

Cellule Energie – les projets 2021

ALPHA

La maîtrise de l'énergie dans le secteur du bâtiment est un enjeu crucial tant l'impact environnemental du secteur est important (40% de l'énergie finale consommée et 20% des émissions de gaz à effet de serre). Outre des performances du bâti élevées, les objectifs fixés ne peuvent être qu'atteints par un management intelligent et optimisé des différents systèmes (chauffage, éclairage, ?) tout en intégrant un acteur essentiel et trop souvent oublié : l'utilisateur. Celui-ci a des envies, des comportements et des actions qui fluctuent, sans obéir à des règles, et pourtant peuvent avoir des impacts conséquents d'un point de vue énergétique. Cette intégration ne peut se faire que par un changement de culture pour permettre une implication de l'occupant en adéquation avec les systèmes de management de l'énergie.

Le projet ALPHA vise à apporter des solutions innovantes de maîtrise de l'énergie dans le bâtiment qui intègre la rationalité limitée des usagers, en s'appuyant sur les compétences complémentaires issues des sciences de l'ingénieur et des sciences humaines et sociales.

AUTOMATE

Bien qu'existera toujours une part « éditorienne » dans la recherche de nouveaux matériaux thermoélectriques, mieux nous cernerons la chimie qui leur est sous-jacente, plus efficace sera leur découverte. Pour ce faire, l'exploitation de la puissance de l'apprentissage automatique (Machine Learning), de la science des données et de la connaissance du domaine pour découvrir de nouveaux matériaux innovants de manière autonome, constitue un moyen encore trop largement sous-exploité dans ce domaine. Notre projet vise à sélectionner de manière adaptative les meilleurs modèles d'apprentissage automatique afin de trouver le matériau optimal qui réponde à tous les critères de « bon matériau thermoélectrique ». Nous nous intéresserons plus particulièrement aux composés à clusters de métaux de transition chalcogénés dont certains exemples montrent des propriétés thermoélectriques remarquables. Les études se feront en symbiose entre les deux partenaires au LINK (apprentissage automatique, proposition de nouvelles compositions chimiques et mesures thermoélectriques) et à l'ISCR (synthèse et caractérisation de ces nouvelles compositions).

BASELECTOUR

Ce projet porte sur le recyclage de déchets uranifères du cycle du combustible nucléaire en élément de batterie stationnaire. L'emploi de matériaux fluorés dans les batteries stationnaires est une possibilité bien admise, mais l'utilisation de matière recyclée uranifère n'a pas encore été développée. Ce projet se propose de tester les formes d'oxyfluorures et de fluorures d'uranium les plus faciles d'accès chimiquement, afin de caractériser leur évolution cristallochimique lors de leurs processus électrochimiques, et ensuite d'affiner les rapports entre oxygène et fluor pour optimiser les meilleures performances en batteries.

CALEX4H2

L'électrolyse de l'eau ou Power-to-gas est devenue une alternative incontournable pour la production de l'hydrogène vert et donc pour le stockage durable de l'énergie. Cependant, la conception d'électrolyseurs à base de matériaux éco-compatibles, recyclables et exempts d'éléments stratégiques et rares tels que platine, ruthénium, iridium, cobalt ou palladium demeure un défi scientifique et technologique. Une alternative clé est de repenser radicalement la manière de fabriquer ces systèmes. C'est précisément l'objectif de ce projet collaboratif et multidisciplinaire CALEX4H2 qui vise à élaborer une nouvelle génération d'électrocatalyseurs sans ces métaux. Notre système sera constitué d'une électrode contenant un mélange nickel-phosphore-soufre pour lequel nous allons identifier la phase la plus prometteuse pour la réaction d'évolution d'hydrogène. Ce projet reposera sur une étroite synergie entre l'expérience et la théorie et impliquera des chercheurs experts en science des matériaux, en électrocatalyse, en (électro-)chimie théorique et en membranes. Ils travailleront de concert pour relever le défi en combinant les approches les plus avancées de leur domaine.

CATHETER

Les batteries « redox flow » à base aqueuse stockent et restituent efficacement l'énergie fournie par les sources variables solaires ou éoliennes. Elles comportent une cellule avec deux électrodes séparées par une membrane perméable aux ions et contenant des solutions liquides d'espèces électroactives (négolyte et posolyte) qui sont pompées dans la cellule à partir de réservoirs de stockage. Les batteries existantes sont basées sur des solutions sulfuriques de vanadium, rare, cher et non renouvelable. Récemment (Science, 2014), il a été proposé de remplacer le vanadium par des anthraquinones (ex 2,6-dihydroxy) comme négolyte et par le couple ferri-/ferrocyanure comme posolyte. Toutefois, ces anthraquinones présentent une solubilité limitée dans l'eau et ne sont pas agro-sourcées. Nous proposons de réaliser un criblage théorique (méthode COSMO-RS) et expérimental (synthèse et électrochimie) d'anthraquinones (ex. rufigallol) accessibles par simple couplage d'acides benzoïques polyhydroxylés abondants (ex acide gallique) afin d'optimiser leurs propriétés électrochimiques et leur solubilité.

CIGALE-PV

Les technologies photovoltaïques (PV) inorganiques en couche mince utilisent principalement du CdTe, du Si amorphe ou du $\text{CuIn}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Se}_2$ (CIGS). La découverte récente des pérovskites hybrides montre que des avancées significatives sont permises par la recherche de nouveaux matériaux photovoltaïques. Dans ce projet, nous proposons d'investiguer un matériau émergent qui n'a jamais été déposé en couches minces mais qui présente des propriétés tout-à-fait intéressantes pour le PV. Il s'agit d'un oxyde de $\gamma\text{-CuGaO}_2$, une sorte de CIGS sans indium et où le Se/S est remplacé par O. Il est basé sur des éléments qui sont stables, non-toxiques et relativement abondants. Ce matériau possède une bande interdite de 1,47 eV qui est donc tout-à-fait adaptée pour utilisation en tant qu'absorbeur PV. Le travail consistera à fabriquer des couches minces de $\gamma\text{-CuGaO}_2$ par deux techniques, l'ablation laser pulsé (PLD) et la AP-SALD (Atmospheric-Pressure Spatial Atomic Layer Deposition), à analyser les propriétés structurales, optiques, de surface, et électriques, à optimiser les procédés de fabrication, et à étudier le potentiel de ce matériau pour le PV.

CoMet

Modern societies are highly energy-voracious with the vast majority of this energy coming from the combustion of fossil fuels whereof methane is a significant part. In contrast to heavier hydrocarbons, methane is readily produced in carbon-neutral ways. To circumvent the drawback of methane's low volumetric energy density, it is often converted to methanol, suitable for conventional vehicle motors, in costly energy-intensive processes. The ability of the enzyme methane-monoxygenase (MMO) to perform this conversion raised interest in biotechnological avenues which, however, suffer from low efficiencies. Our research on enzyme-mineral similarities strongly suggests that the mineral fougérite, structurally affine to the di-iron catalytic site of the enzyme sMMO, may be able to perform this reaction. Fougérite would lend itself for industrial-scale processes due to its environmental abundance and ease of in-vitro synthesis. This project proposes to combine expertise of biological systems and on minerals with cutting-edge techniques from nanotechnology to investigate the conversion of green methane to methanol using fougérite as a novel technological approach.

GIALE

La micro-cogénération à pile à combustible (FC m-CHP) a un fort potentiel de réduction de la consommation d'énergie dans les applications résidentielles. La gestion de l'énergie du système FC m-CHP pour atteindre à la fois une efficacité et une durabilité élevées du système est un problème difficile, en particulier avec la dégradation des piles à combustible et les demandes de charge incertaines. Ce projet vise à surmonter ces difficultés scientifiques en proposant une stratégie de gestion de l'énergie assistée par l'Intelligence Artificielle (IA). Avec le déploiement des techniques d'IA, l'efficacité du système devrait être maintenue en de haut niveau pendant un cycle de vie FC prolongé. La compétitivité du système FC m-CHP pourra ainsi être améliorée en application résidentielle. Le projet sera réalisé en collaboration entre laboratoires LIS (UMR 7020) et IUSTI (UMR 7343) avec des compétences complémentaires.

InSuLinE

Lignocellulosic biomass is the most abundant renewable carbon resource on earth. Among its compounds, lignins, the most abundant renewable resource of aromatic carbons, are considered as wastes and mainly burned despite

their very interesting phenolic structure that can produce building blocks of high interest for the chemical industries. Therefore, the depolymerization of lignins through oxidative ether bonds cleavage into simpler compounds of higher added value constitutes a major scientific challenge. On the other hand, particular interest is focused on photoelectrochemistry, a multidisciplinary field of research promising because it allows reactions to be carried out at a solid/liquid interface solar illumination at an advantageous energy cost. As an effort to allow more efficient use of biomass, the InSuLinE project aims to explore the conversion of lignins and lignins model compounds by photoelectrochemical means.

MCADAMS

L'utilisation de l'hydrogène comme vecteur énergétique suscite aujourd'hui de grands espoirs. Néanmoins, le seul procédé d'obtention potentiellement neutre en émissions de gaz à effet de serre est l'électrolyse de l'eau, dont le rôle est aujourd'hui marginal du fait de son coût. Afin de réduire ce coût et le recours à des matériaux rares, on souhaite vérifier la faisabilité d'une modulation mécanique de l'activité chimique des surfaces, qui permettrait l'utilisation de matériaux plus abondants. Cette modulation peut également permettre une meilleure maîtrise de la croissance des bulles à la surface de l'électrode. Ce projet vise donc la réalisation d'un système modèle pour l'étude de ces couplages mécano-chimiques et le choix de l'instrumentation associée. Ce dispositif permettra l'étude systématique des propriétés de plusieurs matériaux afin de sélectionner les meilleurs candidats pour la réalisation d'électrodes performantes et bon marché.

MetalSponge

Our ambition is to explore design and manufacturing routes to novel highly porous metals that find use in several important structural applications, including e.g. in pressurized water nuclear reactors (PWR). The materials we aim to study are architected composites, whereby a dense metallic matrix is made lightweight by embedding closely-packed porous inclusions with arbitrary ellipsoidal shape, size and orientation.

The underlying hypothesis of the study is that the porous metal architecture can be optimally designed - via computational homogenization - to achieve high stiffness even at very low relative density (i.e. below 20%). Moreover, these composites can be rationally designed to combine material anisotropy with directional response. Motivations for this exploratory research stem from our previous work on particle-reinforced composites, coupled with the belief that modern additive manufacturing methods make it now possible to extend our design strategy to metals and alloys. Given the exploratory nature of the project, we will investigate families of two-dimensional (2D) porous metals aiming at exploring the processing/structure/properties in such composites.

Operationally, our strategy begins by generating the porous microstructures using a random sequential absorption algorithm (RSA), which allows us to selectively manipulate the inclusion shape, size and orientation. These unit cells are then assessed numerically using computational homogenization techniques implemented into finite element (FE) simulations, with the goal of defining the size of the representative volume element (RVE) to be used in experiments. Experiments will be designed to probe the strength of these porous metals using additively-manufactured test samples. Specifically, we plan to use selective laser melting (SLM) as additive manufacturing technology, whereby matrices of 316L stainless steel will be employed. The choice of this metal lies in its great practical importance in PWR. Finally, mechanical testing will be combined with in-depth microstructural characterization, by electron microscopy and EBSD analysis notably, with the goal of identifying the defects limiting the strength of these novel porous metals.

MICROBIO_CO2

La valorisation du CO₂ à travers la production de biocarburants constitue un enjeu sociétal et économique majeur. L'une des pistes les plus prometteuses porte sur l'utilisation d'enzymes microbiennes catalysant la conversion réversible du CO₂ en formiate, un composé précurseur de biocarburants et utilisable directement dans certaines piles à combustibles. Si ces biocatalyseurs présentent l'avantage d'être basés sur des matériaux non toxiques et abondants sur Terre, ceux étudiés jusqu'ici ont une grande sensibilité à l'oxygène et une faible efficacité catalytique pour la réduction du CO₂ ce qui limite leur utilisation dans des filières de biotechnologies blanches. Nous avons identifié un biocatalyseur d'un nouveau type résistant à l'oxygène. L'objectif du projet est de le caractériser en détail et d'évaluer ses potentialités à travers une approche intégrative reposant sur un panel d'expertises uniques en France. L'une des retombées attendues de ce projet est de maîtriser la production et d'optimiser le fonctionnement de ce biocatalyseur afin d'envisager par la suite son utilisation en catalyse dans la constitution de bioélectrodes pour l'électroréduction du CO₂.

MIMECO

Mechanical energy harvesting using piezoelectric MEMS (MicroelectroMechanicalSystems) is one of the solutions proposed to achieve autonomous electronic devices. Current research is focusing on the integration of new active materials in these MEMS. MEMS based on Pb(ZrTi)O₃ layers screen-printed and conventionally sintered on a steel substrate have recently shown interesting performances but the microstructure, chemistry and interfaces still need to be optimized. Also, the sintering time and temperature (2h at 900°C) and the presence of lead are in conflict with current societal requirements. The MIMECO project aims at the one-step sintering by Spark Plasma Sintering (SPS) of Pb-free piezoelectric layers of (KNa)NbO₃ printed on a metal substrate. Here, the challenge is to develop these metal/ceramic multilayers at low temperature.

NanoMod

Les propriétés exceptionnelles des polymères nanocomposites (NC) en font des matériaux de choix en tant qu'isolants électriques dans de nombreuses applications allant du génie électrique à l'électronique de puissance. En effet, l'addition d'une faible teneur en nanocharges dans une matrice polymère peut conduire à l'amélioration de ses propriétés électriques, thermiques et/ou mécaniques. L'enjeu principal est de comprendre les phénomènes physiques en jeu, et l'impact de l'interphase, qui se crée entre la matrice et les nanocharges, sur les propriétés du NC à l'échelle macroscopique. Le projet NanoMod, qui allie mise en œuvre, caractérisation physico-chimique et diélectrique à l'échelle nanométrique et macroscopique, et modélisation multi-échelle, vise à identifier les phénomènes physiques et les paramètres impactant l'interphase, à comprendre l'influence de cette interphase sur les propriétés macroscopiques, à prédire le comportement diélectrique des NC, et enfin à pouvoir développer des matériaux NC innovants avec des propriétés ciblées.

PHONICAF

Notre principal objectif est le développement de photocatalyseurs stables, à fortes performances et bon marché dérivés du nitrure de carbone graphitique (g-CN) permettant la photoconversion de l'eau en hydrogène. Ce challenge ne pourra être relevé que par une parfaite connaissance associée à une maîtrise de la structure ainsi que des propriétés électroniques de g-CN. Dans ce contexte, deux verrous devront être levés par le développement expérimental. Tout d'abord, la synthèse de g-CN devra être optimisée afin de contrôler l'organisation 3-D des feuillets ainsi que la porosité et éviter toute agglomération durant les réactions photocatalytiques. Par la suite, la structure de g-CN sera modifiée par traitement plasma afin de fonctionnaliser ce matériau par des fonctions oxygénées et azotées qui vont non seulement améliorer son hydrophilie mais également générer des défauts structuraux qui permettront de diminuer la probabilité de recombinaison des porteurs de charges photogénérées. Nous espérons ainsi pouvoir produire des catalyseurs à forte activité et ne contenant pas de métal noble pour la production d'hydrogène par photodécomposition de l'eau.

SISPO

Le projet SISPO vise à développer et explorer une nouvelle famille de polymères semi-conducteurs, alternés de type D-A, basés sur une structure simple et facile d'accès. De fines modifications doivent permettre de moduler et d'ajuster les niveaux d'énergie des orbitales frontières afin de synthétiser des matériaux de type p et de type n basés sur une même architecture. Une telle famille de polymère devrait permettre l'élaboration de cellules solaires organiques à bas coûts, stables et efficaces. Le recours à deux polymères très semblables devrait améliorer la miscibilité des deux constituants. Ce point est particulièrement important car l'excès de ségrégation habituellement rencontré dans les systèmes « tout polymère » constitue un facteur critique pour atteindre des efficacités élevées. Enfin, envisager des structures chimiques proches pour les deux constituants de la couche active devrait permettre de diminuer les coûts de synthèse à grande échelle par la mise en commun de synthons tel que le monomère quinoxaline. Ce projet implique des chercheurs provenant de trois laboratoires situés sur le même campus et habitués à travailler ensemble, gage d'efficacité.

THIOBAT

Le développement de nouveaux conducteurs ionique du lithium à partir d'éléments abondants est l'un des défis à relever pour faire éclore la technologie de batterie « Lithium tout-solide » et la rendre compétitive face à l'hégémonie du « Lithium-ion ». Nous proposons d'explorer la chimie peu connue des oxythiophosphates (PO₄-xSx)³⁻ afin d'obtenir des matériaux d'électrolyte solide qui équilibrent les bonnes propriétés de conduction ionique et

mécanique des thiophosphates (PS₄)³⁻ et la stabilité électrochimique à haut potentiel des phosphates (PO₄)³⁻. Des méthodes de synthèse et de mise en forme basse température viendront compléter cette approche de substitution anionique pour assurer le faible impact environnemental des matériaux développés. Finalement, l'assemblage de batteries tout-solide permettra de mesurer les performances de ces nouvelles phases et d'étudier leur réactivité au contact des matériaux de cathode, en particulier des cathodes à haut potentiel, susceptibles de maximiser la densité d'énergie de cette technologie.

COMITHER

L'objectif de ce projet intitulé COMITHER est d'élaborer et de caractériser des couches minces thermoélectriques réalisées à base d'alliages de type fer-vanadium-aluminium (Fe-V-Al). L'enjeu est d'optimiser les propriétés électroniques et thermiques en vue de réaliser à plus long terme de nouveaux micro-générateurs, micro-refroidisseurs ou capteurs thermoélectriques pour des utilisations en micro-électronique par exemple. Les partenaires de ce projet que sont l'Institut Néel (NEEL) et l'Institut de Chime et des Matériaux Paris-Est (ICMPE) ont décidé d'étudier les alliages de type Fe-V-Al qui présentent l'avantage d'être peu chers et peu toxiques. Néanmoins, les performances thermoélectriques et les rendements actuels des dispositifs réalisés avec cet alliage restent encore à améliorer, surtout en couche mince. Les travaux de COMITHER porteront sur le choix des compositions dans le système Fe-V-Al-Ti, et sur l'élaboration des matériaux sous forme de couches minces par un procédé de pulvérisation cathodique magnétron et sous forme massives par fusion - solidification. Une confrontation des propriétés électroniques et thermiques des matériaux en couches minces et en massifs sera effectuée en fin de projet. Les deux partenaires NEEL et ICMPE sont complémentaires avec respectivement des compétences en couches minces et matériaux massifs intermétalliques et sont spécialistes de thermoélectricité.

MULTISPRAY

Gas-assisted atomization, where a liquid stream is broken up into fine droplets by a gas jet, is an efficient process to obtain a high-quality spray. It has a wide range of applications in the manufacturing, pharmaceutical, agricultural and transport industries. Being able to predict at least the droplets size and spatiotemporal distribution is crucial for these situations, especially as they often determine other coupled physical phenomena (flame stability control for combustion application for instance). There is a lack of reliable predictions or models, and the development of such atomizers relies on empirical correlations. Such advances would not only increase process efficiency, with economic, environmental and safety outcomes, but it would also enable design capacity. This project aims at advancing modeling capacity as well as developing high-fidelity predictions of the spray relevant parameters, through detailed experiments over the inherently wide parameters space. In particular, it is necessary to answer the scientific open question of the role of turbulent fluctuations on liquid inclusion fragmentation in gas turbulence, which is not considered in current models.

SysCoGreC-OPV

Le projet a pour but de développer de nouveaux matériaux entrant dans la composition de cellule solaire organique. Ces matériaux, produits à partir de glucide naturel, auront le rôle de donneur ou d'accepteur d'électrons. Les synthèses vertes en peu d'étapes seront privilégiées. Les propriétés optiques et électroniques seront étudiées avant de produire les cellules solaires directement sur le site d'Angers. Une équipe du laboratoire Moltech-Anjou à Angers sera associée à une équipe de l'IMMM du Mans pour réaliser ce projet, chaque équipe étant complémentaire et nécessaire à l'exécution du projet.