

# Cellule Energie - les projets 2018

## HYBIOREM

Le projet HYBIOREM développera un système de production d'hydrogène de très haute pureté par électrolyse de composés issus de la biomasse (glucose, xylose, et/ou cellobiose) provenant de la dépolymérisation de la cellulose et de l'hémicellulose (déchets de l'agriculture). Les faibles potentiels d'oxydation de ces composés en milieu aqueux acide permettent d'envisager des tensions de cellule 2 à 3 fois inférieures à celles nécessaires pour la production d'hydrogène à partir de l'électrolyse de l'eau, ce qui réduit fortement le coût énergétique. Pour réaliser l'oxydation la plus complète possible de ces composés, des catalyseurs plurimétalliques nanostructurés polyfonctionnels à base de platine seront développés et le fonctionnement du réacteur électrochimique (fluidique, thermique et électrodynamique) sera optimisé.

## MaLeFHYCe

L'hydrogène est considéré comme l'un des vecteurs énergétiques les plus prometteurs. Cependant, il est toujours difficile de concevoir de nouveaux composés multi-éléments pour son stockage efficace.

Nous proposons d'appliquer l'intelligence artificielle en tant que concept de rupture dans le domaine de la chimie. Par la présente collaboration entre chercheurs en science des matériaux, en machine learning et en bio-informatique, nous prévoyons d'utiliser les techniques d'apprentissage automatique pour générer de nouveaux hydrures métalliques innovants pour une application performante du stockage de l'hydrogène.

La base de données d'apprentissage contiendra des données d'entrées géométriques et énergétiques obtenues notamment par criblage de calculs « premiers principes ». Elle servira à tester différents algorithmes génératifs pour prédire de nouvelles phases cristallographiques. Après la validation de la robustesse du code, les nouveaux composés émergents seront vérifiés par des mesures expérimentales complémentaires."

## MEBINO

Ce projet vise à obtenir une meilleure compréhension des mécanismes de dégradation mis en jeu lors du cyclage de batteries en électrolyte liquide (Li-ion, Na-ion, LiS) ou tout solide afin de pouvoir les améliorer. C'est dans cette optique que des cellules électrochimiques novatrices adaptées au type de systèmes et d'études envisagées (électrode seule ou interfaces) seront développées pour permettre la réalisation de cyclage in operando dans le microscope électronique à balayage. L'utilisation de micromanipulateurs dans la chambre du microscope permettra la réalisation d'études couplées entre morphologie, évolution chimique, mécanique et surtout de conductivité (par EIS in situ). L'une des considérations prise en compte sera la possibilité de transférer les échantillons entre la boîte à gants et le microscope sans contamination afin potentiellement d'effectuer d'autres analyses post-mortem (TEM, XPS) sur les échantillons étudiés.

## OPEPSELF I

Le LNCMI'G est lors de ses pointes de fonctionnement l'un des instruments de recherche du CNRS les plus consommateurs d'électricité mais il est caractérisé par de très fortes intermittences. Sa puissance maximale de 24 MW correspond à celle de 45000 foyers électriques alors que sa consommation de 14 GWh sur l'année est l'équivalent de "seulement" 3000 foyers. Les 24 MW peuvent être injectés ou retirés du réseau dans des temps de l'ordre de la minute. Le projet explorera les possibilités pour le LNCMI de passer d'un rôle archétypique "d'électro-intensif passif" à celui d'un régulateur local de l'énergie via: le réseau électrique (capacités d'effacement unique) et le réseau de chaleur (récupération de la chaleur fatale du process). Le modèle technico-économique est mal connu

et résultera d'une optimisation sous contraintes qui dépendra fortement du jeu des acteurs locaux et des dispositifs économiques nationaux d'utilisation de l'électricité.

## AquifAir

Ce projet expérimental vise la caractérisation multi-échelle du comportement micromécanique des roches réservoir carbonatées par la réalisation d'essais mécaniques in situ sous microscopie électronique à balayage et tomographie à Rayons X, couplés aux techniques de mesures de champs cinématiques complets par corrélation d'images numériques (CIN). L'analyse de la déformation localisée ou diffuse sera abordée à l'échelle i) mésoscopique de l'agrégat d'oolites, représentative de la roche carbonatée, ii) microscopique de l'agrégat micritique représentative des oolites. Des analyses multi-échelle 2D et 3D seront effectuées sur les mêmes échantillons, mais aussi sur des échantillons de différentes tailles, afin de mettre en évidence d'éventuels effets d'échelle et d'hétérogénéité. Il s'agit enfin de mettre en évidence les mécanismes physiques de plasticité/endommagement, susceptibles d'entraîner la compaction généralisée ou localisée, d'altérer les propriétés de transport hydraulique, et de menacer l'intégrité du matériau et ses capacités de stockage géologique.

## NTC-Alcalin-ion

L'objectif de ce projet est la préparation d'électrodes composites pour batteries Na-ion de capacité accrue (> 500 mAh/g(composite)) fonctionnant à des régimes élevés et présentant une longue durée de vie. Des électrodes combinant la forte capacité des éléments tels que X= Sn ou P (900-2000mAh/g vis-à-vis du Na) aux propriétés structurales et de conduction électronique des nanotubes de carbone (NTC) seront réalisées selon deux approches : 1) en préparant une électrode X/NTC polymérique optimisée en jouant sur la nature du liant polymère et sur les ratios X et NTC, et 2) en préparant un composite intime P/NTC grâce à un traitement thermique flash permettant de condenser une couche de phosphore sur les parois des NTC. Les performances et mécanismes de ces électrodes seront suivis. Ce projet a pour objectif de réaliser des électrodes négatives innovantes et performantes pour batteries Na-ion, en jouant sur la synergie des NTC avec leurs propriétés de conduction électronique et des éléments post-transitionnels avec leurs fortes capacités spécifique et volumique vis-à-vis du sodium. Des essais K-ion sont aussi prévus.

## PCCM

Les piles à combustible apparaissent aujourd'hui comme une source d'énergie alternative pour répondre aux problèmes économiques, environnementaux ainsi que aux défis sociétaux. Notre projet a pour ambition d'introduire, d'implanter et valider une nouvelle méthodologie pour diagnostiquer les piles à combustible tout en réduisant les coûts. Des travaux récents de FCLAB ont permis de développer une nouvelle méthodologie de mesure du champ magnétique de la Pile à Combustible (PAC) en rupture par rapport à d'autres méthodes proposées jusqu'à présent. En ce sens un circuit magnétique est associé au capteur magnétique en permettant d'amplifier le champ magnétique dans ce capteur. Cette nouvelle approche rend possible une analyse plus précise de la distribution du courant dans la PAC.

Le projet vise à :

- Développer des algorithmes de diagnostic de la PAC en utilisant la nouvelle méthodologie.
- Valider le nouveau système de mesure et la méthodologie associée sur une PAC durant son fonctionnement"

## ObGECTIF

La gestion de l'eau liquide en cœur de pile à combustible PEM est cruciale pour l'augmentation de leurs performances (puissance et durabilité). Celle-ci passe par un contrôle des écoulements, notamment au niveau des plaques d'alimentation en réactifs, point de sortie de l'eau liquide de la pile et conséquemment point de noyage possible. Dans ce projet, nous nous proposons d'identifier la mouillabilité «optimale» de cette plaque (de super-hydrophobe à super-hydrophile), et ce en caractérisant les écoulements liquides (tests ex situ) et en validant les effets de la modification de mouillabilité sur le comportement d'une mono cellule en fonctionnement (puissance et

stabilité). Pour ce faire, ce projet s'appuie sur l'expertise reconnue et complémentaire du LTEN sur la gestion de l'eau des piles PEM et de l'IMN sur le greffage moléculaire en vue de modification des propriétés de surface, ici la mouillabilité.

## GEME

Après le développement des drones aériens qui sont maintenant utilisés pour de multiples activités, les drones marins, notamment ceux de surface (ASV) se voient peu à peu confier des missions de plus en plus variées. Elles s'étendent de la surveillance des activités humaines (sécurité, exploitation off-shore, défense, zones protégées) à celle de l'environnement (relevés océanographiques, surveillance et suivi de la faune marine, zones de pêche). De nombreuses missions peuvent maintenant être accomplies par ces « bateaux » d'un nouveau type, fonctionnant d'une façon autonome. Le principal challenge de ce projet est la gestion de l'énergie à bord d'un ASV développé par différents laboratoires de l'université de Montpellier. Aujourd'hui, le principal frein au développement des drones et des ASV est la quantité et la disponibilité de l'énergie embarquée.

## IMPEC

Remarquables du fait de leur caractère écologiquement durable, les piles enzymatiques à combustible H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> imposent pour leur développement des ruptures technologiques. Ce projet de recherche vise à lever la limitation liée à la stabilité des enzymes redox dans les assemblages membrane/électrodes. Il se propose d'étudier divers couples enzymes/membranes séparatrices, différant par leur pH optimum d'activité pour les enzymes, et leur spécificité de conduction ionique (échange de protons/cations, d'anions et amphotères) pour les membranes. Ces dernières seront synthétisées (dans le cadre du L.I.A. Madirel/CNRS/Université de Rome Tor Vergata) et caractérisées ex situ pour évaluer leur changement morphologique (gonflement), leur conductivité ionique (par spectroscopie d'impédance) et leur compatibilité avec les enzymes dans différentes conditions électrolytiques. L'objectif à terme est de déterminer les trios enzyme/membrane/électrolyte les plus adaptés pour augmenter les performances du cœur de la pile tout en réduisant ses dimensions (miniaturisation) afin de minimiser la chute ohmique et dans le but final d'optimiser la conception, la réalisation et le fonctionnement des piles enzymatiques à combustible.

## Tournesol

Ce projet a pour but le développement d'une feuille artificielle fluïdique à base de micro- milli-réacteur photochimique pour le stockage de l'énergie solaire et sa conversion ultérieure en électricité au sein d'une batterie rédox en flux. Le principe repose sur la miniaturisation d'un réacteur photochimique fluïdique afin de mimer les dimensions d'une feuille végétale et ainsi accélérer une réaction de photosynthèse mimant les mécanismes photo-rédox du règne animal. Dans ce procédé, le photo-combustible est hybride : d'origine végétale (amidon = source de H<sub>2</sub>) et animale (dérivé de flavine = F). Au cours du processus le photo-combustible subit une réaction d'oxydo-réduction à l'état excité et génère ainsi une espèce réduite de la flavine (FH<sub>2</sub>) présentant une densité énergétique élevée, qui peut être stockée et qui à la demande est convertie en électricité (anolyte) au sein d'une batterie rédox en flux. De plus en combinant cet anolyte avec un catholyte présentant une cinétique de réoxydation rapide à l'air permettrait de limiter l'utilisation de métaux rares à l'anode et la cathode et ainsi de réduire les coûts ainsi que l'empreinte écologique de la batterie rédox en flux. Ce projet qui fait intervenir une approche originale pour le stockage de l'énergie solaire permettra la production d'un combustible réversible innovant, durable et non toxique, issu de la biomasse (réserve de H<sub>2</sub>), rentre dans le cadre de cet appel à projet PEPS Energie. De la même manière l'élimination de métaux rares aux niveaux des électrodes de la batterie en flux contribue à l'amélioration des connaissances dans le domaine des piles à combustible. Cette approche innovante et biomimétique s'apparente à un dispositif photovoltaïque/batterie de nouvelle génération. En fin de projet nous envisageons des tests en conditions réelles d'illumination solaire afin de dimensionner théoriquement le procédé pour des applications domestiques.

## TAPES

Le projet proposé par les deux partenaires que sont l'Institut Néel et le Laboratoire de Science et Ingénierie des Matériaux et Procédés (SIMaP) est axé sur l'optimisation des rubans aux propriétés multicaloriques élaborés par trempe sur roue, une méthode qui confère au matériau une forme plus propice aux utilisations industrielles. De plus les compositions de ces alliages ne sont pas critiques en termes de ressources (pas de terre rare). Les conditions d'élaboration ainsi que les compositions permettant un effet élastocalorique ou/et un effet magnétocalorique à température ambiante seront recherchées sur ces rubans. Les propriétés mécaniques et structurales seront également étudiées, parce qu'elles sont à la base des effets élastocaloriques. En cas de fragilité des rubans, des pistes d'amélioration seront envisagées.

## CéraMicroPaC

Visant à contribuer à l'émergence de la technologie PEMFC, le projet CéraMicroPaC s'inscrit dans le développement de nouveaux assemblages membrane-électrodes performants, durables et à bas coût fonctionnant dans la gamme de températures 120-150°C. Le principal objectif de ce projet est de démontrer la faisabilité d'élaborer, par une approche moléculaire, de nouveaux matériaux d'électrodes de type céramique à base de Si, N, B et C alliant une microstructuration contrôlée et une porosité hiérarchisée à d'excellentes propriétés thermo-structurales. Pour ce faire, deux stratégies d'élaboration seront mises en oeuvre : d'une part, la voie polymère pré-céramique comme méthode chimique, d'autre part, la photolithographie couplée au nanomoulage comme technique de mise en forme. De telles électrodes, présentant sur une de leur face une nanoporosité parfaitement contrôlée, devraient permettre de supporter de manière parfaitement conforme et intégrée une membrane de type polymère plasma, permettant ainsi de constituer des assemblages membrane-électrodes spécifiquement adaptés à la technologie PEMFC « haute température ».

## CORINThe

L'intensification des échanges thermiques est au cœur de l'amélioration de l'efficacité énergétique de nombreux secteurs applicatifs comme l'industrie manufacturière, l'automobile, le bâtiment ou dans le domaine de la production d'énergie renouvelable. On s'intéresse ici aux systèmes de refroidissement passifs, dont l'efficacité impacte bien souvent le rendement global des systèmes qu'ils refroidissent, en raison de la difficulté de maîtriser un phénomène naturel. L'objectif de ce projet est la compréhension des mécanismes fondamentaux conduisant à l'intensification des transferts en convection naturelle turbulente par modification de l'état de surface des parois (intensification supérieure à l'augmentation de surface). Il s'agit d'une étape préalable nécessaire à la manipulation et au contrôle actif de ces mécanismes. En effet, l'identification des actionneurs les plus efficaces, des observables pertinents pour qualifier l'état du système et de la loi de contrôle-commande demande une connaissance fine des phénomènes physiques à l'origine de l'intensification des transferts ainsi que des propriétés des structures fluides les plus énergétiques thermiquement.

## Na-ion Flow

Le développement de nouveaux systèmes de stockage stationnaire de l'énergie est primordial afin d'accompagner l'émergence des énergies intermittentes telles que l'éolien ou le photovoltaïque. Dans ce cadre, les batteries à circulation (Redox-Flow), permettant un découplage énergie et puissance, sont parfaitement adaptées. La technologie actuelle la plus avancée, la technologie au vanadium étudiée depuis les années 1980, reste chère et limitée en terme de puissance et de capacité massique. Elle utilise des couples redox toxiques et fortement corrosifs qui nuisent à la durabilité du système et nécessitent des membranes sélectives ioniques qui augmentent le coût du système. Récemment, une nouvelle voie a été proposée en utilisant des suspensions de matériaux d'insertion du lithium et de carbone pour préparer de nouveaux posolytes et negolytes (approche « semi-solide »). Le présent projet vise à modifier cette approche pour une technologie avec matériaux d'insertion du sodium en utilisant des médiateurs redox dans l'objectif d'améliorer les propriétés en puissance de ce type de système. L'approche est donc de préparer des électrolytes innovants (par greffage de médiateurs ou par immobilisation des matériaux) et de comparer leurs propriétés sous flux par rapport à un électrolyte « classique » de type semi-solide.

## SOL2CAT

SOL2CAT aims at designing novel porous hybrid solids as a three-in-one platform (porosity, catalysis and light capture) in order to encode nanocages with photocatalytic activity by combining 3 key functional components into a single solid: i) a robust Metal Organic Framework (MOF) host (selected for its porosity and/or functionalization potential), ii) polyoxometalates (POMs), as electron reservoirs or catalysts, iii) and porphyrins as photosensitizers. Although intense research efforts are being devoted to the discovery of POM-based and MOF-based photocatalysts, the quest of noble metal-free, heterogeneous, selective and recyclable solids combining the three realms of porphyrins, POMs and MOFs has remained unexplored so far. Building up on our recent proof-of-concept results in this new sub-field, we wish to further i) explore the covalent grafting of porphyrins into selected MOFs followed with the encapsulation of POMs, in order to get optimal control over the POM:porphyrin ratio and thus enhance the photocatalytic performances; ii) use thin film technology (rather than suspension of powders) for synthesizing the POM@MOF photosystems, thus allowing their more versatile use in photo- (or photoelectro-) catalytic processes.