



Modélisation pour la séparation et le confinement



Niveau d'étude
BAC +5



ECTS
2 crédits



Composante
Faculté des
Sciences

En bref

- › **Date de début des cours:** 1 sept. 2021
- › **Langue(s) d'enseignement:** Français
- › **Méthode d'enseignement:** En présence
- › **Organisation de l'enseignement:** Formation initiale
- › **Ouvert aux étudiants en échange:** Non

Présentation

Description

Ce cours de modélisation a pour but d'introduire les méthodes de modélisation modernes de la matière que l'on peut mettre en œuvre pour étudier la chimie séparative et les milieux complexes. L'idée est de présenter les différentes échelles de description utilisées pour décrire la chimie, des simulations moléculaires aux modèles thermodynamiques tels que ceux utilisés dans le génie chimique. Un intérêt tout particulier est affiché pour la thermodynamique statistique qui permet de faire le lien entre ces échelles de description.

Volumes horaires* :

CM : 12 H

TD : 8 H

Objectifs

Le but est de permettre aux futurs diplômés de master de disposer de connaissances solides pour comprendre la mécanique moléculaire mise en jeu en chimie séparative et dans le confinement. Il s'agit tout d'abord d'étudier comment ces méthodes théoriques peuvent être envisagées pour optimiser et prédire les procédés ainsi que pour interpréter les résultats expérimentaux. Il s'agit ensuite, dans une moindre mesure, de pouvoir mettre en œuvre une démarche théorique de modélisation dans ses systèmes complexes.

Pré-requis nécessaires

Chimie générale – thermodynamique – chimie des solutions

Contrôle des connaissances

Contrôle terminal avec éventuellement seconde session.

Syllabus

Rappels de thermodynamique et de calcul différentiel

Dérivation des fonctions de plusieurs variables – Variables thermodynamiques - Principe fondamental de la thermodynamique – Justification à partir de la formule de Boltzmann – Évolution des systèmes non isolés – Potentiels thermodynamiques F et G et lien avec l'entropie de l'univers – Fonctions thermodynamiques et équations d'états



II L'Ensemble micro-canonique NVE

Le trio magique de la thermodynamique T, P, μ - Lien avec l'entropie S - Rappels de combinatoire (factorielle, arrangements et combinaisons, relation de Stirling) - Espace des phases - Hamiltonien - Application à l'oscillateur harmonique - Discrétisation et principe de Heisenberg - Calculs pratiques classiques et quantiques - Application au gaz parfait monoatomique - Relation de Sackür-Tétrode - paradoxe de Gibbs - Calculs quantiques - Applications : défauts dans les cristaux, stockage de l'hydrogène, solutions régulières, calorimétrie

III Autres ensembles thermodynamiques

Ensemble canonique NVT - Distribution de probabilité - Fonction de partition - Calculs pratiques dans l'ensemble canonique - Ensemble grand-canonique - Grand potentiel - Application au gaz parfaits - Théorème d'équipartition de l'énergie

Applications : capacités calorifiques des solides et de gaz, équilibres dans l'atmosphère, sédimentation, solutions régulières, séparations de phase thermodynamiques, équilibres liquides/vapeur, complexation en solution, adsorption sur une surface (isotherme de Langmuir, BET)

IV Initiation aux simulations moléculaires

Théorie - Modèle - Expériences Numériques - But des simulations atomiques - Simulations de Monte-Carlo et propriétés d'équilibre - Simulations de dynamique moléculaire classique et ab initio - Mise en place (création des boîtes de simulation, potentiels d'interactions, conditions aux limites périodiques) - Génération des trajectoires (algorithme de Verlet - thermostats et barostats) - Exploitation des résultats des simulations (représentations moléculaires structure, grandeurs thermodynamique (T, P, E, H), $g(r)$, $S(q)$, autres grandeurs (S , propriétés de transport)

Application : chimie des éléments f en solution, phases organique, milieux poreux pour la chimie séparative et le confinement (verres, oxides, milieux géologiques)

Informations complémentaires

Contact(s) administratif(s) :

Secrétariat Master Chimie

<https://master-chimie.edu.umontpellier.fr/>

Infos pratiques

Contacts

Responsable pédagogique

Jean-francois DUFRECHE

✉ jean-francois.dufreche@umontpellier.fr

Lieu(x)

➤ Montpellier - Triolet