

Sujet de thèse au LGC à Toulouse :

Élaboration d'électrodes 3D par fabrication additive : optimisation numérique et application à l'électrosynthèse de l'ammoniac

Durée : 3 ans (démarrage : 1 octobre 2024)

Financement : Université Toulouse 3, Paul Sabatier

École doctorale : Mécanique, Énergétique, Génie Civil et Procédés, [MEGEP](#)

Laboratoire : Laboratoire de Génie Chimique, [LGC](#)

Mots clés : hydrodynamique, transfert de matière, électrochimie, modélisation, fabrication additive, électrosynthèse, électrification, énergie, environnement, décarbonation, hydrogène

Les réacteurs électrochimiques jouent un rôle clé dans plusieurs domaines tels que i) la production et le recyclage des matières premières (électrosynthèse, chlore-soude, H₂, métaux...), ii) la protection de l'environnement (dégradation des matières polluantes, procédés décarbonés, valorisation du CO₂...) et iii) la transformation et le stockage de l'énergie (*fuel cells*, batteries *redox flow*). Ils sont également capitaux pour le développement de solutions **décarbonées** basées sur **l'électrification** (stockage des énergies renouvelables, électrosynthèse). Les nouvelles applications électrochimiques dans ces domaines (contribuant à atteindre la **neutralité carbone** en 2050 [1]) nécessitent une conception **optimale** et **rapide** de réacteurs électrochimiques **performants**. Dans ce contexte, cette thèse vise à mettre en œuvre la Fabrication Additive (FA) pour le développement de nouvelles électrodes du réacteur. Le contrôle total de la géométrie offert par la FA permet de produire des électrodes 3D/poreuses de formes complexes, qui ne sont pas réalisables par les méthodes de fabrication conventionnelles, et qui conduisent à des performances électrochimiques (flux de matière/courant et sélectivité/distribution de potentiel) et hydrauliques (résistance à l'écoulement) grandement améliorées. La structure étant entièrement numérisée, il est possible de simuler l'écoulement, et les transferts de matière et de charges, au travers d'une électrode 3D produite par FA [2]. Cela ouvre la voie à l'optimisation numérique de la structure des électrodes afin de concevoir et produire plus rapidement un réacteur électrochimique **adapté, optimisé et sélectif** pour une application donnée ; en évitant donc la longue et coûteuse phase d'optimisation expérimentale. La FA représente un changement de paradigme vis-à-vis du développement classique des électrodes d'un réacteur, mais cependant aucune méthode d'optimisation n'a encore été développée. De plus, l'apport des électrodes 3D produites par FA n'a pas encore été évalué et exploité pour des applications électrochimiques d'intérêt actuel. Dans ce contexte, **les objectifs principaux de cette thèse sont** :

- **Développer une méthode pour optimiser numériquement la structure des électrodes 3D** : sélection et mise en place d'une simulation numérique de l'écoulement et de la distribution

- de potentiel/courant prenant en compte la cinétique électrochimique et le transfert de matière (simulation directe CFD, modèle effectif continu, milieu poreux), optimisation
- **Valider expérimentalement la performance des électrodes 3D optimisées numériquement** : production d'électrodes 3D par FA métallique LPBF (Laser Powder Bed Fusion), détermination des paramètres de FA (lasage), mesures électrochimiques sur un réacteur filtre-press intégrant les électrodes (voltammétries, électrolyses, mesure du courant limite)
 - **Application à l'électrosynthèse de l'ammoniac NH_3** qui est considéré aujourd'hui comme une voie de stockage de l'hydrogène et dont la production, sans utiliser de H_2 d'origine fossile (alternative au procédé Haber-Bosch), est un axe de décarbonation important : utilisation des électrodes 3D produites par FA pour augmenter le flux et le rendement de production de NH_3 (électrolyses, analyse chimique, dosage de NH_3).

La recherche sera réalisée au Laboratoire de Génie Chimique (LGC) dans l'équipe Electre du département Procédés Électrochimiques. L'équipe Electre est spécialisée dans la conception, la modélisation et la mise en œuvre de réacteurs et microréacteurs électrochimiques (électrosynthèses, dépollution, batteries *redox flow*). Le LGC possède tous les moyens analytiques et numériques nécessaires pour mener à bien cette étude. Ce projet sera réalisé en collaboration avec le Laboratoire d'Études des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3) à Metz pour les aspects liés à la FA métallique des électrodes.

- [1] IEA (2021), Net Zero by 2050, IEA, Paris <https://www.iea.org/reports/net-zero-by-2050>
- [2] F. Chauvet, P. Lohmuller, P. Laheurte, K. Groenen Serrano, and T. Tzedakis, [3D Printed Metal Lattice Structures Used as Flow-through Electrodes in a Filter-Press Electrochemical Reactor](#), *13th European Symposium on Electrochemical Engineering*, June 2023, Toulouse; F. Chauvet, P. Lohmuller, P. Laheurte, K. Groenen Serrano, and T. Tzedakis, Additive Manufactured Metal Lattice Structures Used as Flow-through Electrodes in a Filter-Press Electrochemical Reactor, *Chemical Engineering Journal* (under review).

Profil : Formation (niveau Master ou Ingénieur) en génie chimique/génie des procédés, ou en Mécanique des Fluides et Transferts, idéalement avec des connaissances de base en électrochimie.

Contacts :

Fabien Chauvet, Maître de Conférences LGC - Université Toulouse 3, Paul Sabatier

Email : fabien.chauvet@univ-tlse3.fr, Tel : +33 5 61 55 74 68

Théo Tzedakis, Professeur LGC - Université Toulouse 3, Paul Sabatier

Email : theodore.tzedakis@univ-tlse3.fr, Tel : +33 5 61 55 83 02

Adresse : Université de Toulouse III-Paul Sabatier, 118 route de Narbonne, 31062 Toulouse

PhD position at LGC lab - Université Toulouse 3, Paul Sabatier:

Elaboration of 3D electrodes by additive manufacturing: numerical optimization and application to the electrosynthesis of ammonia

Duration: 3 years (start: October 1, 2024)

Funding: Université Toulouse 3, Paul Sabatier, FRANCE

Doctoral school: Mechanics, Energetics, Civil & Process Engineering, [MEGEP](#)

Lab: Laboratoire de Génie Chimique, [LGC](#)

Keywords: hydrodynamics, mass transfer, electrochemistry, modeling, additive manufacturing, electrosynthesis I electrification, energy, environment, decarbonisation, hydrogen

Electrochemical reactors play a key role in several areas such as i) the production and recycling of raw materials (electrosynthesis, chlor-alkali, H₂, metals, etc.), ii) environmental protection (degradation of pollutant compounds, carbon-free processes, CO₂ recovery, etc.) and iii) energy transformation and storage (fuel cells, redox flow batteries). They are also crucial for the development of **carbon-free** solutions based on **electrification** (renewable energy storage, electrosynthesis). New electrochemical applications in these areas (contributing to achieving **carbon neutrality** in 2050 [1]) require **optimal** and **rapid** design of **efficient** electrochemical reactors. In this context, this thesis aims to implement Additive Manufacturing (AM) for the development of new electrodes of the reactor. The full geometry control offered by AM allows the production of 3D/porous electrodes with complex shapes, which are not achievable by conventional manufacturing methods, and which lead to greatly improved electrochemical (mass flux/current and selectivity/potential distribution) and hydraulics (resistance to flow) performances. As the structure is numerically designed, it is possible to simulate the flow, and the transfers of mass and charges, through a 3D electrode produced by AM [2]. This opens the way to the numerical optimization of the structure of the electrodes in order to design and produce more quickly an electrochemical reactor **adapted, optimized and selective** for a given application; thus avoiding the long and costly experimental optimization phase. AM represents a paradigm shift from the “classic” development of electrodes. However, no optimization method has yet been developed. In addition, the contribution of 3D electrodes produced by AM has not yet been evaluated and exploited for electrochemical applications of current interest. **In this context, the main objectives of this thesis are:**

- **Develop a method to numerically optimize the structure of 3D electrodes:** selection and implementation of a numerical simulation of the flow and potential/current distribution taking into account electrochemical kinetics and mass transfer (direct CFD simulation, continuous effective model, porous medium), optimization
- **Experimental validation of the performance of numerically optimized 3D electrodes:** production of 3D electrodes by metallic AM LPBF (Laser Powder Bed Fusion), determination

of AM parameters, electrochemical measurements on a filter-press reactor integrating the electrodes (voltammetry, electrolysis, measurement of the limiting current, etc.)

- **Application to the electrosynthesis of ammonia NH_3** which is considered today as a way to store hydrogen and whose production, without using H_2 of fossil origin (alternative to the Haber-Bosch process), is an important topic of decarbonisation: use of the 3D electrodes produced by AM to enhance the flux and the yield of NH_3 production (electrolysis, chemical analysis, NH_3 dosage).

This research work will be carried out at Laboratoire de Génie Chimique (LGC) in the Electre team of the Electrochemical Processes department. The Electre team specializes in the design, modeling and implementation of electrochemical reactors and microreactors (electrosynthesis, depollution, redox flow batteries). The LGC has all the required analytical and numerical resources. During this project, the Electre team will collaborate with Laboratoire d'Études des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3) in Metz (France) for aspects related to the metallic AM of the electrodes.

[1] IEA (2021), Net Zero by 2050, IEA, Paris <https://www.iea.org/reports/net-zero-by-2050>

[2] F. Chauvet, P. Lohmuller, P. Laheurte, K. Groenen Serrano, and T. Tzedakis, [3D Printed Metal Lattice Structures Used as Flow-through Electrodes in a Filter-Press Electrochemical Reactor](#), *13th European Symposium on Electrochemical Engineering*, June 2023, Toulouse; F. Chauvet, P. Lohmuller, P. Laheurte, K. Groenen Serrano, and T. Tzedakis, Additive Manufactured Metal Lattice Structures Used as Flow-through Electrodes in a Filter-Press Electrochemical Reactor, *Chemical Engineering Journal* (under review).

Profile: Academic training (Master degree) in chemical engineering/process engineering, or in fluid mechanics and transfers (mechanical engineering), ideally with basic knowledge in electrochemistry.

Contacts:

Fabien Chauvet, Associate Professor LGC - Université Toulouse 3, Paul Sabatier

Email: fabien.chauvet@univ-tlse3.fr, Tel : +33 5 61 55 74 68

Théo Tzedakis, Professor LGC - Université Toulouse 3, Paul Sabatier

Email : theodore.tzedakis@univ-tlse3.fr, Tel : +33 5 61 55 83 02

Address: 118 route de Narbonne, 31062 Toulouse, FRANCE