

## Stage de Formation Continue

### Calculs de spéciation en solution et aux interfaces

#### Lieu

Chimie ParisTech - PSL  
11, Rue Pierre et Marie Curie  
75005 Paris  
<https://www.chimieparistech.psl.eu/>

#### Dates

3 – 6 juin 2024

#### Intervenants

Romain Dagnelie (CEA, Université Paris- Saclay)  
Annette Hofmann (Univ. Lille)  
Grégory Lefèvre (Chimie ParisTech - CNRS)  
Rémi 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 présentation des différents modèles de complexation de surface et d'échanges d'ions, et (3) la simulation du transport réactif.

Une partie importante de la formation sera consacrée à l'utilisation de logiciels.

#### Programme

##### Introduction à PHREEQC (1,5 jours)

- Rappels de chimie des solutions
- Bases de données thermodynamiques
- Présentation des différents logiciels de spéciation
- Utilisation de PHREEQC : bases de données, fichiers entrée et sortie, équilibres en solution, précipitation, redox

##### Adsorption / échange d'ions (1,5 jours)

- Complexation de surface
- Notions de charge/potentiel de surface, groupes réactifs, double couche électrostatique
- Potentiel zêta
- Réactivité des argiles
- formalisme PHREEQC

##### Transport réactif (1 jour)

- Equation du transport et paramètres critiques
- Couplage réaction-transport
- Modélisation dans PHREEQC
- Exemples d'application

**Pour plus de renseignements, contactez :**

Grégory Lefèvre

[gregory.lefevre@chimieparistech.psl.eu](mailto:gregory.lefevre@chimieparistech.psl.eu)

**Stage de Formation Continue**  
**Calculs de spéciation en solution et aux interfaces**

À envoyer **avant le 1er mars 2024**

à [gregory.lefevre@chimieparistech.psl.eu](mailto:gregory.lefevre@chimieparistech.psl.eu)

Nom :

Prénom :

Tél. :

Fax :

E-mail :

Adresse :

Coordonnées de la personne en charge du paiement (gestionnaire d'unité, ou Service Formation Permanente, ...) (**obligatoire**) :

*Tarif pour le 4 jours (Repas de midi inclus)*

<b>Industriel</b>	<b>Secteur public</b>	<b>Non permanent* secteur public</b>
2400€	1800€	1300€

*\*Réservé aux doctorants ou post-doctorants (sur justificatif)*

Tarif correspondant au statut :

**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 – 17h00*