



HAL
open science

Molécules photo-commutables pour le stockage de l'énergie solaire.

Vincent Goetz, Karine Loubière, Odile Dechy-Cabaret, Rémi Métivier

► **To cite this version:**

Vincent Goetz, Karine Loubière, Odile Dechy-Cabaret, Rémi Métivier. Molécules photo-commutables pour le stockage de l'énergie solaire.. Colloques Energies, Journées de restitution des PEPS, Mar 2022, Paris, France. hal-04815731

HAL Id: hal-04815731

<https://cnrs.hal.science/hal-04815731v1>

Submitted on 3 Dec 2024

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

V. Goetz¹, K. Loubière², O. Dechy-Cabaret³, R. Métivier⁴

¹ Procédés Matériaux et Energie Solaire, PROMES UPR 8521, Perpignan

² Laboratoire de Génie Chimique, LGC UMR 5503, Toulouse

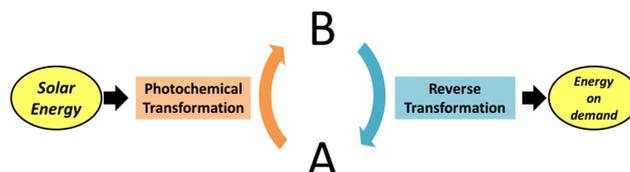
³ Laboratoire de Chimie et de Coordination, LCC UPR 8241, Toulouse

⁴ Photophysique et Photochimie Supramoléculaires et Macromoléculaires, PPSM UMR 8531, Saclay

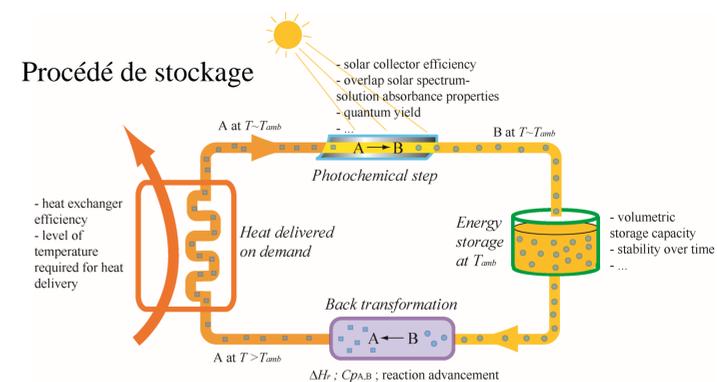
Objectifs

Explorer une nouvelle option de stockage de l'énergie solaire par conversion directe (et réversible) à l'échelle moléculaire de l'énergie transportée par les photons.

Principes fondamentaux



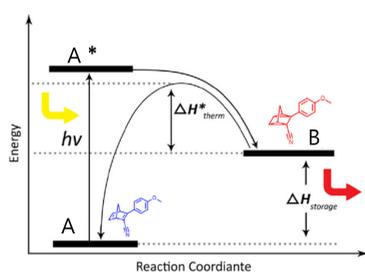
Procédé de stockage



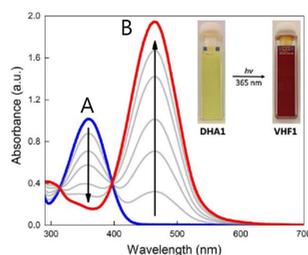
Méthodologie

Efficacité d'un stockage thermique de l'énergie solaire par photo-isomérisation

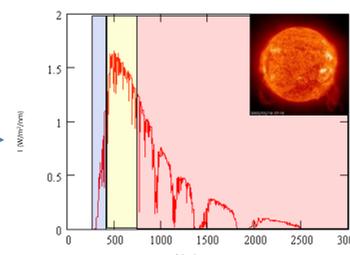
$$\eta_f = \frac{\int_{\lambda^-}^{\lambda^+} \frac{q(\lambda)}{\left(\frac{h \cdot c}{\lambda}\right)} \cdot \phi_{iso} \cdot \Delta H_{sto} \cdot (1 - Tr(\lambda)) \cdot d\lambda}{\int_{\lambda_{inf}}^{\lambda_{sup}} q(\lambda) \cdot d\lambda} \quad (-)$$



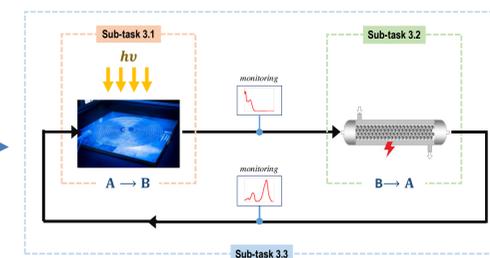
Niveaux d'énergie des isomères.
 ΔH_{sto} : enthalpie de stockage.



$(\lambda^+, \lambda_{max}, \lambda^-)$: spectre absorption de A
 ϕ_{iso} : rendement quantique de photo-isomérisation



$q(\lambda)$: spectre solaire



$Tr(\lambda)$: Transmittance
Génie des photo-réacteurs, réacteurs catalytiques

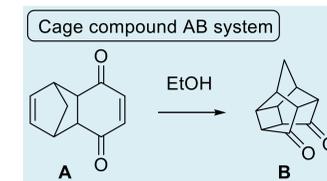
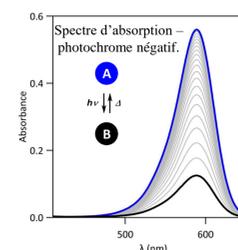
Principaux résultats/conclusions

- Une mise en évidence des limites des molécules aujourd'hui identifiées dans la littérature (NBD/QC, DHA1/VHF1 et dérivés,...). Efficacité maximale de l'ordre de quelques %.
- Une mise évidence de l'intérêt de la simulation moléculaire comme outil d'investigation qui permettra de cibler (ou d'écartier) des familles de composés.
- Une ouverture nécessaire vers de nouvelles molécules telles que les composés cage et/ou les photochromes négatifs qui permettront de travailler dans le domaine du visible et avec des solvants éco-compatibles.

Simulation moléculaire (Volkman J., LCC): Evolutions des longueurs d'onde maximum d'absorption, temps de demi-vie et enthalpies de stockage de composés basés sur le NBD associé à différents groupes fonctionnels.

Molécule	Code	MM [g mol ⁻¹]	λ_{max} (nm)	$t_{1/2}$ [h] (25 °C)	ΔH_{rev} (activation) [kJ mol ⁻¹]	ΔH_{iso} [kJ mol ⁻¹]	ρ density [kg l ⁻¹]
	1	92	236	10 ⁷	140	113	1128
	2	244	308	1030	111	96	393
	3	274	309	751	111	97	354
	4	342	318	70	105	98	287
	5	299	350	209	107	97	324

Résultats expérimentaux préliminaires obtenus sur les familles de molécules étudiées.



A: 1,4,4a,8a-tetrahydro-endo-1,4-methanonaphthalene-5,8-dione
B: pentacyclo[5.4.0.0.0.0]undecane-8,11-dione

Perspectives

Projet « SOLPHOTOCAT = Storage and Conversion of SOLar energy via PHOTOCheMical and CATalytic reactions ».

Lauréat de l'Appel à Projets Générique – AAPG 2021, CE50 Science de base pour l'énergie

Coordinatrice, Dechy-Cabaret Odile, LCC.

Durée 48 mois, financement 543 k€

Laboratoires impliqués:



Personnels permanents impliqués.

LCC: Dechy-Cabaret O., Durand J., Volkman J., N. Imlyhen N.,

PPSM: Metivier R., Laurent G., Nakatani K., Xie J.

LGC: Loubière K., Julcour C., Blanco J.F., Pontier A., Fahri L.

PROMES: Goetz V., Olives R., Mancaux J.M.

Communications/Dissémination/valorisation

Aurélié Djian, Guillaume Laurent, Keitaro Nakatani, Joanne Xie, Rémi Métivier, "Synthèse et étude photophysique de Donor Acceptor Stenhouse Adducts (DASAs)", PhotOnline, 15 octobre 2020 (webconférence).

Participation au Symposium on Molecular Solar Thermal Systems, 20 avril 2021 (webconférence)

Rapport : Etude bibliographique sur les molécules photo-commutables pour le stockage de l'énergie solaire. (Stage L3 de 2 mois de Jade Raimbault, PPSM)