

Cellule Energie – les projets 2020

BIOMnOx

L'évolution de l'eau en di-oxygène (OER) est une étape essentielle dans la production et stockage d'énergie chimique à partir de lumière ou d'électricité. Pour être compétitif, ce processus nécessite une catalyse destinée à abaisser la surtension nécessaire à l'oxydation de l'eau, qui est très souvent élevée et donc limitante. Pour cela, les oxydes de manganèse ont été particulièrement étudiés car ils sont à la base de la principale catalyse d'OER active dans la nature, couplée à la production d'énergie chimique, dans le photosystème II des organismes à photosynthèse oxygénique. Toutefois, l'activité spécifique d'oxydes de manganèse bactériens sur l'OER n'a encore jamais été testée alors que l'amélioration de fonctions électrochimiques par des processus microbiens a été avérée dans plusieurs systèmes. Cela constitue l'objet de ce projet exploratoire. Nous pensons être dans une situation très favorable pour sa réussite en un an grâce à l'association pluridisciplinaire de trois groupes respectivement spécialistes de biominéralisation (INP et INSU), d'électrocatalyse de réactions OER (INC), et d'électrochimie/électrodes (INC).

CAPFIL

Les groupes de Wei Gao (North Carolina South University, Etats-Unis) et de Joselito Razal (Deakin University, Australie) font partie des pionniers qui développent des supercapacités filaires destinées à terme à la fabrication de tissus capables de stocker de l'électricité. Ces supercapacités sont fabriquées à partir d'oxydes de graphène et de MXenes (nouveaux matériaux 2D) dont les deux groupes maîtrisent la mise en œuvre. Le rôle du LEMTA consiste à développer des modèles utilisés pour la caractérisation dans les domaines fréquentiel et temporel de ces supercapacités, en prenant en compte les phénomènes de transfert de charge et de matière à l'échelle locale micro-, voire nanométrique. Ces travaux s'appuient sur plusieurs années d'expérience de l'équipe HSE (Hydrogène et Systèmes Electrochimiques) du LEMTA dans la caractérisation de systèmes électrochimiques tels que les piles à combustible.

DIBAPA

So far the research on Mg- and Ca-based rechargeable batteries is driven by the design of innovative but sometimes complex electrolyte formulations. This is mainly due to the (electro)chemical behavior of Mg and Ca metal in contact with classic types of battery electrolytes. Indeed the passivation prevents from any electrochemical activity as Mg²⁺ and Ca²⁺ ions cannot migrate through it. In this proposal, the idea is to protect the surface of Mg and Ca electrode by an ion-conducting alloy film that could be easily in situ through direct salt reduction at room temperature. This idea is inspired by recent achievements on lithium metal coating and should be transferable to Mg- and Ca-ion batteries. For this project, ICGM and IPREM will work together to prepare the metallic protective layer and analyze it by surface characterization technique (XPS, AES-SEM) and then evaluate the influence of the coating from the electrochemical point of view, ranging from polarization and impedance analyses to full cell cycling test.

HERBE

L'objectif principal de ce projet est de développer un système de production de di-hydrogène (H₂) à haute pression (P > 200 bars) fiable, robuste et à faible coût. Sur la base d'un brevet existant (dont les partenaires du projet sont auteurs), l'équipe souhaite améliorer la cinétique et le rendement d'une réaction d'hydrolyse de l'eau à partir de mélange de poudres contenant un fort taux de magnésium métallique. Pour cela, les poudres des précurseurs seront caractérisées et le procédé de préparation des réactifs sera optimisé afin de réduire les étapes et le coût du procédé. Un nouveau prototype de générateur autonome sera élaboré en adéquation avec un cahier des charges à établir selon l'application visée. Les lois de commandes seront alors mises au point et validées lors de campagnes

d'essais. En parallèle, une Analyse du Cycle de Vie sera conduite afin de déterminer les paramètres clés permettant d'inscrire cette technologie dans le cadre du développement d'une solution de stockage d'énergie à la fois durable du point de vue écologique et viable du point de vue économique.

MERCI

MERCI se propose d'étudier finement l'ensemble des forces motrices thermodynamiques pour minimiser la création d'entropie dans un microréacteur chimique. Cette minimisation doit conduire à une amélioration des taux de conversion et une meilleure efficacité énergétique de la conversion. L'objectif du projet est de considérer le couplage des créations entropiques dans le fluide réactif et dans le fluide caloporteur (transfert de chaleur, de matière et de quantité de mouvement). Le travail proposé consiste en la modélisation du couplage des termes sources puis en la résolution numérique du problème. L'originalité du projet est de mener une optimisation sur un critère unifié (la création d'entropie) en faisant varier les paramètres de design du réacteur en plus des conditions opératoires. Ce projet associe deux équipes matures sur le sujet en combinant connaissances sur l'optimisation énergétique et connaissances sur la phénoménologie des réacteurs.

MOFpower

MOFpower aims at the use of Metal-Organic Frameworks (MOFs) as a versatile and modular platform to elaborate sustainable and highly efficient composites (inorganic nanoparticles (iNP) ?" MOFs) iNP@MOF for CO₂ revalorization into valuable products or energy vectors, such as alcohols (particularly methanol and ethanol).

Active inorganic nanoparticles will be wisely loaded within the pores of a suitably pre-selected MOF. The interaction of the iNPs with the inorganic building units (oxo-clusters) of the MOF, together with the confined space is expected to enhance the catalytic conversion of CO₂ at a lower energy penalty. The later will be the product of the interplay between the synergy effect, the molecular nano-compression and the expansion of the specific active surface.

PepMoCO₂

Carbon dioxide is the major greenhouse gas, which is to 80% emitted from the usage of fossil fuels on earth. Attempts to fix CO₂ are provided by nature, with one example being formate dehydrogenases (FDHs) that are specific enzyme systems involved in the reversible conversion of CO₂. Consequently, FDHs have become enzymes of interest for fuel cell applications and for the production of reduced carbon compounds as energy source from CO₂. Metal-containing FDHs in general contain a cofactor that binds molybdenum (Moco). The active site is further composed by three highly conserved amino acids: a selenocysteine or cysteine as ligand to the metal and a histidine and arginine residues in second coordination sphere. Their mechanisms of action is still not fully understood and few examples existent so far in the literature of small inorganic complexes capable of mimicking their reactivity. This project intends to explore the potential of peptidic scaffolds to coordinate/stabilize directly the Moco and explore their reactivity on CO₂ reduction. This is a novel approach which outcomes will have high impact in the areas of model chemistry, energy and biotechnology.

PEROVSK'Hy

Le projet PEROVSK'Hy propose de combiner approche théorique pour la prédiction de nouvelles phases cristallines par simulations numériques (IC2MP, Poitiers) et approche expérimentale de synthèse et caractérisation des matériaux (Institut Néel, Grenoble).

A travers cette collaboration nouvelle, nos deux groupes aux compétences complémentaires ?" l'un composé de physiciens des hautes pressions, et l'autre de chimistes théoriciens - proposent de développer une approche originale pour l'exploration d'hydrures originaux et performants pour le stockage de l'hydrogène. Les propriétés des composés originaux seront évaluées par leur potentiel applicatif dans le domaine du stockage chimique et de la conversion d'énergie.

Cette démarche conceptuelle innovante sera basée sur un dialogue théorie-expérience : les stabilités thermodynamiques, dynamiques, et thermiques des phases identifiées seront étudiées théoriquement, et

confrontées aux données expérimentales de synthèse sous haute pression et haute température et caractérisations structurales in situ, et réciproquement.

PHOTOCAT.Ti@TiO₂.H₂

Ce projet de collaboration entre l'ICSM, UMR 5257, et l'IEM, UMR 5635, est consacré à l'étude de l'activité photocatalytique et photoélectrocatalytique des nanoparticules innovantes Ti@TiO₂ dans le processus de production d'hydrogène à partir de solutions aqueuses de réactifs organiques sacrificiels. Récemment, des nanoparticules de Ti@TiO₂ sans métaux nobles ont été obtenues à l'ICSM par synthèse sonohydrothermale. Il a été démontré que ces particules présentent une forte activité photocatalytique sous l'action conjointe de la lumière vis/NIR et de la chaleur. L'objectif de ce projet est d'étudier de façon systématique l'effet de la température et de la composition des particules cœur-coquille Ti@TiO₂ sur la cinétique de production photocatalytique d'hydrogène en fonction de leurs propriétés photoélectrocatalytiques. Une cellule photoélectrochimique à température contrôlée sera développée au cours de ce projet.

PlanER

Le réseau électrique a pour mission de donner accès à l'électricité à tous avec une bonne qualité mais aussi continuité de fourniture et, depuis quelques années, avec des objectifs de qualité environnemental en permettant l'accès aux productions renouvelables et véhicules électriques. Ces derniers sont, de par leur taille, connectés au réseau de distribution qui n'a pas été historiquement pensé ni dimensionné pour les accueillir. Ce projet propose de repenser la façon dont les réseaux électriques ont été conçus et sont exploités en proposant un fonctionnement en micro-réseaux qui seraient connectés lorsque le réseau n'est pas en contrainte et déconnectés du réseau principal dans le cas contraire mais en permettant à la partie isolée du réseau de continuer à fonctionner. Ce nouveau mode de fonctionnement permettrait d'améliorer la qualité de fourniture en réduisant le temps de coupure, de réduire les investissements réseaux et d'augmenter sa capacité d'accueil en se déconnectant en cas de contraintes techniques et de permettre une meilleure répartition des bénéfices entre les différents acteurs.

POC₂SOL

POC₂SOL est un projet de recherche exploratoire, multidisciplinaire et collaboratif impliquant deux partenaires académiques dont les responsables scientifiques sont de jeunes chercheurs. POC₂SOL vise à concevoir des photoélectrodes fonctionnelles à partir d'assemblages supramoléculaires d'espèces inorganiques polynucléaires constituées de métaux abondants, les clusters octaédriques d'élément de transition et les polyoxométallates (POM), ayant des propriétés optiques/électroniques complémentaires. L'objectif de POC₂SOL est d'améliorer la collection de la lumière et la séparation des porteurs de charge, via l'insertion d'assemblages « push-pull » hybrides inédits (le cluster et le POMs jouant respectivement le rôle de photosensibilisateur donneur d'électrons et d'accepteur d'électrons à haut potentiel catalytique) dans des cellules photoélectrochimiques afin de proposer des dispositifs innovants, propres et efficaces pour la production d'énergie chimique (production de H₂) ou électrique (cellules à colorant).

PULSE

Le projet PULSE a comme objectif d'explorer une option innovante pour le stockage de l'énergie solaire. Celle-ci repose sur la propriété de molécules photo-commutables de convertir directement l'énergie contenue dans les photons en énergie chimique qui est restituée dans une seconde phase et en présence d'un catalyseur sous la forme d'énergie thermique. Ce principe de stockage, dénomé Molecular Solar Thermal Energy Storage (MOST), particulièrement séduisant, reste très peu étudié dans la littérature. Un important travail amont est donc requis pour évaluer de manière objective son potentiel. Celui-ci concerne tant les constituants de base représentés par le couple molécule/catalyseur que l'établissement de bilans qui permettront de quantifier la performance énergétique d'un stockage qui a pour vocation de fonctionner sur une plage de température correspondant au domaine de l'habitat. Le projet PULSE a l'ambition de réunir les compétences nécessaires en chimie moléculaire, photochimie,

catalyse et génie des procédés pour apporter les réponses nécessaires à une évaluation de ce nouveau principe de stockage.

RESINTER

Le but de ce projet est de formaliser une commande prédictive (MPC) afin d'optimiser les postes de production et/ou stockage d'un micro-réseau électrique intégrant des énergies renouvelables afin d'assurer la demande en énergie de ce réseau. Une application de la stratégie proposée sera mise en œuvre sur la plate-forme PAGLIA ORBA. Ce projet propose une extension de l'approche MPC pour la gestion de l'énergie des micro-réseaux qui prend en compte les coûts d'électricité, la consommation d'énergie, les profils de production, les contraintes énergétiques et de puissance ainsi que les incertitudes dues aux variations de l'environnement. L'approche est basée sur un cadre cohérent d'outils de contrôle, tels que la programmation d'entiers mixtes et les MPC à contrainte souple, pour décrire la dynamique des composants du micro-réseau et l'architecture globale de contrôle du système. Une stratégie de tolérance aux pannes sera mise en place afin d'assurer une quantité d'énergie stockée suffisante de sorte que la demande essentielle des consommateurs soit toujours couverte, a minima dans un mode de consommation essentielle (survie dans le pire des cas).

SCANNER

The project explores the way that scenarios and factors impacting the nuclear pathways choices fuel the scientific and societal debates. The technological capability of power systems to face the instantaneous variability of renewables makes the energy scenarios ambiguous and new metrics to assess their feasibility are necessary. More specifically the project explores the way that high shares of intermittent renewables in France in 2030/2050 could add pressure on nuclear power plants in terms of ramping and cycling, and fuel economy. New metrics for the system flexibility and technology fatigue are necessary to steer climate policy and investment decisions based on high-fidelity short-term representation of the energy system. Based on the iteration between physics and economics, the study conducts a reflexive analysis of assumptions and socio-political biases for identifying how future nuclear plant operation and safety requirements are addressed in scenario building.

SYNCOPE

Ce projet fondamental et interdisciplinaire entre un laboratoire spécialisé en électrocatalyse (IC2MP) et un laboratoire spécialisé sur les céramiques (IRCER) vise à développer de nouveaux matériaux composites capables d'activer la réaction de dégagement du dioxygène (RDO) à de faibles valeurs de surtensions, réaction d'intérêt pour la production de H₂ dans un électrolyseur. Ces catalyseurs seront composés d'une matrice composite constituée d'un matériau bidimensionnel de type Ti₃C₂T_x (MXène) et d'un carbonitride (Si-C-N) ou un oxycarbure (Si-C-O) de silicium, le tout, en interaction forte avec des centres catalytiquement actifs à base de Ni et/ou Fe. Le carbonitride (Si-C-N) ou oxycarbure (Si-C-O) de silicium permet de stabiliser le MXène aux valeurs de potentiels requises pour réaliser la RDO. Il est espéré une interaction forte entre le MXène et la phase active afin de favoriser la cinétique de la RDO et ainsi obtenir une électrode efficace et exempte de métaux nobles.

ThermASol

ThermASol a pour but d'améliorer l'efficacité de conversion solaire-carburant lors de la valorisation du gaz carbonique exposé à un flux solaire concentré. La synthèse de carburants à haute densité énergétique passe au préalable par l'obtention de syngas, obtenu par application d'un cycle thermochimique en deux étapes : (1) réduction de l'oxyde de cérium à haute température (1400°C) puis (2) ré-oxydation à 1000°C avec le gaz carbonique et la vapeur d'eau. L'un des points clés garantissant une efficacité de conversion élevée réside dans l'obtention d'un chauffage uniforme au sein de la céramique réactive qui doit être poreuse pour permettre l'écoulement des fluides gazeux. ThermASol explorera les comportements radiatifs puis thermo-fluidiques de céramiques virtuelles à texture prescrite par l'utilisation de solveurs éléments finis (LTeN) développés pour le calcul intensif. Les céramiques optimisées seront ensuite élaborées (IRCER) et leurs performances thermochimiques

testées en réacteur solaire (PROMES). Le consortium réuni pourra se positionner comme un acteur incontournable pour toutes coopérations industrielles futures.