

## **SAFHYR (2022-2026) : Nouveaux catalyseurs pour une restitution et un usage sûrs d'hydrogène**

**résumé** : L'hydrogène vert peut être utilisé comme vecteur d'énergie. Stocké par hydrogénation dans des transporteurs d'hydrogène organique liquide (LOHC), son transport devient sûr et sa capacité de stockage dépasse celle de l'hydrogène liquéfié ou comprimé à 700 bars. A la demande, il peut être restitué sous forme moléculaire par déshydrogénation catalytique, fortement endothermique, pour alimenter une pile à combustible.

Un procédé alternatif et innovant consiste à réaliser, à partir du perhydrodibenzyltoluène comme composé riche en hydrogène, une hydrogénation par transfert de l'acétone, produisant du dibenzyltoluène et de l'isopropanol, ce dernier alimentant une pile à combustible directe à l'isopropanol (DIPAFC). Les deux couples perhydrodibenzyltoluène/dibenzyltoluène et acétone/isopropanol fonctionnent en circuit fermé, seul l'hydrogène pouvant entrer et sortir du circuit. Ce processus, athermique et sûr (aucun hydrogène moléculaire n'est libéré) pourrait constituer une avancée scientifique significative. Cependant, le succès de cette idée repose sur le développement de catalyseurs qui réalisent l'hydrogénation de transfert de manière très sélective, sans sous-produits ni désactivation. Au niveau de la pile à combustible, le choix des électrocatalyseurs déterminera également la sélectivité de l'électrooxydation de l'isopropanol, l'acétone étant le seul produit souhaité. Par ailleurs, la conception du réacteur est également un point clé pour la mise en œuvre du concept.

Une première tâche sera consacrée au développement de catalyseurs pour la réaction d'hydrogénation par transfert et pour la pile à combustible directe à l'isopropanol. La réduction de l'utilisation de métaux nobles sera un point clé de la conception des catalyseurs dans les deux cas, avec l'utilisation de catalyseurs bimétalliques ou non nobles optimisés. Les catalyseurs seront entièrement caractérisés et utilisés dans la réaction d'hydrogénation par transfert et dans l'oxydation électrochimique de l'isopropanol. La première réaction sera d'abord étudiée dans un autoclave à différentes conditions de fonctionnement afin de déterminer l'activité/sélectivité des différents catalyseurs et de sélectionner le plus approprié dans des conditions spécifiques. En parallèle, les électrocatalyseurs seront évalués pour leur activité et leur stabilité dans l'électrooxydation de l'isopropanol avec une attention particulière à la sélectivité de la réaction d'oxydation. Pour les deux réactions, après la phase de sélection, d'autres expériences seront réalisées dans des réacteurs (semi-)continus et dans des piles à combustible, respectivement. La conception des réacteurs les plus appropriés et la faisabilité de l'utilisation de ce concept dans un futur procédé intégré seront évaluées dans une tâche finale après modélisation thermodynamique et cinétique, grâce à la collecte des données de toutes les expériences. Le projet rassemble 3 équipes académiques de Lyon (IRCELYON, CP2M et LAGEPP), avec des expériences/compétences complémentaires en catalyse, génie chimique et électrochimie.

Projet ANR