

## Introduction

- Production de vecteurs énergétiques propres, sûres et efficaces

### PRODUCTION DE CARBURANTS SOLAIRES

- Energie solaire par nature fluctuante :
  - Stockage sous forme chimique : Hydrogène (H<sub>2</sub>).
  - Apport d'énergie à un photocatalyseur pour oxyder l'eau et réduire H<sup>+</sup> en H<sub>2</sub>.
- Actuellement deux principaux verrous :
  - En chimie : Développement de photocatalyseurs efficaces et peu coûteux.
  - En SPI : Conception et optimisation des photo-procédés.**
- Le rayonnement est le phénomène limitant les photo-procédés [1] :
  - Optimisation du rayonnement,
  - Augmentation de la cinétique de production d'H<sub>2</sub>,
  - Augmentation des performances énergétiques.

### ETUDE DE L'INTERACTION PHOTONS/MATIÈRE

## Banc expérimental

### Présentation du photoréacteur

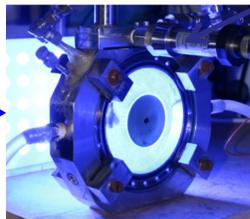
- Un photo-réacteur étanche a été utilisé pour la production photo-catalytique d'H<sub>2</sub>.
- Densité de flux de photons contrôlée à l'entrée du réacteur par un panneau de LED
  - Mesure de <r<sub>H<sub>2</sub></sub>> par capteur de pression de haute précision et modèle associé.

Le banc expérimental permet d'acquérir des courbes de pression en fonction du temps. Une relation entre <r<sub>H<sub>2</sub></sub>> et la variation de la pression en fonction du temps dP/dt a été obtenue à partir d'un bilan massique sur l'H<sub>2</sub> dans la phase liquide et gaz [2,3].

Capteur de pression permettant d'obtenir la vitesse de production d'H<sub>2</sub>

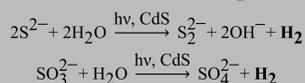
$$r_{H_2} = \left( \frac{V_G}{V_L RT} + \frac{1}{H_{H_2}} \right) \frac{dP}{dt}$$

PHOTONS ENTRANT PAR L'AVANT DANS LE PHOTOREACTEUR



PHOTONS SORTANT PAR L'ARRIÈRE DU PHOTOREACTEUR

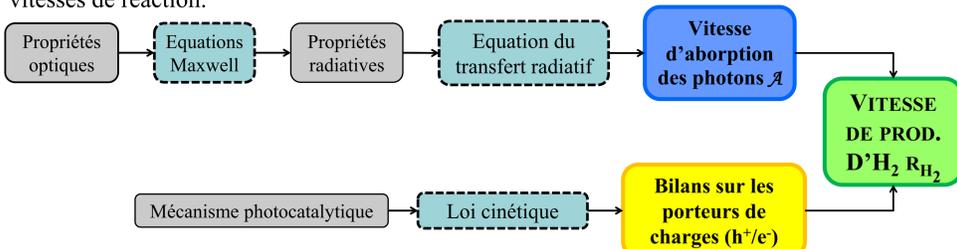
### Système photocatalytique pour la production d'H<sub>2</sub>



Des particules de sulfure de cadmium (CdS) sont utilisées comme modèle de photo-catalyseur sous rayonnement visible en présence de donneurs sacrificiels permettant de produire de l'H<sub>2</sub>.

## Modèle multi-échelle

La démarche consiste à décrire les principales étapes liées au transfert de rayonnement qui gouverne le procédé à plusieurs échelles ainsi que son couplage thermocinétique avec les vitesses de réaction.



Elle suit une progression depuis l'échelle microscopique, par l'étude des interactions des photons avec les particules de catalyseur, en passant par l'échelle mésoscopique en déterminant le champ de rayonnement et la quantité de photons absorbés localement, jusqu'à l'échelle macroscopique, c'est-à-dire l'échelle du procédé, en déterminant de façon prédictive, les vitesses de réaction moyennes ainsi que l'efficacité thermodynamique du réacteur.

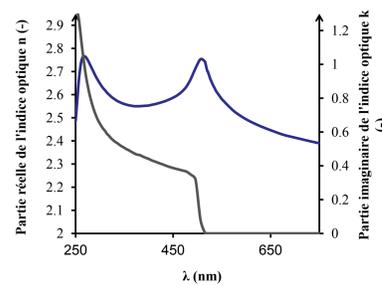
$$r_{H_2}(x) = C_{cat} \Phi \beta \sqrt{\frac{2\rho_{max}\beta}{A(x)}} A(x) = \Phi(A(x))A(x)$$

- Φ rendement quantique global de la réaction,
- C<sub>cat</sub> concentration en catalyseur (connue),
- φ rendement quantique stoechiométrique (connu),
- ρ<sub>max</sub> rendement maximum de conversion de l'énergie lumineuse en énergie physico-chimique (connu),
- β rapport des constantes cinétiques intervenant dans la réaction catalytique (inconnu)

## Résultats

### Propriétés optiques

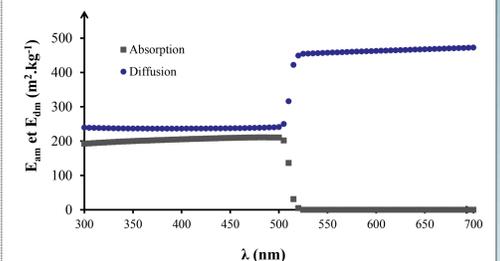
La première étape de notre chaîne méthodologique est la détermination des propriétés optiques de CdS que l'on trouve facilement dans la littérature.



Indices optiques des particules de CdS

### Propriétés radiatives

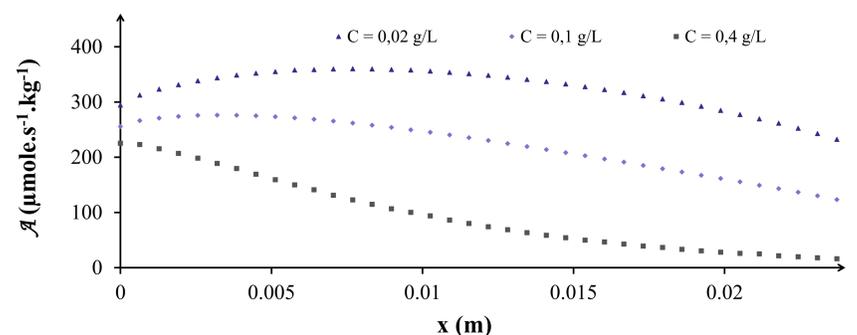
Les propriétés radiatives des particules de CdS ont été calculées grâce aux équations de Maxwell. On obtient ainsi : Le coefficient d'absorption E<sub>a</sub>, le coefficient de diffusion E<sub>d</sub> et la fonction de phase p.



Propriétés radiatives des particules de CdS

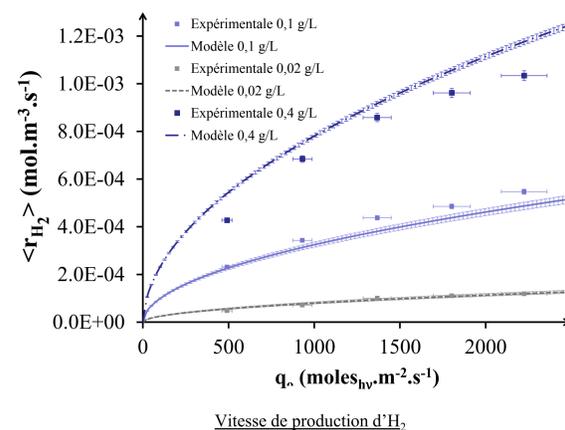
### Analyse du transfert radiatif

L'ETR a été résolue rigoureusement par la méthode de Monte Carlo. La vitesse d'absorption locale A(x) du rayonnement est ainsi déterminée en fonction de la densité de flux incidente. La diffusion des photons par les bulles d'hydrogène a été prise en compte. En intégrant sur le volume du réacteur, il est possible d'obtenir la vitesse d'absorption moyenne <A> = 1/V ∫∫∫ A dV.



Champ local d'absorption des photons

### Validation du modèle



Vitesse de production d'H<sub>2</sub>

- Intégration de la vitesse locale de production d'hydrogène sur le volume du réacteur pour obtenir une valeur moyenne théorique de <r<sub>H<sub>2</sub></sub>> = 1/V ∫∫∫ r<sub>H<sub>2</sub></sub> dV.
- Tracé des données expérimentales et théoriques pour 0.02 g/L, 0.1 g/L et 0.4 g/L en CdS,
- Le seul paramètre inconnu β (agrégant les constantes cinétiques) a été identifié sur une concentration en CdS (0,02 g/L) et utilisé de façon prédictive sur les deux autres concentrations (0,1 et 0,4 g/L).

## Conclusions

- A partir des indices de réfraction du CdS (issus de la littérature), les propriétés radiatives (diffusion, absorption) des particules ainsi que celles des bulles d'hydrogène ont été calculées et validées. Elles permettent d'obtenir le champ de rayonnement A(x) par résolution de l'ETR,
- Au moyen de la loi de couplage non linéaire établie, les vitesses volumétriques locales de production d'hydrogène ont été calculées débouchant sur l'estimation de la vitesse volumétrique moyenne en accord avec les données expérimentales.

## Bibliographie

- [1] A. Cassano et al. Ind. Eng. Chem. Res., 1995, 2155-2201
- [2] G. Dahi et al. Chemical Engineering and Processing 98 (2015) 174-186
- [3] C. Supplis et al. Int. J. Hydrog. Energy, 43(17), 8221-8231, 2018.