INTERFACES
Les Séminaires

Catégorie : Mise au point (*Long)*
Jeudi 7 mars 2019

Simulation moléculaire de l'hydrogène : stockage, séparation isotopique et dissociation

Jean-Marc Simon

ASTER, Dept. INTERFACES, Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne

L'atome d'hydrogène est l'élément chimique le plus courant dans l'Univers. On le retrouve associé à de nombreux atomes pour former des molécules comme l'eau, les hydrocarbures et aussi sous forme de dihydrogène. Cette molécule (H_2) est utilisée pour stocker de l'énergie ou en fournir (pile à combustible), on la retrouve aussi associée à des processus de décomposition de molécules comme l'eau qui peuvent ne pas être désirés (comme la radiolyse de l'eau dans des zones de stockage d'éléments radioactifs).

A travers quelques exemples d'application nous allons voir comment H_2 interagit avec des solides (carbone, zéolithe) et comment cette molécule se dissocie spontanément en fonction de la température et pression. Ce travail s'appuie sur des simulations classiques de dynamique moléculaire et Monte Carlo.

Dans un premier temps je présenterai une simulation de H_2 sur une membrane de carbone en focalisant sur la diffusion de surface. Ce travail permet de mieux comprendre comment cette molécules peut migrer dans des piles à combustible jusqu'aux sites où elle va être dissociée [1].

La deuxième partie sera consacrée à une étude thermodynamique de la dissociation de H_2 sous l'effet de la température et la pression [2]. Ce travail s'appuie sur une nouvelle approche d'analyse des simulations moléculaires qui permet de calculer directement des grandeurs molaires partielles comme l'enthalpie et donc d'en déduire l'enthalpie de réaction.

Pour finir je présenterai quelques résultats de simulation de piégeage de H_2 et de ses isotopes (D_2 et T_2) sur zéolithe NaX à température cryogénique (40-100 K) [3].

[1] *Adsorption and Desorption of H_2 on Graphite by Molecular Dynamics Simulations*, J.-M. Simon, O.-E. Haas, S. Kjelstrup, *J. Phys Chem C.* 114, 10212 (2010)

[2] *The reaction enthalpy of hydrogen dissociation calculated with the small system method from simulation of molecular fluctuations*, R. Skorpa, J.-M. Simon, D. Bedeaux, S. Kjelstrup, *PCCP 16,* 19681 (2014).

[3] *Adsorption of hydrogen isotopes in the zeolite NaX: Experiments and simulations*, JM Salazar, S Lectez, C Gauvin, M Macaud, JP Bellat, G Weber, I Bezverkhyy, JM Simon, *Int. J. Hydrogen Energy*, 42, 13099 (2017)