



Proposition PFE ou stage de Master

Conversion catalytique de l'hydrogène

Responsables académiques : Benoît Bédât (IMFT), Renaud Ansart (LGC)

Laboratoire : Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT)

Durée : 5 à 6 mois

Candidature [CV, lettre de motivation, références] à envoyer à : benoit.bedat@imft.fr

La catalyse est très présente dans différents processus industriels et naturels. On peut citer la synthèse de l'ammoniaque (procédé Haber-Bosch) et sa contrepartie biologique, la nitrogénase (processus des plantes pour capter l'azote de l'air) [1]. En combustion, l'utilisation de catalyseur permet d'obtenir des régimes de combustion à « basse » température dans des canaux de petites dimensions [2].

L'hydrogène sera un des vecteurs de la décarbonation de l'énergie. Le procédé le plus envisagé actuellement est l'hydrolyse de l'eau. Plusieurs technologies sont déjà opérationnelles [3], à forte puissance elles ne permettent pas d'obtenir une pureté acceptable des produits ; l'oxygène (l'hydrogène) contient quelques % d'hydrogène (d'oxygène) alors que la limite de flammabilité est de 4% (5%). Afin de purifier les produits de l'électrolyse, une conversion catalytique est envisagée.

L'étudiante ou l'étudiant participera à l'effort de recherche financé par le pôle RHyO de l'université de Toulouse soutenu par la région Occitanie sur la conversion catalytique de l'hydrogène. En particulier, il testera numériquement le platine comme catalyseur.

La bibliothèque cantera [4] sera utilisée permettant de prendre en compte la cinétique chimique et la thermodynamique surfacique et volumique. L'étudiante ou l'étudiant devra programmer en python un code représentant un lit fixe de particules sphériques d'alumine sur lesquelles une couche de catalyseur est déposée. Les conditions opératoires nécessaires pour une conversion totale en fonction de la composition initiale sont les objectifs de ce travail.

L'étudiante ou l'étudiant devra avoir des connaissances en mécanique des fluides, thermodynamique, transfert de matière et des notions de cinétique chimique. La maîtrise de la programmation objet en python est souhaitable.

Références :

[1] NH₃ Synthesis: A chemist's point of view, Nicolas Mézailles, 2nd symposium on Ammonia Energy, Université d'Orléans, 2023.

[2] Catalytic Combustion of Hydrogen Challenges and Opportunities, J. Mantzaras, Advances in Chemical Engineering, Volume 45, 2014.

[3] An overview of water electrolysis technologies for green hydrogen production, S. Shiva Kumar, Hankwon Lim, Energy Reports 8, 2022

[4] <https://cantera.org/>