Stage de Formation Continue

**Calculs de spéciation en solution et aux interfaces**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Lieu**  Chimie ParisTech  Paris 5ème  <https://www.chimie-paristech.fr/> | | **Dates**  4-8 Juin 2018 | |
| **Intervenants**  A. Hofmann (Univ. Lille 1 - CNRS)  G. Lefèvre (Chimie ParisTech - CNRS)  J. Lützenkirchen (KIT/INE)  R. Marsac (Univ. Rennes - CNRS) | **Public concerné**  Chercheurs et doctorants souhaitant se former  ou se perfectionner sur les calculs de spéciation  La connaissance des bases de la chimie en solution est requise | |

|  |
| --- |
| **Objectifs**  Ce stage vise à familiariser les participants à l’utilisation de logiciels de spéciation d’espèces en solution et adsorbées. Il est structuré en 3 modules consistant en (1) une introduction à l’utilisation du logiciel PHREEQC pour la spéciation des ions et des solides, (2) une introduction au transport réactif, (3) une présentation des différents modèles de complexation de surface et les limites de leur utilisation.  Une partie importante de la formation sera consacrée à l’utilisation de logiciels.  Il est possible de ne suivre qu’une partie du stage de formation. |

**Programme**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Jours 1-2 : Introduction à**  **PHREEQC**  Rappels de chimie analytique Bases de données thermodynamiques  Présentation des différents logiciels de spéciation  Utilisation de PHREEQC :  Bases de données, fichiers input et output  Equilibres en solution, précipitation | **Jour 3 : Adsorption**  Echange d’ions et complexation de surface, notions de charge/potentiel de surface, groupes réactifs, double couche électrostatique, potentiel zêta, théorie DLVO | | **Jour 4 : Transport réactif**  Equation du transport et paramètres critiques  Couplage réaction-transport  Modélisation dans PHREEQC  Exemples d’application  **Jour 5 : Perfectionnement à la complexation de surface**  Démarche de modélisation d’un système solide/solution  Modèle de complexation  de surface multisite (MUSIC) dans PHREEQC |
| **Renseignements**  Grégory Lefèvre  gregory.lefevre@chimie-paristech.fr  Tél. : 01.44.27.80.98 | |

Stage de Formation Continue

**Calculs de spéciation en solution et aux interfaces**

À envoyer **avant le 9 avril 2018**

à *gregory.lefevre@chimie-paristech.fr*

Nom : Prénom :

Tél. : Fax : E-mail :

Adresse :

Coordonnées de la personne en charge du paiement (gestionnaire d’unité, ou Service Formation Permanente, …) :

*Tarifs (Repas de midi inclus)*

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Jours | Permanent | Non-permanent\* |
| (1-2) | 700 | 600 |
| (1-3) | 850 | 700 |
| (1-4) | 1000 | 800 |
| (1-5) | 1100 | 900 |

*\*Tarif réservé aux doctorants ou post-doctorants (sur justificatif)*

Jours choisis :

Tarif :

*Les propositions ci-dessus sont des structures-types de formation. Il est possible de ne suivre que certaines journées, selon les besoins de formation. N’hésitez pas à contacter G. Lefèvre dans ce cas.*

*NB*

*1. Un bon de commande sera à envoyer seulement après une confirmation de notre part de l’inscription.*

*2. Le service de la formation permanente de votre employeur prend habituellement en charge les frais d’inscription, n’hésitez pas à le contacter.*

*3. Pour préparer votre déplacement, les horaires des journées seront : 9h00 – 17h30.*