



PILE À COMBUSTIBLE POUR L'ÉNERGIE DU FUTUR : LE *COMING OUT* D'UNE LIAISON ENTRE FRÈRES ENNEMIS

Le stockage d'hydrogène dans des solides permet d'atteindre des densités d'hydrogène utiles pour des applications automobiles. Dans l'un de ces composés solides très réactifs, un chercheur genevois et son collègue viennent de mettre en évidence une liaison particulière entre atomes d'hydrogène "ennemis".

Le Docteur Hans Hagemann, chimiste de l'*Université de Genève*, et son collègue Yaroslav Filinchuk, du *European Synchrotron Radiation Facility* à Grenoble, ont percé le mystère qui entoure la singulière liaison se créant entre deux formes antinomiques de l'atome d'hydrogène, le proton H^+ et son frère ennemi l'hydrure H^- .

Dans un composé –le borohydrure de sodium dihydraté–, les deux chercheurs ont mis en évidence un type rare de liaison, la *liaison dihydrogène*.

Mieux, lorsqu'on chauffe ce dernier, la *liaison dihydrogène* se rompt, permettant au composé de réagir spontanément pour produire de l'hydrogène H_2 sur demande.

Cette découverte est à mettre en relation directe avec les intenses recherches menées sur la prometteuse pile à combustible, puisque c'est sur la production, le stockage et le transport de l'hydrogène que les ingénieurs butent.

LA PILE À COMBUSTIBLE: INFO OU INTOX ?

Imaginez la pile à combustible idéale : Alimentée d'hydrogène (molécule gazeuse H_2) et d'oxygène (molécule gazeuse O_2 présente à raison de 21% dans l'atmosphère), elle produit de l'électricité et évacue de l'eau. Rien de plus propre !

Seulement voilà, pour faire fonctionner cette pile à combustible, il faut beaucoup d'hydrogène. Et bien que sous sa forme atomique, H, il soit l'élément le plus abondant de l'Univers, on ne le trouve qu'en concentrations traces, sous forme moléculaire H_2 , dans l'atmosphère de notre planète.

A l'heure actuelle, l'hydrogène H_2 est produit principalement à partir de sources fossiles (charbon, hydrocarbures issus du pétrole), ce qui n'est évidemment pas en adéquation avec la pénurie annoncée des ressources pétrolières. Sans compter que le stockage et le transport de l'hydrogène, hautement réactif, posent des problèmes logistiques considérables en vue de son utilisation à large échelle dans les piles à combustible.

La panacée ? Produire l'hydrogène sur demande, directement sur son lieu d'utilisation, idéalement par électrolyse de l'eau au moyen de l'énergie solaire. Alternativement, en utilisant des composés contenant de l'hydrogène "caché", qui est libéré en temps voulu sous l'action d'un déclencheur.

NOM DE CODE : BOROHYDRURE DE SODIUM DIHYDRATÉ

C'est lors d'un symposium international tenu fin juin en Islande que le Dr Hans Hagemann, chimiste genevois, a présenté les résultats de l'étude détaillée qu'il a menée avec le Dr Yaroslav Filinchuk sur un composé contenant de l'hydrogène "caché", le borohydrure de sodium dihydraté, et son insolite *liaison dihydrogène*.

Décryptage. Le borohydrure de sodium NaBH_4 est une molécule simple, bon marché et hautement réactive, portant 4 atomes d'hydrogène chargés négativement, les hydrures H^- . Au contact avec de l'eau (qui contient des atomes d'hydrogène chargés positivement, les protons H^+), cette molécule se décompose brutalement et produit de l'hydrogène gazeux H_2 par réaction entre les frères ennemis H^- et H^+ . Ce processus, connu de longue date et exploité pour la production industrielle de nombreuses molécules nécessitant une hydrogénation, est cependant difficilement contrôlable pour une utilisation domestique.

C'est là qu'interviennent les deux chercheurs. Ils ont préparé des cristaux de borohydrure de sodium dihydraté, $\text{NaBH}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, un composé étrangement stable qui combine la molécule hautement réactive et le déclencheur de la réaction. Lorsqu'elle est chauffée au-dessus de 40°C , les composantes "borohydrure" et "eau" de cette substance se mettent à réagir et produisent spontanément mais graduellement l'hydrogène H_2 tant convoité. Voilà pour le moyen élégant de stocker, transporter et produire sur demande de l'hydrogène "caché" !

LIAISON DIHYDROGÈNE : UN MARIAGE CONTRE NATURE

Au moyen d'une source à rayons X très puissante, le synchrotron du ESRF sis à Grenoble, les chercheurs ont réussi à décoder l'intimité de leur borohydrure de sodium dihydraté. Surprise générale ! Le composé est stabilisé grâce à une liaison courte s'établissant entre les hydrures H^- du borohydrure et les protons H^+ de l'eau. Ce type de liaison, la *liaison dihydrogène*, apparaît "contre nature" puisque la théorie prédit que H^- et H^+ réagissent instantanément pour former H_2 . Sous forme cristalline, le composé empêche la réaction incontrôlable, qui peut néanmoins être déclenchée par simple élévation de température.

Ces résultats spectaculaires viennent par ailleurs de faire la couverture d'une revue spécialisée européenne (European Journal of Inorganic Chemistry) et soulignent la collaboration fructueuse entre l'Université de Genève et l'ESRF dans la recherche fondamentale sur les matériaux de stockage d'hydrogène.

**Pour tout renseignement complémentaire, n'hésitez pas à contacter le
Docteur Hans HAGEMANN : hans-rudolf.hagemann@unige.ch
Département de chimie physique
Section de chimie et biochimie – Faculté des sciences**

Tous les communiqués de presse sont disponibles à l'adresse :
<http://www.unige.ch/presse/?communiqués.html>

Données source:

- Y. Filinchuk and H. Hagemann.
Structure and Properties of $\text{NaBH}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ and NaBH_4 .
European Journal of Inorganic Chemistry, 2008, Issue 20, p.3127-3133.
Published online 10 July 2008.
dx.doi: 10.1002/ejic.200890053
<http://www3.interscience.wiley.com/journal/120736002/issue>
- H. Hagemann.
New vibrational spectra and structures of metal borohydrides.
MH2008, International Symposium on Metal-Hydrogen Systems, June 2008 Reykjavik.
<http://erik.raunvis.hi.is/mh2008/>