LES DONNEES DE BASE PHYSICO-CHIMIQUES SUR L'HYDROGENE

(Et quelques comparaisons avec le gaz naturel)

L'hydrogène est l'atome situé en première place dans le tableau périodique des éléments. C'est le plus simple: un noyau constitué d'un proton, et un électron périphérique.
C'est donc l'atome le plus léger avec ses qualités et ses défauts :

- La qualité d'être beaucoup plus léger que l'air et donc de diffuser rapidement, ce qui est un élément très favorable à la sécurité de son utilisation,
- Sa faible densité devient un inconvénient pour son transport dans la mesure où elle impose soit une mise en pression, soit une liquéfaction, les deux pénalisant la dépense énergétique qui accompagne son utilisation.

Les caractéristiques données dans cette fiche sont celles de la **molécule dihydrogène**, constituée de deux atomes d'hydrogène. Par esprit de simplification, on confond le plus souvent hydrogène et dihydrogène. Il s'agit bien ici des données de base sur le dihydrogène ou molécule H_2.

Quelques caractéristiques générales sur l'hydrogène:

- Il est le seul combustible non carboné, donc non producteur de CO_2 au cours de sa combustion,
- Il est très abondant sur terre, sous forme atomique (eau, hydrocarbures, …) et quasi inexistant à l'état naturel sous forme moléculaire,
- Il est inodore, ce qui est un facteur de risque,
- Sa flamme est incolore, ce qui présente un inconvénient (invisible donc non détectable visuellement) et un avantage (la chaleur ne rayonne pas, donc a moins de risque d'enflammer d'autres objets ou surface à proximité),
- Il n'est pas toxique,

Quelques commentaires sur les chiffres donnés dans le tableau ci-après :

- Le pouvoir calorifique massique de l'hydrogène est le plus élevé de tous les combustibles existants : cela explique l'intérêt que les énergéticiens lui trouvent.
- La gamme de concentration mini et maxi pour permettre son inflammation dans l'air est beaucoup plus large que pour le gaz naturel, mais en contrepartie les conditions pour que ces concentrations soient atteintes sont beaucoup plus difficiles à obtenir, du fait de la forte diffusion de l'hydrogène, beaucoup plus léger que l'air contrairement au gaz naturel. De la même façon et pour les mêmes raisons, la gamme de concentration pour la détonation est plus large qu'avec le gaz naturel, mais les conditions de détonation sont plus difficiles à obtenir. Cela ne signifie pas que l'hydrogène ne comporte pas de risque mais simplement que la probabilité d'explosion (et de détonation) sont plus faibles qu'avec le gaz naturel en milieu ouvert, c'est-à-dire non confiné. La gestion du risque hydrogène doit essentiellement se concentrer sur la nécessité de rester en milieu ouvert dans toutes les configurations possibles, y compris accidentelles.

Propriété	Valeur numérique
PCI (Pouvoir calorifique inférieur)	10 800 kJ/Nm^3 119 930 kJ/kg (gaz naturel 50 020 kJ/kg) 3.00 kWh/Nm^3 33.33 kWh/kg
PCS (Pouvoir calorifique supérieur : inclut l'énergie de la vapeur d'eau)	12 770 kJ/Nm^3 141 860 kJ/kg 3.55 kWh/Nm^3 39.41 kWh/kg
Densité gazeuse à 20,3K	1.34 kg/m^3
Densité gazeuse à 273K	0.08988 kg/Nm^3 (gaz naturel 0.6512 kg/Nm^3)
Densité liquide à 20.3K	70.79 kg/m^3
Chaleur spécifique (C_p)	14 266 J/kg.K (293K)
Chaleur spécifique (C_v)	10 300 J/kg.K
Conductivité thermique du gaz	0.1897 W/(m.K)
Chaleur d'évaporation	445.4 kJ/kg
Energie théorique de liquéfaction	14 112 J/g (3.92kWh/kg)
Electronégativité (Pauling)	2.1
Masse atomique	1.0079
Constante du gaz	4 124.5 J/kg.K
Température de solidification	14.01K
Température d'ébullition (à 1013 mbar abs.)	20.268K
Température critique	33.30K
Température d'auto inflammation dans l'air	858K (gaz naturel 813K)
Température de flamme dans l'air à 300K	2 318K (gaz naturel 2 148K)
Limites d'inflammabilité dans l'air (vol %)	4-75 (gaz naturel 5.3-15)
Limites de détonation dans l'air (vol %)	13-65 (gaz naturel 6.3-13.5)
Energie minimale d'inflammation (µJ)	20 (gaz naturel 290)
Energie explosive théorique (kg de TNT/m^3 de gaz)	2.02 (gaz naturel 7.03)
Surpression de détonation (mélange stœchiométrique)	14.7 bars (gaz naturel 16.8 bars)
Coefficient de diffusion dans l'air	0.61 cm²/s (gaz naturel 0.16)
Vitesse de flamme dans l'air	260 cm/s (7 fois le gaz naturel)
Vitesse de détonation dans l'air	2.0 km/s (gaz naturel 1.8 km/s)
Mélange stœchiométrique dans l'air (vol)	29.53% (gaz naturel 9.48%)

Autres caractéristiques

- Teneur dans l'air : 0,5 ppmv ou 0,00005%
- Solubilité dans l'eau : 0,0214 vol/vol (à 1,013 bar et 0°C)
- Compatibilité avec les matériaux : il existe des données complètes (cf. le site Web Air Liquide) de compatibilité avec tous les matériaux connus.
  Pour les plus répandus, cette compatibilité est :
  - Bonne avec : aluminium, cuivre et leurs alliages
  - Moyenne avec l'acier inoxydable (risques de fragilisation),
  - Bonne avec certains aciers (pipelines existants), et risque de fragilisation avec d'autres,
  - Bonne avec les plastiques (PTFE, PVDF, polyamide), malgré une légère porosité à prendre en compte (cas des liners thermoplastiques utilisés dans les réservoirs composites haute pression),
  - Bonne avec les élastomères.

- Courbe d'équilibre liquide-vapeur (référence Air Liquide)

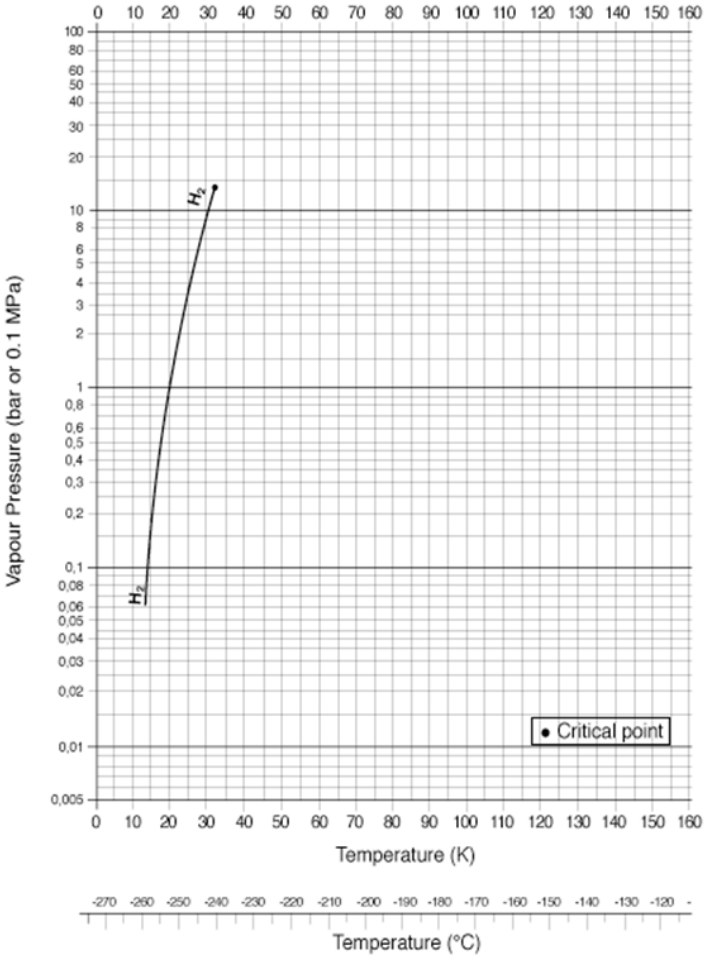

Figure 1 – Courbe d'équilibre liquide – vapeur pour l'hydrogène

- Equation d'état (ou équation de Van der Waals) de l'hydrogène, liant pression (P), volume (V) et température (T), système MKS

$$(P + a/V^2)\ (V-b) = RT$$

avec : $a = 2{,}48.10^{-2}$, $b = 2{,}66.10^{-5}$, R = 8,32 joules/mole-degré, T température absolue

- Compressibilité de l'hydrogène : pour un gaz parfait, la relation (P,V) suit la loi de Mariotte :

$$PV = \text{constante}$$

Dans la réalité, les gaz sont plus compressibles que ne l'indique la Loi de Mariotte, à l'inverse de l'hydrogène : par exemple, pour réduire le volume de 1 à 1/16, il faut faire passer la pression de 1 à 16,162 atmosphères (au lieu de 15,8 par exemple pour l'air). Pour un volume donné, l'écart avec la loi de Mariotte croit avec la pression : cela explique qu'il y a un optimum (technologie – coût) de pression au-delà de laquelle, il n'est pas intéressant de comprimer le gaz. Cet optimum se situe autour de 700 bars pour l'hydrogène, ce qui explique le choix qui a été retenu par les technologues pour les réservoirs composites destinés aux véhicules.