

## **80|PRIME - NOSY-H2 (2020-2024) : Nouveaux systèmes pour le stockage d'hydrogène**

**résumé :** Le procédé de stockage/déstockage d'hydrogène dans les LOHC (Liquid Organic Hydrogen Carriers) est un procédé prometteur de par la sécurité et la densité de stockage de l'hydrogène. Cependant, l'endothermicité des réactions de déshydrogénation mises en œuvre lors de la restitution de l'hydrogène induit une faible efficacité énergétique comparée au stockage direct de l'hydrogène gazeux. Le procédé innovant LOHC- DIP AFC (Liquid Organic Hydrogen Carriers / Direct IsoPropAnol Fuel Cell), constitué d'un réacteur de transfert d'hydrogène entre des cycloalcanes et de l'acétone couplé à une Pile à Combustible à l'isopropanol, permet de pallier cet inconvénient (Sievi et al., Energy Environ. Sci. 12 (2019) 2305).

Nous proposons durant cette thèse d'étudier la réaction de transfert d'hydrogène entre des cycloalcanes et l'acétone pour produire l'isopropanol et les aromatiques associés (150-250°C, 2-30 bars) afin de concevoir et mettre en œuvre un réacteur catalytique efficace. Les données sur ce procédé étant peu nombreuses, différents aspects seront abordés :

- Étude de la thermodynamique des réactions et des équilibres liquide-vapeur. Des mesures expérimentales seront réalisées pour alimenter les bases de données nécessaires aux calculs théoriques.
- Conception et mise en œuvre d'un réacteur continu. Les caractéristiques et dimensions du réacteur seront fonction des conditions opératoires, des performances des catalyseurs et leur structure (enduit ou pellets). Un modèle dynamique du système sera développé comme aide au dimensionnement et pour évaluer les performances énergétiques et la flexibilité du réacteur. Les résultats de simulation seront validés par des expériences.

Projet financé CNRS :