

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 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. Aujourd'hui, les preuves de concept concernent généralement des objets de petite taille (de l'ordre de 1cm^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, en support à la R&D. A partir d'une analyse critique de l'état de l'art, permettant d'appréhender les verrous spécifiques à ces dispositifs intrinsèquement multiphysiques et multiéchelles, il s'agira en particulier de développer des modèles de connaissances originaux, capables de représenter de manière robuste l'effet de ces 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,...) et la sécurité (séparation des gaz) sera entreprise dans un premier temps. Un effort important sera porté sur la représentation de la jonction semi-conducteur-électrolyte. Ces briques modèles pourront être développées sous différents langages (Python, Matlab, C,...), 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 système modèle, le BiVO_4 , comme matériaux photo actifs. A titre de comparaison, des simulations pourront être réalisées, si pertinent, avec des codes commerciaux ou universitaires (ANSYS-Fluent, COMSOL, CROWM) pour comparaison. La transposition aux dispositifs 3D sera considérée via la reformulation des solutions des modèles 1D 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 codée en C, présentent l'intérêt d'être insensibles en temps de calcul aux dimensions d'espace et de temps et à la possible complexité géométrique de la cellule extrapolée.

Le projet de recherche proposé sera mené en collaboration entre l'**Institut Pascal**, pour son expertise dans la modélisation des procédés couplant rayonnement et matière, 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 cellule photo-électrochimique hors-grid, 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 Génie des Procédés, Énergétique, Mécanique des Fluides ou en Mathématiques Appliquées, un goût prononcé pour la modélisation et la simulation numérique, 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 à compter d'octobre 2023)

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

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