

## ***Vers la modélisation multi-physique et multi-échelle de cellules photo-électrochimiques pour la production d'hydrogène***

La production de molécules chimiques et de carburant de synthèse, à partir de ressources non fossiles et d'énergie renouvelable, est un des axes envisagés en réponse aux enjeux climatiques. Dans ce cadre, l'utilisation de cellules photo-électrochimiques (PEC) pour la décomposition de l'eau à partir d'énergie solaire est une voie prometteuse de production d'hydrogène. L'hydrogène ainsi produit peut ensuite être utilisé pour la conversion du dioxyde de carbone en molécules carbonées d'intérêt (carburants comme méthane ou méthanol). Aujourd'hui, les preuves de concept concernent généralement des objets de petite taille (de l'ordre de  $1\text{cm}^2$  de surface active) et des durées de fonctionnement limitées à quelques minutes ou quelques heures. Il est donc indispensable, pour envisager le déploiement rapide des PEC, de pouvoir prédire l'influence de l'architecture de la cellule et du changement d'échelle sur les performances, en termes de rendement énergétique, d'efficacité cinétiques (volumiques et surfaciques), de stabilité de fonctionnement et de vieillissement des matériaux.

La thèse s'inscrit dans le cadre **du développement d'un outil de simulation générique des PEC**, afin notamment de **concevoir des objets technologiques optimisés par design inverse**. A partir d'une analyse critique de l'état de l'art, permettant d'appréhender les verrous spécifiques à ces dispositifs intrinsèquement multi-physiques et multi-échelles, contrôlés par le transfert de rayonnement, il s'agira en particulier de **développer des modèles de connaissances originaux, capables de représenter de manière robuste l'effet des couplages et des différentes échelles sur les performances cinétiques et énergétiques finales des PEC**. La modélisation en 1D des étapes contrôlant les performances cinétiques, énergétiques (propriétés optiques, transfert de rayonnement, séparation et transport de charges, réactions aux interfaces...) et la séparation des gaz sera entreprise dans un premier temps. **Un effort important sera porté sur la représentation de la jonction semi-conducteur-électrolyte qui est un enjeu fort du modèle de connaissance**. Ces briques modèles pourront être développées sous différents langages, intégrant l'état de l'art existant dans les laboratoires. Ces modèles seront testés et validés à partir de solutions analytiques lorsqu'elles existent et de données expérimentales obtenues indépendamment sur des dispositifs de petite taille (PEC), mettant en œuvre un photo-catalyseur modèle, le  $\text{BiVO}_4$ , dont la nano-structuration sera progressivement prise en compte. **La transposition aux dispositifs 3D sera considérée via la reformulation des solutions des modèles sous forme d'intégrales de chemins permettant une résolution statistique, à l'aide de la méthode de Monte Carlo**. Ces méthodes, en cours de développement via la plateforme EDStar, présentent l'intérêt d'être insensibles en temps de calcul aux dimensions d'espace et de temps et à la complexité géométrique de la cellule à chaque échelle.

Le projet de recherche proposé sera mené en collaboration entre l'**Institut Pascal**, pour son expertise dans la modélisation des procédés photo-réactifs, le **CEA**, pour son expertise dans la modélisation des procédés polyphasiques, et le centre R&D d'ENGIE dédié aux nouvelles ressources énergétiques **ENGIE Lab GRIGEN**, qui finance la thèse. ENGIE Lab CRIGEN et le CEA sont par ailleurs partenaires du projet de Chaire Industrielle PROSPER-H2, visant à développer une technologie de PEC, dans le cadre duquel seront menés des essais intégrés, dont les résultats pourront compléter les bases de données utilisées pour la validation des modèles.

Vous avez une solide formation en Physique, Energétique ou Génie des Procédés, un gout prononcé pour la modélisation et la programmation informatique, une forte capacité pour le travail en équipe et vous souhaitez contribuer activement à la transition énergétique ? En choisissant ce sujet, vous rejoindrez un consortium pluridisciplinaire et contribuerez à un domaine de recherche très actif à l'international, à l'interface entre la recherche fondamentale et l'industrie.

**Financement :** ENGIE (bourse CIFRE ANRT de 3 ans)

**Laboratoire d'accueil :** Institut Pascal (UMR CNRS 6602), Clermont-Ferrand (Directeur de thèse J.-F. Cornet : [jean-francois.cornet@sigma-clermont.fr](mailto:jean-francois.cornet@sigma-clermont.fr))

**Laboratoire associé :** CEA ISEC, Bagnols-sur-Cèze (Co-directrice S. Charton : [sophie.charton@cea.fr](mailto:sophie.charton@cea.fr))