



Newsletter #5 - Septembre 2023

Publications et thèses

Production



Stockage



Usages



Activités transverses



Production

- Numerical microstructural optimization for the hydrogen electrode of solid oxide cells, Prioux M. et al. (CEA) in Fuel Cells, 2023

Un modèle multi-échelle a été utilisé pour optimiser la microstructure d'une électrode à hydrogène classique composée de nickel et de zircone stabilisée à l'yttrium (Ni-8YSZ). À cette fin, une reconstruction 3D d'une électrode de référence a été obtenue par nano-holotomographie à rayons X. Ensuite, un large ensemble de données de microstructures synthétiques a été généré autour de cette référence avec la méthode du champ aléatoire gaussien tronqué, en faisant varier le rapport Ni/8YSZ et la taille des particules de nickel. Toutes les microstructures synthétiques ont été introduites dans une approche de modélisation multi-échelle afin d'analyser l'impact de la microstructure sur les réponses de l'électrode et de la cellule. La résistance de polarisation locale de l'électrode à hydrogène, ainsi que les spectres d'impédance de la cellule complète, ont été calculés pour les différentes microstructures. Une amélioration significative des performances a été constatée lors de la diminution de la distribution de la taille des particules de nickel. De plus, un optimum a été identifié en termes de composition d'électrode permettant de minimiser la résistance de polarisation de la cellule. La même méthodologie a été appliquée pour évaluer la pertinence des électrodes graduées. Tous ces résultats permettent de mieux comprendre le rôle précis de la microstructure sur les performances des cellules et fournissent des indications utiles pour la fabrication des cellules.

- Comparison of the Electrochemical Performances of Solid Oxide Fuel Cells with Crystalline Thin Barrier Layers Fed by Hydrogen or

L'influence d'un changement de combustible a été étudié, de l'hydrogène pur à un mélange hydrogène-ammoniac à différents pourcentages, sur le comportement électrochimique de piles à combustible à oxyde solide (SOFC) de 50 mm de diamètre avec de minces couches tampons pulvérisées de cérium dopé au Gd, en faisant varier les températures de travail de 800°C à 650°C. Les résultats montrent que les performances des cellules ne sont pas affectées par le changement de combustible pour les températures de travail élevées (800°C et 750°C). À des températures de travail plus basses (700°C et 650°C), de légers changements dans le comportement électrochimique des cellules sont observés.

- Oxygen diffusion and surface exchange coefficients measurements under high pressure: Comparative behavior of oxygen deficient versus over-stoichiometric air electrode materials, Laurencin J. et al. (CEA) in *Fuel Cells*, 2023

Les oxydes conducteurs électroniques ioniques mixtes (MIEC) sont utilisés comme matériaux d'électrode pour les piles à oxyde solide (SOC), car ils combinent une conductivité électronique élevée ainsi qu'une diffusivité de l'oxygène et des coefficients d'échange de surface de l'oxygène élevés. Les propriétés de transport ionique peuvent être directement déterminées grâce à la méthode de profilage de la profondeur d'échange isotopique (IEDP). Pour une plus grande efficacité de la production d'hydrogène au niveau du système, il est envisagé de faire fonctionner la cellule entre 10 et 60 bars. Pour caractériser les propriétés des oxydes MIEC dans de telles conditions, un dispositif innovant capable de fonctionner jusqu'à une pression totale de 50 bar et 900°C a été développé. L'objectif principal de cette étude était de comparer le comportement de deux types de matériaux de référence : les pérovskites La-Sr-Fe-Co déficientes en oxygène et les nickelates de lanthanide surstoichiométriques $\text{Ln}_2\text{NiO}_{4+\delta}$; (Ln = La, Pr, Nd). Les coefficients de diffusion et d'échange de surface obtenus sous 6,3 bar d'oxygène sont mesurés et leur évolution est discutée à la lumière du changement de stœchiométrie de l'oxygène. Cette analyse permet de mieux comprendre la dépendance du coefficient d'échange de surface avec la pression partielle d'oxygène.

- Etude d'un système d'électrolyse fractionnée basé sur l'électrochimie du zinc pour la production d'hydrogène: Caractérisation et modélisation électrochimique Etude Technique, économique et Environnementale d'une solution couplée à une source photovoltaïque, 21 juillet 2023, Laplace. Thèse de Léo Fayard.

Cette thèse a pour but de caractériser le procédé d'électrolyse fractionnée en vue d'étudier le couplage électrolyseur/EnR.

Stockage

- In situ diffraction studies of phase-structural transformations in hydrogen and energy storage materials: An overview, Yartys V. et al. (ICMPE, Thiais en collaboration avec Institute for Energy Technology, Norvège et Queensland Micro and Nanotechnology Centre, Australie) in *Journal of Alloys and Compounds*, 953, 2023, 170133

L'article présente un aperçu des études avancées de diffraction in situ en tant qu'outil très précieux pour sonder la structure et les mécanismes de réaction de l'hydrogène et des matériaux de stockage d'énergie.

- Strategies to recover and minimize boil-off losses during liquid hydrogen storage, Morales-Ospino R. et al. (IJL, Epinal) in *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 182, 2023, 113360

Pour garantir un bon déploiement et une compétitivité accrue du stockage de l'hydrogène liquide, l'évaporation doit être minimisée autant que possible ou, alternativement, récupérée sous forme liquide ou gazeuse. Cette revue couvre les éléments clés, notamment la définition, les défis actuels et l'état de l'art du stockage de l'hydrogène sous forme de LH2 et les trois différentes stratégies de récupération pour minimiser l'évaporation de l'hydrogène ou récupérer le boil-off, à savoir : zéro évaporation (ZBO), reliquéfaction de l'hydrogène et les solutions commerciales de compression de l'hydrogène par évaporation.

Usages

- Assessment of medium and long term scenarios for the electrical autonomy in island territories: The Reunion Island case study, François A. et al. (FEMTO-ST, Belfort et ENERGY-Lab, La Réunion) in *Renewable Energy*, 216, 2023, 119093

Cet article étudie les aménagements à mettre en place à moyen et long terme pour réduire progressivement les importations d'énergie à La Réunion. Plusieurs scénarios de capacités de production d'électricité installées sont étudiés pour 2030 et 2050, associés à deux scénarios de consommation électrique. Des simulations sont réalisées selon ces scénarios afin de définir le mix électrique et les investissements. Pour 2030, les résultats montrent qu'une réduction de la consommation par rapport à la tendance pourrait permettre de réduire les coûts et les impacts environnementaux. Pour 2050, les investissements dans les nouvelles technologies de production d'électricité sont essentiels pour répondre aux besoins d'un parc de véhicules 100 % électrifiés.

- *Diffusion mechanisms between La₂SiO₅ and SiO₂ during formation of textured lanthanum silicate oxyapatite crystals*, Arbelaez L. et al. (IRCER, Limoges avec la participation d'un chercheur du Nagoya Institute of Technology) in *Ceramics International*, 49, 2023, pp.31428-31438

Cet article traite de l'oxyapatite de silicate de lanthane (LSO), un électrolyte alternatif prometteur pour les applications de piles à combustible à oxyde solide (SOFC) et électrolyseur EHT.

- *Time to Market Reduction for Hydrogen Fuel Cell Stacks using Generative Adversarial Networks*, Morizet N. et al. (FEMTO-ST, Belfort) in *Journal of Power Sources*, 579, 2023, 233286

Dans cet article, les auteurs développent une approche pertinente pour diminuer fortement le temps de test sur un banc d'essai expérimental, dédié au conditionnement et à la cartographie des performances, pour les piles à combustible.

- *Effect of A-site cation ordering on oxygen diffusion in NdBa₂Fe₃O₈ through molecular dynamics*, Moazzam M. et al. (SPMS, Centrale SUPELEC) in *Journal of Solid State Chemistry*, 325, 2023, 124148

Les auteurs étudient l'influence des mécanismes de diffusion de l'oxygène dans des composés présentés récemment comme matériaux d'électrode potentiels pour les piles à combustible à oxyde solide.

- *Cogeneration: Another way to increase energy efficiency of hybrid renewable energy hydrogen chain – A review of systems operating in cogeneration and of the energy efficiency assessment through exergy analysis*, Luo L. et al. (LTEN (Nantes), SPE (Corse) et AREVA) in *Journal of Energy Storage*, 66, 2023, 107433

Dans cet article de revue, un état de l'art des systèmes hybrides énergies renouvelables-Hydrogène existants fonctionnant en cogénération est proposé incluant leur description technique, leur coût, leur efficacité et l'expérience d'exploitation.

- *Fault Detection for PEM Fuel Cells via Analytical Redundancy: A Critical Review and Prospects*, Sani M. et al. (CEA) in *Energies*, 16(14), 2023, 5446

La décarbonation du secteur des transports pourrait être réalisée grâce à la technologie des piles à combustible, en raison de sa forte densité de courant et l'absence d'émissions. Toutefois, son déploiement à grande échelle est freiné par des contraintes de durabilité et de fiabilité. En fonctionnement normal, le système de pile à combustible fournit une puissance stable à la charge. En revanche, lorsqu'il est utilisé dans des conditions défectueuses, la puissance de sortie du système se détériore, ce qui entraîne une faible durabilité. Il est donc primordial de s'assurer que le système fonctionne dans des conditions non défectueuses. Cet article présente un examen critique des méthodes de diagnostic des défauts basées sur la redondance analytique pour les piles à combustible à membrane d'échange de protons (PEMFC). Une analyse approfondie des différentes méthodes a été présentée en termes de précision, de complexité, de facilité de mise en œuvre et de robustesse au vieillissement et aux conditions de fonctionnement dynamiques.

- *Low loading ORR selectivity evaluation of Pt-free catalysts with scanning electrochemical microscopy*, Limani N. et al. (CEA) in *Electrochemistry Communications*, 153, 2023, 107538

Les défis associés à l'électrocatalyse de la réaction de réduction de l'oxygène (ORR) sont sans aucun doute les obstacles les plus complexes à résoudre pour la commercialisation des véhicules à pile à combustible (FCV), principalement en raison de la complexité de cette réaction et de la rareté des électrocatalyseurs requis. La synthèse d'électrocatalyseurs non précieux présentant une sélectivité intrinsèque élevée est en effet cruciale dans ce domaine, mais la méthodologie utilisée pour parvenir à des conclusions en matière de sélectivité est indéniablement tout aussi importante. Ce travail

matériau de sélectivité est indéniablement tout aussi importante. Ce travail démontre comment les charges d'électrode plus élevées requises pour un catalyseur Fe-N-MWCNT dans une électrode à disque annulaire rotatif (RRDE) empêchent l'accès à tout le peroxyde produit par le catalyseur au cours de l'ORR. Grâce à une technique de pulvérisation, des quantités beaucoup plus faibles du même catalyseur ont été déposées sur un diamant plat dopé au bore (BDD) et leur charge a été déterminée méticuleusement par microscopie à force atomique (AFM). Ces charges ultra-faibles ont été étudiées à l'aide de la microscopie électrochimique à balayage (SECM), qui a révélé une production de peroxyde plus élevée et une sélectivité plus faible. Cette découverte peut avoir des implications cruciales pour les futures recherches ORR en laboratoire, compte tenu de l'effet néfaste du peroxyde sur le catalyseur.

- Vers une meilleure compréhension du mécanisme d'absorption de l'hydrogène dans les alliages multicomposants à haute entropie de composition HfTiNbVZr, 22 juin 2023, ICMCB Bordeaux. Thèse de Maria Moussa.

Les travaux de cette thèse portent sur la caractérisation structurale et les propriétés de sorption de l'hydrogène de différents alliages à haute entropie ayant la composition $\text{Hf}_{1-x}\text{Ti}_x\text{NbVZr}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75$ et 1).

- Développement d'une pile à combustible à oxyde solide sur support métallique (MS-SOFC) obtenue par plasma atmosphérique et par pulvérisation cathodique magnétron, 22 juin 2023, FEMTO ST. Thèse de Xiaolei Ye.

Cette thèse traite du développement de matériaux pour cellules oxyde à métal support.

Activités transverses

- A multi-model assessment of the Global Warming Potential of hydrogen, Sand M. et al. in Communications Earth & Environment, 4, 2023, 203

L'intérêt mondial croissant pour l'hydrogène moléculaire afin de remplacer les combustibles fossiles a conduit à accorder plus d'attention aux fuites potentielles d'hydrogène dans l'atmosphère et à leurs conséquences sur l'environnement. L'hydrogène n'est pas directement un gaz à effet de serre, mais ses réactions chimiques modifient l'abondance des gaz à effet de serre que sont le méthane, l'ozone et la vapeur d'eau stratosphérique, ainsi que les aérosols. Dans cette étude, un ensemble de cinq modèles de chimie atmosphérique mondiale a été utilisé pour estimer le potentiel de réchauffement planétaire (PRP100) de l'hydrogène à l'horizon de 100 ans. Le PRP100 de l'hydrogène a été estimé à $11,6 \pm 2,8$ (un écart-type). La plage d'incertitude couvre l'absorption par le sol, la production photochimique d'hydrogène, les durées de vie de l'hydrogène et du méthane, et la rétroaction du radical hydroxyle sur le méthane et l'hydrogène. Les changements induits par l'hydrogène sont robustes dans les différents modèles. Il sera important de maintenir les fuites d'hydrogène à un niveau minimum pour tirer parti des avantages du passage à une économie fondée sur l'hydrogène.

Dans le monde 



Université d'été à Prapoutel

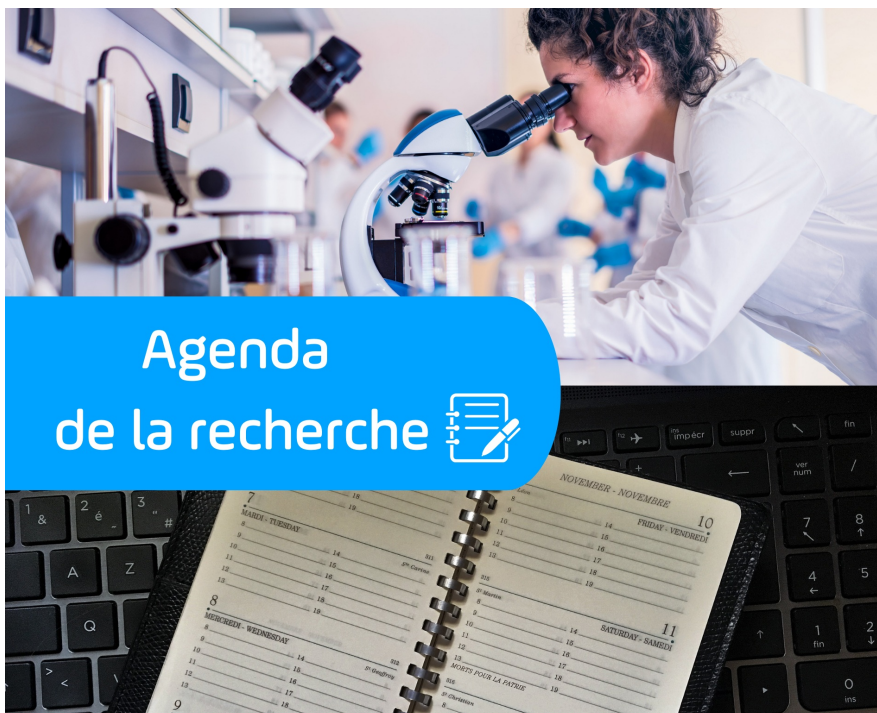
60 doctorants, post-doc ou nouveaux embauchés venant de 15 pays différents se sont réunis à Prapoutel (Isère) du 3 au 7 juillet pour **l'école d'été, une initiative lancée lors du sommet du G20 au Japon**. Leur objectif : échanger et partager leurs connaissances autour de la décarbonation des systèmes énergétiques et de la R&D associée.

Organisée par le CEA et le CNRS, cette semaine de formation a pour objectif de faire émerger un **message international commun**, issu des jeunes chercheurs, qui apportera une perspective novatrice pour décarboner notre société.

Pour les aider, des orateurs de renom, experts dans leurs domaines, ont présenté des cours de formation sur divers sujets, tels que le photovoltaïque, l'énergie éolienne, les réseaux intelligents, l'hydrogène en tant que vecteur d'énergie, le stockage de l'énergie, les bioénergies, le captage du carbone, ainsi que des aspects sociétaux des sciences humaines. **Des visites de laboratoires et d'infrastructures au cœur du CEA-Liten, de l'INES et du CNRS** ont également été organisées, offrant aux participants une immersion concrète dans le monde de la recherche énergétique.

L'ambition de cette université d'été est de faire en sorte que les organisations de recherche des pays du G20 participantes interpellent leurs autorités nationales respectives. En présentant ces propositions et recommandations lors de la prochaine assemblée du G20, elles n'auront qu'un objectif commun : **influencer les décisions politiques et contribuer activement à la transition vers un avenir plus durable**.

RD20



Agenda de la recherche

20 au 24 novembre 2023
[European Hydrogen Week](#)
Brussels Expo, Bruxelles

27 au 28 novembre 2023
[H-NAT 2023](#)
Esplanade Hotel Fremantle, Perth, Australie et en ligne



Lettre d'information de France Hydrogène

50, Avenue Daumesnil, 75012 Paris (France)
Téléphone : +33 1 44 11 10 04

Cliquez [ici](#) pour vous désinscrire si vous souhaitez ne plus en recevoir de notre part.