydes de cobalt à travers une approche multi-échelle. Il s'agira ici de corréler les propriétés de transport de ces matériaux à l'état massif avec leurs configurations électroniques qui seront sondées localement pour chaque plan distinct de Co par microscopie électronique corrigée à haute résolution spatiale combinée à la spectroscopie de pertes d'énergie d'électrons à haute résolution spectrale.

pSyCHE

L'hybridation d'une centrale thermique solaire est une alternative au problème d'intermittence de la production et de la consommation d'électricité. Dans le cas d'un cycle de Brayton chauffé à l'aide d'un concentrateur solaire, une solution serait de pallier au manque de soleil par un apport thermique issu d'une chambre de combustion alimentée par un combustible fossile ou renouvelable. Dans ce projet Psyche, il est envisagé d'étudier le couplage entre un récepteur solaire et la chambre de combustion. Dans un tel système, l'air comprimé dans l'étage de compression de la turbine est préchauffé dans le récepteur solaire entre 500°C et 800°C environ et dirigé vers la chambre de combustion. La problématique sera l'étude de l'opérabilité d'un tel brûleur fonctionnant dans des conditions sévères et dont les paramètres d'entrée (température, richesse) changeront en fonction des conditions de production. Les émissions polluantes seront bien sûres également étudiées.

1D-RENOX

Ce projet exploratoire vise à intégrer des oxydes fonctionnels sous forme de nanofils unidimensionnels (1D) sur les plateformes silicium existantes de la microélectronique, à partir d'un procédé chimique (bottom-up) novateur qui combine la méthode de déposition de solutions chimiques (CSD) avec des membranes polymériques nanoporeuses directement supportées par les substrats. Le projet vise à des avancées technologiques, en particulier dans le domaine des matériaux pour la récupération d'énergies mécanique et thermique dans les dispositifs électroniques. Deux oxydes seront étudiés: le α -quartz (SiO_2), matériau piézoélectrique particulièrement efficace et les hollandites (AxX10O16 avec $x \leq 2$), matériaux qui présentent des propriétés thermoélectriques. Les efforts seront concentrés d'une part, sur l'élaboration de ces oxydes fonctionnels 1D en corrélation avec leur caractérisation structurale à différentes échelles (nano et microscopique, macroscopique), et d'autre part, sur la caractérisation des effets piézoélectriques et thermoélectriques attendus. Ce projet est complémentaire à un projet ANR jeune chercheur qui porte le nom Quartz on Silicon visant l'intégration de couches 2D de quartz sur silicium.

MIREISS

Le but de ce projet est de montrer à la fois, que les systèmes microfluidiques ont un rôle à jouer dans le domaine de la récupération d'énergie mais également que ces systèmes peuvent atteindre des niveaux d'efficacité de conversion très importants. La génération d'un courant d'écoulement par le mouvement d'un liquide ionique à l'intérieur d'un canal a donné lieu à quelques publications par le passé mais peu de groupes de recherche se tournent vers cette solution en raison de la faible efficacité de conversion obtenue. L'intérêt de l'ajout de surfaces

superhydrophobes à l'intérieur de microcanaux a été montré de façon théorique par Ren et Stein en 2008 avec une prédiction de 40% quant à l'efficacité de conversion. A notre connaissance, aucune réalisation expérimentale d'un tel dispositif n'a été effectuée jusqu'à ce jour au vu des difficultés des réalisations technologiques. En nous appuyant sur la plateforme technologique de l'IEMN ainsi que sur l'expérience du groupe dans le domaine des surfaces superhydrophobes, nous avons la volonté de montrer que les systèmes microfluidiques ont un rôle à jouer dans la récupération d'énergie.

DYNAFILM

L'objectif de ce projet est d'identifier les géométries permettant d'intensifier les transferts au sein des films ruisselants. Une application visée est le développement d'échangeurs compacts et efficaces, adaptés aux machines à absorption utilisées, par exemple, pour la valorisation d'énergie fatale (rehaussement du niveau de température ou la production de froid) ou l'exploitation de l'énergie solaire (Froid solaire). On s'intéresse à l'excitation par la modulation géométrique de la paroi de la dynamique non-linéaire du film ruisselant organisé autour d'ondes solitaires en interaction. L'idée est d'identifier la géométrie permettant de générer un taux de présence, de création (par instabilité) et de destruction (par appariement) des ondes qui soient optimaux pour les transferts de masse et de chaleur. L'étude prendra en compte la présence d'un contre-écoulement gazeux et la possibilité d'un engorgement (formation d'un pont liquide) mais se limite dans un premier temps au transfert de chaleur entre les deux phases. Ce projet de recherche servira de tremplin au dépôt d'une ERC Starting Grant par le porteur du projet.

COMÉXY

Le CO est un intermédiaire important dans la production de carburants. Il peut être synthétisé à partir de CO₂ pour être ensuite transformé en hydrocarbures lourds grâce au procédé Fisher-Tropf, ou oxydé pour produire du H₂ dans la réaction dite «water-gaz shift». Un enjeu majeur est la disponibilité de catalyseurs efficaces (en termes de vitesse et de coût énergétique) de la conversion entre CO et CO₂. La CO déshydrogénase (CODH) est une enzyme bactérienne qui catalyse cette réaction. Elle pourrait être utilisée dans des processus industriels si elle n'était pas inactivée en présence de dioxygène. Au travers d'une approche pluridisciplinaire intégrant les apports de la biochimie, de l'électrochimie, de la cristallographie et des techniques de chimie théorique, le présent projet fédère les deux équipes françaises qui démarrent actuellement l'étude de diverses CODHs. Nos objectifs sont de : (i) comprendre et modifier la réactivité des CODH avec O₂ et (ii) étudier le mécanisme catalytique de la conversion CO/CO₂, et (iii) explorer la biodiversité pour identifier les CODHs qui sont naturellement plus résistantes à l'oxygène.

SIMILI

Le projet SIMILI est un projet innovant qui propose de développer une nouvelle approche théorique et prédictive pour étudier les interfaces électrochimiques solide/liquide (électrode/électrolyte) dans les batteries Li-ion. L'objectif du projet SIMILI est de coupler les approches quantiques (atomistiques) et les approches continuum (multiéchelles) pour accéder au premier traitement semi-quantitatif des doubles couches électrochimiques (DCE) dans les dispositifs Li-ion, grâce à la paramétrisation et à la validation d'un modèle PCM (Polarisable continuum model) nouvellement implémenté dans les codes de calculs quantiques périodiques. Le projet SIMILI est en rupture par rapport à l'existant puisque le modèle PCM n'a encore jamais été adapté ou appliqué aux interfaces électrochimiques chargées (DCE), traitées jusqu'alors par des méthodes classiques (continuum) ou semi-classiques (dynamique moléculaire). L'objectif du projet SIMILI est donc de mener une étude préliminaire et exploratoire des potentialités du modèle PCM pour prédire les poussées dendritiques ou la formation de couches de passivation dans les dispositifs Li-ion.

SOLHYBTRANS

Les cellules solaires basées sur les pérovskites hybrides organiques/inorganiques sont maintenant reconnues comme une filière photovoltaïque à bas coût à même de concurrencer les filières traditionnelles. SOLHYBTRANS se propose de capitaliser sur l'expertise internationalement reconnue des deux partenaires du projet sur ce sujet. Le projet permettra d'accompagner l'effort mondial qui a permis de multiplier par plus de 4 le rendement de ces cellules en 3 ans. L'utilisation de méthodes ab initio permettra de mieux comprendre les mécanismes à l'origine des propriétés remarquables de ces objets. Nous commencerons par l'étude de la dynamique des cations organiques et leur effet sur l'écrantage de l'exciton. Puis les profils diélectriques seront étudiés. Enfin, la simulation de l'interface avec une électrode TiO₂ permettra d'étudier de manière complète une hétérostructure, les dipôles induits aux interfaces, mais aussi les propriétés de transport électronique, la réponse à un champ électrique ou les alignements de bandes. Ces derniers éléments tirent parti de la compétence du porteur du projet, nouvellement recruté au sein de l'ISCR.

FILIRO

Le procédé de filtration rotative est une technologie innovante qui apporte un gain énergétique par rapport aux procédés classiques de filtration statique. Dans le but d'optimiser ce procédé, nous réaliserons une modélisation hydrodynamique de l'écoulement complexe qui y règne. Il s'agit d'un écoulement de type Taylor Couette Poiseuille avec flux radial à la paroi du cylindre intérieur. Les fluides considérés sont non-Newtoniens, purement visqueux. L'influence des paramètres dynamiques de l'écoulement, des paramètres rhéologiques ainsi que des paramètres géométriques sera examinée. Pour valider les résultats obtenus une étude expérimentale sera menée en parallèle. Une solution de polymères semi-rigides sera utilisée comme fluide-test. Les essais expérimentaux seront basés sur la visualisation et les mesures de vitesse 2D par PIV.

NANOTECH

Les matériaux à faible dimensionnalité, tel que les systèmes 1D (ou nanofils) permettent de diminuer la conductivité thermique d'un à deux ordre de grandeur. Par ailleurs, cette basse dimensionnalité permet d'augmenter la densité d'états électroniques au niveau de Fermi par un confinement quantique des électrons. Ce comportement est favorable à une amélioration des propriétés électroniques des matériaux thermoélectriques. Cependant les nanofils ne peuvent pas être utilisés dans des modules sous leur forme native, il est nécessaire d'utiliser une matrice. Dans ce contexte, nous proposons de synthétiser des nanofils d'éléments thermoélectriques abondants et de les introduire dans une matrice organique conductrice électrique. Plus précisément, les nanofils de deux composés intermétalliques tel que CrSi₂ et CoSi seront réalisés par CVD en utilisant des précurseurs chlorés. Ces nanofils seront ensuite introduit dans une matrice polymère et leurs propriétés thermoélectriques caractérisées.

REMEPPAC

Le projet REMEPPAC se propose d'étudier la faisabilité d'un réacteur électrochimique à membrane protonique pour la réduction sélective de CO₂ en acide formique. Ce dernier est envisageable comme combustible liquide pouvant alimenter une pile à combustible, telle que la pile à oxydation directe d'acide formique. Afin d'atteindre une sélectivité en acide formique optimale, une cathode originale sera préparée par pulvérisation cathodique de nanoparticules de métaux s/p sur support carboné. Un réacteur électrochimique à membrane innovant sera constitué par assemblage de cette cathode avec une membrane protonique (commerciale ou de type plasma) et une anode commerciale, puis couplé à l'analyse en ligne des produits de réaction permettant l'évaluation des rendements faradique et énergétique et de la sélectivité de la réaction.

CARDYMOL

Le carbure de silicium, SiC, est un matériau d'intérêt dans la conception de nombreux systèmes avancés de conversion de l'énergie radiative tels que les cellules thermo-photovoltaïques. L'optimisation de tels systèmes requiert une connaissance fine des propriétés thermoradiatives (@1500 K) du SiC sur la plage spectrale de l'infrarouge. Or la plupart des codes de calcul actuels intègrent des fonctions optiques acquises à $T = 300$ K sur des monocristaux faiblement dopés. Plus encore, au-delà de sa formulation chimique simple, le SiC possède une riche variété de structures cristallographiques et de taux de dopage lui conférant une large déclinaison de fonctions optiques. Dans le but de maîtriser complètement la chaîne de modélisation multi-échelle d'une diode thermique, CARDYMOL, se propose de fournir la dépendance en température des fonctions optiques dès l'arrangement des motifs tétraédriques de SiC₄ à l'échelle de la maille atomique. Pour ce faire, le recours à la Dynamique Moléculaire sera exploré et les premières données numériques seront confrontées à celles identifiées via le modèle de Lorentz sur monocristaux.

ScaleH2

Le biohydrogène est un biocarburant de 2^{ème} et 3^{ème} générations qui présente un PCI élevé sans que sa combustion n'émette de gaz à effet de serre. Il peut être produit par digestion anaérobie sombre à partir de déchets organiques tout en fournissant, en plus, des coproduits valorisables comme des acides gras volatils ou de l'éthanol. La digestion est en général conduite dans des fermenteurs mécaniquement agités sous faible vitesse d'agitation, ce qui induit des hétérogénéités spatiales de la distribution des déchets et de la biomasse, des gradients spatiaux de concentration pour les espèces solubles et une mal-distribution spatio-temporelle du transfert de matière gaz/liquide qui affecte la productivité du fermenteur. L'objectif de ce projet est de coupler les phénomènes de mélange et de transfert à l'échelle microscopique aux cinétiques biologiques de réaction et aux mécanismes intracellulaires (flux métaboliques) afin de mieux prédire la productivité en H₂ à l'échelle du réacteur, ainsi que les origines possibles de ses dysfonctionnements.

MATRaCC

Les mousses à pores ouverts connaissent un engouement croissant pour le développement de systèmes de conversion de l'énergie à haute température tels que les absorbeurs solaires volumiques. Dans ces systèmes, l'obtention d'un rendement de conversion élevé du rayonnement solaire requiert de trouver l'architecture de mousse permettant de garantir à la fois des transports de fluide et des rayonnements thermique et solaire optimisés. Les travaux de modélisation récents passent par des méthodes d'homogénéisation le plus souvent spécifiques à chaque mode de transport, limitant les potentialités de design d'une mousse optimale. Pour lever ce verrou, MaTRaCC se propose de comparer, pour des températures modérées, des voies de simulation numériques consistant à traiter simultanément le transport couplé rayonnement/conduction à l'échelle locale et dans la géométrie réelle. Ce volet numérique s'adossera sur un volet expérimental visant à caractériser la conductivité effective macroscopique -- d'origine conducto/radiative -- de mousses de polypropylène à géométrie fixée. Les premiers acquis obtenus permettront de valider les outils numériques et de justifier leur emploi ultérieur à des hautes températures.