



PROGRAMME
DE RECHERCHE
HYDROGÈNE

Newsletter
Décembre 2024



Programme et Équipements Prioritaires
de Recherche Hydrogène décarboné



EDITO

Ces derniers mois ont été très riches en événements liés au Programme et Équipements Prioritaires de Recherche sur l'hydrogène décarboné (PEPR-H2) ! Ainsi, la première école organisée dans le cadre du programme s'est tenue pendant une semaine à La Grande-Motte, près de Montpellier. Organisé avec la fédération FRH2 du CNRS, cet événement a réuni la très grande majorité des doctorantes et doctorants engagés directement dans les 19 projets du programme. L'objectif était de disséminer les connaissances sur les différents aspects de la chaîne de valeur de l'hydrogène.

Un autre événement important du programme est la tenue de sa journée de valorisation annuelle à laquelle plusieurs chercheurs et industriels ont participé. La matinée a été l'occasion de porter à la connaissance des acteurs de la filière des outils et méthodes réalisés dans le cadre des projets du programme et susceptibles de les intéresser. L'après-midi s'est déroulée sous forme d'un atelier autour de l'identification des axes de R&D pour préparer/dérisquer la mise à l'échelle des

technologies, en croisant les besoins de la filière et l'expertise des chercheurs.

Par ailleurs, le programme a continué sa série de séminaires destinés à la communauté, avec deux focus ces derniers mois : un séminaire sur les matériaux à haute entropie et leurs fonctionnalités, et un autre sur les procédés alternatifs de production d'hydrogène non traités dans des projets du PEPR-H2. Le dossier de cette lettre présente justement un compte rendu de ce dernier séminaire.

Concernant les actualités, cette lettre donne un éclairage sur quatre projets de recherche du programme : le stockage de l'hydrogène en milieu liquide (BHYOLOHC, GREENH3, ESKHYMO) et sur la durabilité des PEMFC (DURASYS-PAC).

Enfin, plusieurs vidéos mettant en image les objectifs et les attendus des projets du programme ont été tournées et seront prochainement disponibles sur la chaîne YouTube. Le lien vers la vidéo du projet DAEMONHYC est visible sur <https://www.pepr-hydrogene.fr/le-projet-daemonhyc-a-la-loupe/>

*Hélène Buret et Abdelilah Slaoui,
Directeurs scientifiques du PEPR-H2*



LES ACTUALITÉS DES PROJETS DU PEPR-H2

- # Supports de catalyseurs en céramique nanostructurée
- # Production d'ammoniac par électroréduction de N₂
- # Un banc d'essai dédié à la sécurité de l'hydrogène liquide
- # Améliorer la durabilité des piles PEMFC grâce à l'IA et aux modèles physiques



PROCÉDÉS ALTERNATIFS DE PRODUCTION D'HYDROGÈNE DÉCARBONÉ



LES ÉVÈNEMENTS À VENIR

JANVIER
FÉVRIER
MARS & MAI 2025



LES ACTUALITÉS DES PROJETS DU PEPR-H2

Ce numéro s'intéresse aux projets de recherche sur le stockage de l'hydrogène en milieu liquide et sur la durabilité des PEMFC.

Supports de catalyseurs en céramique nanostructurée

Dans le cadre du projet **BHYOLOHC** dédié au stockage de l'hydrogène en milieu liquide polyols, l'Institut européen des membranes (IEM) et ses partenaires ont mis au point un nouveau support en céramique à grande surface spécifique.

La mise en forme de MOFs (Metalic-Organic Frameworks) constitue un défi crucial pour leur déploiement à grande échelle. En particulier, maîtriser précisément l'orientation et l'organisation des cristaux de MOF sur des substrats permet de concevoir des matériaux innovants aux propriétés personnalisées applicables dans des domaines variés tels que la catalyse, le stockage de gaz, la détection, l'optique ou l'électronique.

Une croissance épitaxiale contrôlée grâce aux micro-ondes

Ce travail démontre pour la première fois que l'irradiation par micro-ondes permet une croissance épitaxiale contrôlée de cristaux de MIL-53(Al) sous forme d'oursins, par conversion hydrothermale d'une

couche d'alumine déposée par ALD sur une mousse céramique. Les caractéristiques des cristaux obtenus (taille, homogénéité, dispersion, quantité) dépendent fortement de la nature du support céramique et de sa capacité à absorber les micro-ondes. In fine, il a été démontré que la calcination à 1000°C des cristaux de MIL-53(Al) supportés génère des fibres d'alumine nanostructurées bien ancrées sur les mousses en céramique, générant ainsi des supports de catalyseurs originaux à grande surface spécifique. Ces avancées promettent de nouvelles opportunités pour l'ingénierie de matériaux fonctionnels

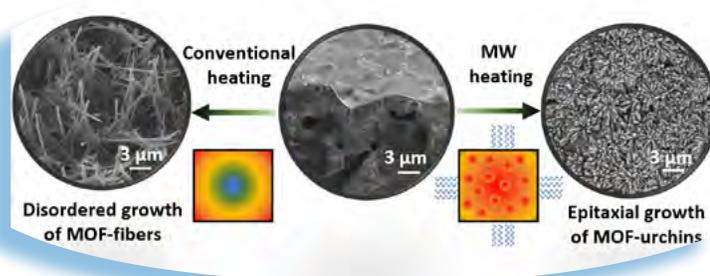


Figure : Structures de MOF obtenues par chauffage conventionnel ou microonde. © IEM (CNRS / Univ Montpellier / ENSC Montpellier)

Scientific Reports 14 (2024) 20067 <https://doi.org/10.1038/s41598-024-71150-7>

Limor Ben Neon, Martin Drobek, Mikhael Bechelany, Anne Julbe, IEM – Montpellier
Bertrand Rebiere, ICGM – Montpellier

Production d'ammoniac par électroréduction de N₂

Le projet **GreenNH3** vise à produire l'ammoniac (NH₃) à partir de l'azote de l'air par procédé catalytique. Dans ce cadre, le laboratoire de chimie (LCH) de l'ENS de Lyon et ses partenaires développent des solvants innovants, les liquides ioniques poreux. Les cavités permanentes créées par la présence de MOF (Metal Organic Framework) permettent de stocker des petites molécules, ici le diazote.

Liquides ioniques poreux, des solvants prometteurs pour l'électroréduction de N₂ en ammoniac

L'équipe du LCH de l'ENS de Lyon a mis au point et étudié des électrolytes liquides ioniques (IL) basés sur des cations quaternaires (phosphonium et pyrrolidinium) et l'anion NTf₂ (TFSI).

Figure : Vue par dynamique moléculaire d'un liquide ionique poreux (zone d'interface entre le structure métallo-organique créant la porosité et les ions du liquide). © LCH (CNRS / ENS Lyon / Univ Claude Bernard)

La porosité est obtenue en mettant en suspension des particules de 200 nm d'une structure métallo-organique supramoléculaire (MOF ZIF-8) dans un IL. Les liquides obtenus ont été caractérisés en termes de taille des particules, de stabilité de la suspension, de rhéologie et de fenêtre électrochimique. Propriété clef et remarquable, la solubilité de N₂ dans ces liquides poreux peut être augmentée d'un facteur 4 avec seulement 5% de MOF. Les fenêtres de stabilité électrochimique des ILs poreux sont par ailleurs similaires à celles des ILs purs, typiquement de -3 à +2,5 V.

Visualisation de l'interface liquide/solide par simulation

Des simulations de dynamique moléculaire ont pu apporter une vision détaillée de l'ordre des ions près de la surface, la distribution des molécules de soluté (N₂, NH₃, isopropanol) et leur diffusion dans le système composite (cf figure ci-contre).

Ces liquides sont maintenant utilisés et testés comme électrolyte pour la catalyse électrochimique de réduction de N₂ en ammoniac, en synergie avec les catalyseurs mis au point par les différents partenaires du consortium GreenNH3.

Ces travaux sont parus dans **ACS Nano** (2023) et **J. Phys. Chem. B** (2024)

Chiara Corsini, Cintia Marques Correa, Margarida Costa Gomes, Agilio Padua, LCH – Lyon
Marc Robert
Coordinateur du projet GreenNH3



Un banc d'essai dédié à la sécurité de l'hydrogène liquide

Le projet **ESKHYMO** a pour objectif d'apporter des données nouvelles pour contribuer au développement sûr de la filière hydrogène liquide. Il s'intéresse à 2 scénarios d'accident possible. Le premier, qui fait l'objet du nouveau dispositif présenté ici, concerne son stockage dans des réservoirs cryogéniques isolés sous vide. Lorsque ce vide est perdu par entrée d'air ou d'hydrogène, l'hydrogène liquide reçoit un important flux thermique provoquant sa vaporisation brutale. Ce changement d'état s'accompagne d'une montée en pression susceptible de conduire à l'éclatement du réservoir en cas d'absence de moyens de protection adaptés. Les données quantifiant le flux thermique sont éparpillées et incomplètes dans la littérature et ne permettent de dimensionner correctement les mesures de protection que dans de rares cas.

Conception d'un cryostat instrumenté

Le CEA-Irig a finalisé en novembre 2024 le design d'un banc d'essais (cf. schéma ci-contre) pour pallier cette absence de données. Ce banc de test transportable permettra de réaliser des pertes de vides volontaires et réversibles dans l'enceinte à vide du réservoir afin de mesurer la puissance déposée sur le fluide.

Le cryostat est dimensionné pour une pression de 24 bar ce qui permet de couvrir différentes pressions opératoires jusqu'à l'état supercritique de l'hydrogène en fonction des applications. L'appel d'offres pour la fabrication du banc sera publié tout début 2025.

Exploitation et perspectives

Le banc d'essai développé par le CEA-Irig est évolutif et permettra d'étudier l'influence de différents paramètres sur le dimensionnement des organes de sécurité (soupapes, disques de rupture, etc.) des réservoirs d'hydrogène liquide. Il sera par exemple possible d'étudier l'influence du type de super-isolant mis en œuvre (famille des MLI Multi-Layer Insulation), ou quantifier l'influence d'une ligne de décharge spécifique ou encore tester différents types de réservoirs.

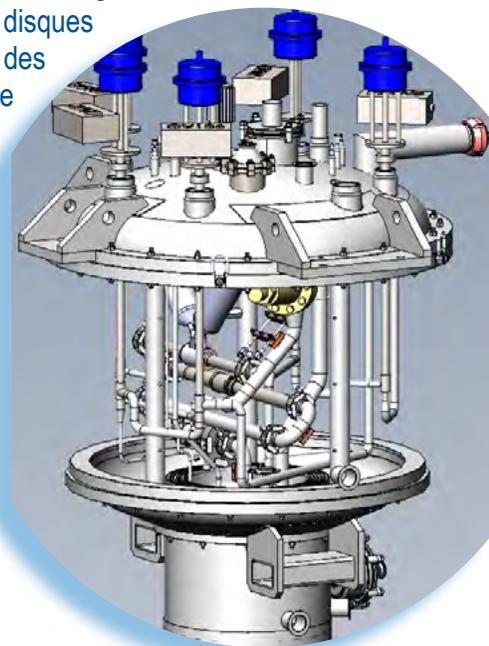


Figure : Banc d'essai développé dans le cadre du projet ESKHYMO. © CEA-Irig

Etienne Havret
Coordinateur du projet ESKHYMO

Améliorer la durabilité des piles PEMFC grâce à l'IA et aux modèles physiques

Les méthodes de prédiction et de gestion contrôlée du vieillissement (appelées également « Prognostics and Health Management », PHM) jouent un rôle essentiel dans la réalisation des objectifs de durabilité des systèmes de piles à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC). Pour garantir les meilleures performances en matière de production d'électricité et prévenir une dégradation accélérée, les PEMFC doivent fonctionner dans des conditions opératoires optimales.

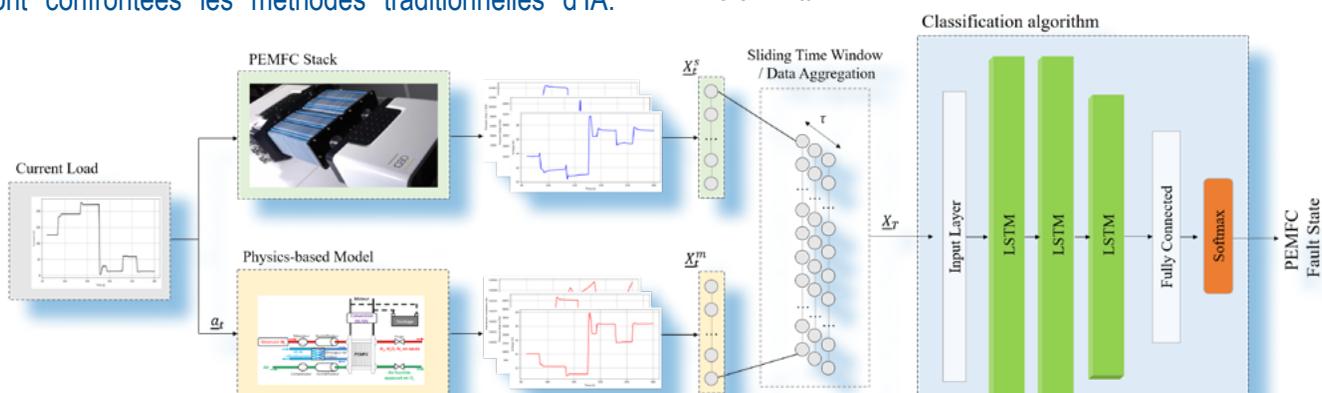
Dans le cadre du projet **DURASYS-PAC** dédié à la durabilité des PEMFC pour la mobilité lourde, nous développons une méthodologie innovante pour améliorer leur diagnostic. La méthode hybride proposée combine un modèle basé sur la physique, appelé MePHYSTO avec un algorithme d'apprentissage profond pour surmonter le défi de l'insuffisance de données auquel sont confrontées les méthodes traditionnelles d'IA.

En identifiant et en traitant rapidement les défauts du système, cette approche améliorera de manière significative la durabilité des PEMFC. Elle pourra être adaptée à d'autres technologies de piles à combustible et d'autres applications de l'hydrogène.

Comprendre la méthode physics-guided LSTM

Dans ce travail, le modèle MePHYSTO est utilisé pour estimer les variables inobservables associées à l'état de la pile PEMFC, telles que la résistance et la teneur en eau de la membrane. Ces estimations dérivées du modèle sont combinées à des signaux mesurés directement sur la pile et utilisés comme entrées dans un réseau de neurones récurrent de type Long Short Term Memory (LSTM). Les réseaux LSTM excellent dans l'extraction d'informations significatives à partir de séries temporelles, telles que celles collectées dans les systèmes PEMFC, ce qui permet un diagnostic précis des défauts. Un organigramme illustrant la méthodologie proposée est présenté ci-dessous.

Figure : Organigramme de la méthode physics-guided LSTM [1] © CEA-Liten



Les avantages de la méthode

La méthode physics-guided LSTM représente une amélioration notable pour le diagnostic des défauts des PEMFC. Nous avons démontré qu'elle s'avère très robuste à la dégradation du système, réalisant ainsi une avancée significative dans l'extension de la validité de la méthode et l'amélioration de sa généralisation. Sa capacité à diagnostiquer avec précision les défauts de la pile sous des profils de charges dynamiques et

dans une large gamme de dynamiques opérationnelles est essentielle pour rendre la technologie PEMFC plus fiable et plus durable.

[1] <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2024.235696>

Chiara Pettorossi et Vincent Heiries, CEA-Liten

EN BREF

PEPR-H2 School (6-11 octobre 2024) : Une première édition réussie

Cette édition qui s'est tenue à la Grande Motte a rassemblé 70 doctorants, dont une dizaine provenant de laboratoires européens. Elle a été l'occasion d'accueillir ces jeunes chercheurs sur toute la chaîne de valeur de l'hydrogène en suivant des séminaires thématiques, et également de permettre de nombreux échanges entre eux. Ils ont ensuite dans la foulée participé aux journées de la Fédération Hydrogène du CNRS (FRH2) et ainsi poursuivi les échanges avec une communauté élargie (280 participants au total).

En savoir plus :

<https://www.pepr-hydrogene.fr/la-pepr-h2-school-sur-lhydrogene-decarbone/>



Session posters lors de la PEPR-H2 School © PEPR-H2



La journée de valorisation du PEPR-H2

Le PEPR-H2 a tenu sa journée de valorisation le 6 novembre 2024 en présence d'une quarantaine de participants. Les échanges de l'après-midi ont permis d'identifier plusieurs pistes de recherches que les laboratoires pourraient aborder en vue de faciliter des futurs transferts vers les industriels.

Lancement des projets franco-allemands sur l'hydrogène

Dans le cadre de la valorisation de l'avancement d'initiatives franco-allemandes de recherche sur les énergies bas carbone, le 29 novembre a eu lieu le lancement de cinq projets bilatéraux de recherche [Science-Allemagne] pour les trois prochaines années.

C'est le résultat de l'appel à projets bilatéral sur le «développement de la filière hydrogène pour le futur mix énergétique» lancé le 6 mars 2024 conjointement par le MESR, via l'ANR et le BMBF, via le Projektträger Jülich. Cette rencontre a été l'occasion d'évoquer les projets du PEPR-H2 et en quoi ils complètent ces nouveaux projets franco-allemands. Des synergies et des échanges seront programmés prochainement.





PROCÉDÉS ALTERNATIFS DE PRODUCTION D'HYDROGÈNE DÉCARBONÉ

Le PEPR-H2 soutient la recherche sur la production d'hydrogène décarboné par électrolyse de l'eau à électrolytes solides (basse et haute températures) et photo(électro) catalyse. Cependant, d'autres procédés plus ou moins matures sont aussi développés pour cette application, dont certains ont été présentés lors d'un séminaire dédié en novembre 2024.



Une technologie déjà commercialisée à améliorer

L'électrolyse alcaline (zéro-gap) est la plus mature des technologies (TRL 9) ; elle est déjà commercialisée (électrolyseurs de plusieurs centaines de MW) et représente 60 % de la capacité globale actuelle d'électrolyse. Mais, la faible flexibilité de fonctionnement de cette technologie et l'augmentation des capacités d'électrolyse d'ici 2050 (de 1.4 actuellement à 3000 GW en 2050), préconisée par l'Agence Internationale de l'Énergie, nécessitent de la R&D pour le couplage avec les énergies renouvelables, l'augmentation de la pureté des gaz produits et la réduction des coûts d'opération et d'investissement.

Des technologies en voie de commercialisation

Des procédés thermochimiques, pyrolyse-gazéification de la biomasse ou encore cycles thermochimiques solaires, ont aussi atteint des niveaux de développement très élevés (TRL 8).

La gazéification (700-1500 °C sous un faible taux d'O₂) et la pyrolyse (200-1000°C, sans O₂) de la biomasse produisent du syngas (mélange de H₂, CO₂, CO, H₂O, CH₄) et pour la pyrolyse, du biochar (carbone solide). Ces méthodes nécessitent des étapes d'épuration des gaz (conversion du CH₄, water gas shift reaction, pressure swing adsorption, etc.) pour obtenir de l'hydrogène de pureté acceptable. Une analyse de cycle de vie comparant une filière pyrolyse avec récupération du biochar à un procédé de vaporeformage du méthane (SMR) a montré une émission négative de -17 kgCO₂eq/kgH₂ (pyrolyse) contre +10 kgCO₂eq/kgH₂ (SMR). Cependant, les problèmes de la ressource en biomasse, des besoins du marché et de la perception sociétale doivent être étudiés. Par exemple, une installation de 10 MW nécessite environ 50 tonnes de biomasse (3 camions/jour), une installation de 1 GW verrait donc passer plus de 300 camions par jour.

Les cycles thermochimiques de dissociation de l'eau couplée à une source d'énergie solaire concentrée (CSP) présentent un grand potentiel dans les zones à fort ensoleillement et qui disposent de terres non utilisées pour l'agriculture. Si la décomposition thermique de l'eau nécessite des températures très élevées (4500 K), des cycles thermochimiques peuvent être envisagés à

des températures moindres. Par exemple, la réduction partielle d'oxydes métalliques, CeO₂ en CeO_{2-δ}, peut être menée vers 1775 K, et la dissociation de l'eau en H₂ avec régénération du CeO₂ se produit à environ 1175 K. A de telles températures, la durabilité du système énergétique global doit être améliorée (> 1000 cycles), ce qui implique le développement de matériaux/composants rédox et/ou catalytiques robustes. L'évaluation des impacts (écologiques, économiques et sociétaux) du déploiement de cette technologie (fournissant plusieurs centaines de kW actuellement) à plusieurs centaines de MW doit aussi être réalisée.

La plasmalyse du méthane (TRL7) développée par la société SAKOWIN, consiste à utiliser l'électricité du réseau pour activer un magnétron microonde qui va produire un plasma dans lequel du méthane est injecté. Actuellement 40 % du méthane est décomposé par passage dans le réacteur et une dépense énergétique de 30 à 40 kWh/kgH₂ est obtenue. L'objectif est d'obtenir un gaz composé de 85% H₂, < 12 % méthane et < 3% autres hydrocarbures gazeux et une dépense énergétique de 10 à 15 kWh/kgH₂. Un pilote de 100 kW (puissance microonde) permet de produire 200 kgH₂/jour et d'envisager le développement de systèmes de plusieurs MW.



Figure : Production d'hydrogène par plasmalyse du méthane. Un magnétron microonde va produire un plasma dans lequel du méthane est injecté. © Adobe, image générée par IA



Ce procédé coproduit du carbone solide (3 kg de carbone par kg de H₂) qui peut être valorisé sur le marché du noir de carbone. L'optimisation des paramètres réactionnels et des membranes séparatrices pour augmenter la pureté du H₂ produit (simplifier la purification) et procurer des propriétés spécifiques au carbone black coproduit nécessitent encore de la R&D.

Les technologies du futur ?

Les microorganismes photosynthétiques sont des usines cellulaires très performantes pour produire de la biomasse et de l'oxygène (photosynthèse) à partir d'énergie solaire. Le métabolisme des **microalgues** peut être détourné pour favoriser la photobioproduction d'hydrogène. La carence en nutriments (soufrés, azotés) et l'introduction d'une enzyme hydrogénase en conditions d'anaérobiose permet de forcer le microorganisme à produire de l'hydrogène. Ce phénomène transitoire est limité par la sensibilité de l'hydrogénase à la présence d'oxygène, ce qui nécessite de séparer temporellement les productions de ces deux composés. La biomasse et l'oxygène sont produits sous illumination, tandis que l'hydrogène est produit dans l'obscurité. Ces limitations impliquent des verrous scientifiques quant à la réaction de production d'hydrogène elle-même et aux aspects biologiques liés à l'utilisation de la lumière solaire directe. Des productions d'H₂ de l'ordre de 1 mL.L⁻¹.h⁻¹ peuvent être obtenues avec une conversion lumineuse de l'ordre de 10 % (contre environ 12% pour la photocatalyse).

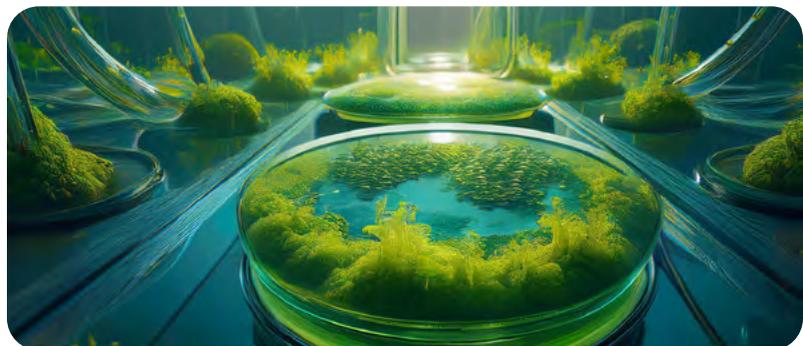


Figure : Photobioproduction d'hydrogène par microalgues à partir d'énergie solaire en conditions anaérobiose. © Adobe, image générée par IA

Une autre technologie repose sur la **photocatalyse** qui est un moyen de mimer la photobioproduction d'H₂ en développant des matériaux semiconducteurs capables d'une part de capter les photons pour créer des excitons pouvant se dissocier en paires électrons/trous, et d'autre part de permettre la séparation des charges par des systèmes donneur/accepteur et le transport des électrons et trous vers l'interface particule photocatalytique/eau. À ce stade, les réactions catalytiques rédox conduisent à la production d'hydrogène. Les recherches consistent à développer des matériaux, en général composites, permettant l'utilisation la plus large du spectre solaire, l'adsorption optimale des réactifs, une durée de vie des porteurs de charges compatible avec celle des réactions redox, et in fine améliorer l'efficacité de production d'H₂.

Christophe Coutanceau, IC2MP - Poitiers
Julie Mougin, CEA-Liten
Valérie Keller, ICPEES - Strasbourg



LES ÉVÈNEMENTS À VENIR...

JANVIER 2025

- **28 au 30 janvier - PARIS**
Hyvolution 2025
<https://paris.hyvolution.com/fr>

MARS 2025

- **18 - 19 mars - NANTES**
PEPR-H2 DAY
<https://peprh2day2025.sciencesconf.org/>

FÉVRIER 2025

- **18 - 19 février - VARSOVIE**
8th Edition CEE Hydrogen Summit
<https://www.leadventgrp.com/events/8th-edition-cee-hydrogen-summit/details>
- **24 - 26 février - DUBAI**
Connecting Hydrogen MENA
<https://www.connectinghydrogenmena.com/>

MAI 2025

- **18 - 19 mai - MADRID**
Connecting Hydrogen Europe 2025
<https://www.connectinghydrogeneurope.com/>
- **18 au 22 mai - MONTRÉAL**
247th ECS Meeting
<https://www.electrochem.org/247>
- **20 - 22 mai - ROTTERDAM**
World Hydrogen 2025 Summit & Exhibition
<https://www.world-hydrogen-summit.com/>

Directeurs de la rédaction	Hélène Burllet et Abdellilah Slaoui
Comité éditorial	Hélène Burllet, Abdellilah Slaoui, Stéphanie Demaretz,
Conception et réalisation	Stéphanie Demaretz
S'abonner à la newsletter du PEPR-H2	
Se désinscrire de la liste de diffusion de la newsletter du PEPR-H2	
Crédits photos : iStock, PEPR-H2, Adobe.	

