

Offre de Thèse UCCS – SEGULA Technologies

Développement de nouveaux catalyseurs pour la décomposition thermocatalytique contrôlée de l'ammoniac pour la production d'hydrogène

Lors de la COP28 (Dubai, 2023), l'ensemble des acteurs internationaux ont appelé pour la première fois à une transition impliquant l'abandon progressif des énergies fossiles. Lors de cet événement, les armateurs internationaux se sont également unis pour accélérer la décarbonation du secteur du transport maritime responsable d'environ 3% des émissions de gaz à effet de serre. Pour y parvenir, la production d'hydrogène à partir de sources renouvelables associée à sa distribution directe semble idéale. Cependant, le stockage, le transport de l'hydrogène et son utilisation pour la mobilité lourde longue distance restent très complexes et coûteux. Sa faible densité énergétique volumétrique (9.9 MJ/m^3) et le faible point d'ébullition de l'hydrogène (-253°C) nécessitent à la fois des pressions élevées et des températures basses pour un stockage et un transport réalisable. De plus, l'hydrogène a tendance à endommager les matériaux métalliques (corrosion, perméation et fragilisation) entraînant d'importants risques de fuites et d'explosions. Le stockage de l'énergie de l'hydrogène dans les liaisons chimiques de composés transporteurs comme le méthanol, l'ammoniac, ou les LOHC (liquid organic hydrogen carrier) est proposé comme solution pour faciliter le transport et l'utilisation de l'hydrogène.

Parmi ces vecteurs, l'ammoniac se distingue par ses nombreux avantages tels que son processus de liquéfaction moins énergivore et coûteux et son potentiel pour une économie basée sur des infrastructures existantes et sa possible utilisation comme carburant décarboné pour le transport maritime. De plus, l'ammoniac présente une densité volumétrique en hydrogène supérieure à celle de l'hydrogène comprimé et liquéfié ($108 \text{ vs } 70.8 \text{ kg}_{\text{H}_2}/\text{m}^3$). Cependant, sa décomposition pour produire de l'hydrogène nécessite des températures élevées et est limitée par la cinétique de réaction. L'enjeu consiste à décomposer le NH_3 , soit de manière totale afin de récupérer l'hydrogène pour d'autres usages, soit de manière partielle pour améliorer les propriétés de combustion de l'ammoniac.

Au cours des deux dernières décennies, de nombreux catalyseurs, principalement métalliques comme le Ru et le Ni ont été testés pour catalyser la décomposition de NH_3 à basse température, le ruthénium se démarque par sa performance supérieure mais son coût très élevé et sa rareté limitent son utilisation industrielle. Cette thèse vise à relever le défi de l'utilisation industrielle de l'ammoniac comme vecteur d'hydrogène et combustible alternatif propre, en se concentrant sur le développement de catalyseurs économiquement viables et performants pour sa décomposition à basse température. D'une part, une alternative au catalyseur pour la décomposition totale d'ammoniac sera recherchée notamment par la synthèse, caractérisation et test de catalyseurs monométalliques non nobles, les systèmes bimétalliques et les phases actives à base d'amides et d'imides. D'autre part, la décomposition contrôlée de l'ammoniac sera également étudiée pour favoriser un ratio ammoniac/hydrogène optimal, améliorant ainsi l'allumage et la combustion tout en minimisant les émissions d'oxydes d'azote. Cette recherche sera menée en privilégiant l'exploration approfondie du potentiel des nitrures de métaux de transition en tant que catalyseurs.

La thèse permettra au candidat d'être formé à la recherche et de développer des compétences en synthèses/caractérisations de catalyseurs et en réalisation de tests catalytiques. L'étudiant sera aussi formé à de nombreuses techniques de caractérisation permettant d'étudier les catalyseurs préparés (porosimétrie, analyse texturales et structurale, ATG/DSC, DRX, analyses spectroscopiques Raman, IR...). Des formations complémentaires générales en Propriété Intellectuelle, sécurité, éthique sont dispensées dans le cadre de l'Ecole Doctorale. Enfin, cette thèse présente l'opportunité de pouvoir évoluer au sein d'un laboratoire de recherche reconnu à l'international en étant impliqué dans une équipe R&I de SEGULA Technologies.

Profil recherché :

Etudiant(e) en master ou école d'ingénieur dans le domaine de la chimie et/ou des matériaux et/ou de la catalyse hétérogène, motivé(e) sérieux(se), méthodique et intéressé(e) par des travaux de recherche appliquée.

Connaissances linguistiques : Bonne maîtrise de l'anglais indispensable

Autre qualification : Une expérience de quelques techniques de caractérisation serait un plus.

Début de thèse envisagé : 01/10/2024

Financement : Co-financement Région Hauts de France/SEGULA Technologies

Le projet se déroulera à l'UCCS sur le site de l'Université de Lille, Faculté des Sciences et Technologies avec quelques missions à prévoir sur le site de la société SEGULA Technologies à Montoir-de-Bretagne.

Information importante à lire avant de soumettre votre candidature :

Le poste sur lequel vous candidatez est susceptible d'être situé dans une « zone à régime restrictif » au sens de l'article R. 413-5-1 du code pénal. Si tel est le cas, votre nomination et/ou votre affectation ne pourront intervenir qu'après autorisation d'accès délivrée par le chef d'établissement, conformément aux dispositions de l'article 20-4 du décret n°84-431 du 6 juin 1984.

Contacts :

Axel Löfberg, axel.lofberg@univ-lille.fr

Teddy Roy, teddy.roy@segula.fr

PhD Offer UCCS – SEGULA Technologies

Development of new catalysts for the controlled thermocatalytic decomposition of ammonia for hydrogen production

During COP28 (Dubai, 2023), all international stakeholders called for the first time for a transition involving the gradual phasing out of fossil fuels. During this event, international shipowners also united to accelerate the decarbonization of the maritime transport sector, responsible for about 3% of greenhouse gas emissions. To achieve this, the production of hydrogen from renewable sources combined with its direct distribution seems ideal. However, the storage, and transport of hydrogen, and its use for long-distance heavy mobility remain very complex and costly. Its low volumetric energy density (9.9 MJ/m³) and the low boiling point of hydrogen (-253°C) require both high pressures and low temperatures for feasible storage and transport. Moreover, hydrogen tends to damage metallic materials (corrosion, permeation, and embrittlement) leading to significant risks of leaks and explosions. The storage of hydrogen energy in the chemical bonds of carrier compounds like methanol, ammonia, or LOHCs (liquid organic hydrogen carriers) is proposed as a solution to facilitate the transport and use of hydrogen.

Among these vectors, ammonia stands out for its numerous advantages such as its less energy-intensive and costly liquefaction process, its potential for an economy based on existing infrastructures, and its possible use as a decarbonized fuel for maritime transport. Additionally, ammonia has a higher volumetric hydrogen density than that of compressed and liquefied hydrogen (108 vs 70.8 kg_{H₂}/m³). However, its decomposition to produce hydrogen requires high temperatures and is limited by reaction kinetics. The challenge lies in decomposing NH₃, either completely to recover the hydrogen for other uses or partially to improve its combustion properties.

Over the past two decades, numerous catalysts, primarily metallic ones like Ru (ruthenium) and Ni (nickel), have been tested for catalyzing the low-temperature decomposition of NH₃, with ruthenium standing out for its superior performance. However, its very high cost and scarcity limit its industrial use. This thesis aims to address the challenge of industrial use of ammonia as a hydrogen vector and clean alternative fuel, focusing on the development of economically viable and efficient catalysts for its low-temperature decomposition. On one hand, an alternative to the catalyst for the complete decomposition of ammonia will be sought, particularly through the synthesis, characterization, and testing of non-noble monometallic catalysts, bimetallic systems, and active phases based on amides and imides. On the other hand, the controlled decomposition of ammonia will also be studied to promote an optimal ammonia/hydrogen ratio, thereby improving ignition and combustion while minimizing nitrogen oxide emissions. This research will prioritize a thorough exploration of the potential of transition metal nitrides as catalysts.

The thesis will allow the candidate to be trained in research and to develop skills in catalyst synthesis/characterization and in conducting catalytic tests. The student will also be trained in numerous characterization techniques to study the prepared catalysts (porosimetry, textural and structural analysis, TGA/DSC, XRD, Raman and IR spectroscopic analyses...). Additional general training in Intellectual Property, safety, and ethics is provided as part of the Doctoral School. Finally, this thesis



presents the opportunity to evolve within a research laboratory recognized internationally, being involved in an R&D team of SEGULA Technologies.

Candidate profile:

Student in a master's program or engineering school in the field of chemistry and/or materials science and/or heterogeneous catalysis, motivated, serious, methodical, and interested in applied research work.

Language skills: A good proficiency in English is essential

Other qualifications: Experience with some characterization techniques would be a plus.

The start of the thesis is planned for October 1st, 2024

Funding: Co-funding by the Hauts de France Region/SEGULA Technologies

The project will take place at UCCS on the campus of the University of Lille, Faculty of Science and Technology, with some missions planned at the SEGULA Technologies site in Montoir-de-Bretagne.

Important information to read before applying:

The position for which you are applying is likely to be located in a "restricted area" within the meaning of article R. 413-5-1 of the penal code. If this is the case, your appointment and/or assignment can only take place after access authorization has been issued by the head of the institution, in accordance with the provisions of article 20-4 of decree n°84-431 of June 6, 1984.

Contacts :

Axel Löfberg, axel.lofberg@univ-lille.fr

Teddy Roy, teddy.roy@segula.fr

