

TOMISTIQUE APPLIQUÉE : Fondements Atomistiques pour la Mobilité Durable et le CCUS

Lien : https://afrique-formation.com/formation/tomistique-appliquee-fondements-atomistiques-pour-la-mobilite-durable-et-le-ccus

DURÉE
8 jours (56h)

RÉFÉRENCE
PGM416

CATÉGORIE
Motorisations et Mobilité Décarbonée

Afrique Formation

OBJECTIFS DE LA FORMATION

À l'issue de cette formation, vous serez capable de :

- Maîtriser les concepts fondamentaux de la structure atomique et des modèles quantiques
- Interpréter la configuration électronique des éléments et son influence sur les propriétés
- Comprendre l'organisation du tableau périodique et les tendances des propriétés
- Identifier les éléments critiques pour les applications énergétiques
- Décrire les différents types de liaisons chimiques et leurs caractéristiques
- Analyser l'influence des liaisons sur les propriétés des matériaux
- Expliquer le rôle des interactions intermoléculaires dans les systèmes énergétiques
- Appliquer les concepts de thermodynamique chimique à l'échelle atomique
- Analyser la cinétique des réactions et les mécanismes réactionnels
- Comprendre la structure atomique des matériaux d'électrode pour batteries
- Expliquer les mécanismes d'intercalation du lithium
- Décrire les principes de la catalyse hétérogène et de l'adsorption de surface
- Identifier les mécanismes catalytiques à l'échelle atomique
- Analyser la chimie de la combustion et la formation des polluants
- Interpréter les spectres IR, Raman, XPS et XRD
- Comprendre les principes de la modélisation DFT et dynamique moléculaire
- Appliquer la simulation moléculaire à la conception de matériaux
- Expliquer les mécanismes d'adsorption du CO2 sur différents matériaux
- Analyser les voies de conversion catalytique du CO2
- Décrire la chimie des carburants alternatifs à l'échelle moléculaire
- Évaluer les nouvelles technologies de matériaux par design atomique
- Identifier les apports de l'IA à la découverte de nouveaux matériaux
- Établir les liens entre structure atomique et propriétés macroscopiques
- Contribuer à l'innovation en matériaux pour la transition énergétique

Afrique Formation

POUR QUI ?

- Ingénieurs R&D en matériaux pour l'énergie et le stockage
- Chercheurs en chimie des matériaux et électrochimie
- Ingénieurs de développement de batteries et systèmes de stockage
- Ingénieurs procédés spécialisés en catalyse industrielle
- Techniciens supérieurs en caractérisation des matériaux
- Ingénieurs combustion et développement de carburants
- Responsables techniques des projets CCUS
- Ingénieurs modélisation et simulation moléculaire
- Doctorants et post-doctorants en chimie physique et matériaux
- Ingénieurs qualité dans l'industrie des batteries et catalyseurs
- Responsables innovation du secteur pétrolier et minier
- Ingénieurs application chez les fournisseurs de matériaux
- Analystes et veilleurs technologiques du secteur énergétique
- Ingénieurs environnement travaillant sur la décarbonation
- Chefs de projet en électrification et mobilité durable
- Ingénieurs support technique chez les équipementiers automobiles
- Responsables de laboratoires d'analyse et caractérisation
- Professionnels en reconversion vers les technologies de l'énergie

Afrique Formation

AFRIQUE FORMATION
La Référence en Afrique pour la Formation



Programme détaillé

1 / Structure de l'atome et modèles atomiques

- Évolution des modèles atomiques : de Bohr à la mécanique quantique
- Orbitales atomiques, nombres quantiques et configuration électronique
- Structure électronique des éléments clés pour l'énergie (Li, Co, Ni, Pt, C, O)

2 / Tableau périodique et propriétés des éléments

- Organisation du tableau périodique et tendances des propriétés
- Électronégativité, rayon atomique et énergie d'ionisation selon Pauling
- Éléments critiques pour les batteries, catalyseurs et matériaux de capture

3 / Liaisons chimiques fondamentales

- Liaison covalente : théorie des orbitales moléculaires et hybridation
- Liaison ionique et structures cristallines
- Liaison métallique et propriétés des métaux pour l'énergie

4 / Interactions intermoléculaires et états de la matière

- Forces de Van der Waals, liaisons hydrogène et interactions dipôle-dipôle
- Influence des interactions faibles sur les propriétés des matériaux
- Applications aux électrolytes et membranes pour batteries et piles à combustible

Afrique Formation

5 / Thermodynamique chimique à l'échelle atomique

- Énergie de liaison et enthalpie de réaction
- Entropie et énergie libre de Gibbs
- Stabilité thermodynamique des matériaux d'électrode et des catalyseurs

6 / Cinétique chimique et mécanismes réactionnels

- Théorie de l'état de transition et énergie d'activation
- Mécanismes réactionnels élémentaires à l'échelle moléculaire
- Cinétique de combustion des hydrocarbures selon Westbrook

7 / Chimie des matériaux d'électrode pour batteries

- Structure atomique des matériaux de cathode (NMC, LFP, NCA) selon Goodenough
- Mécanismes d'intercalation du lithium à l'échelle atomique
- Matériaux d'anode : graphite, silicium et leurs structures

8 / Catalyse hétérogène et chimie de surface

- Adsorption physique et chimique sur surfaces catalytiques selon Ertl
- Sites actifs et mécanismes catalytiques à l'échelle atomique
- Applications aux catalyseurs de post-traitement (DOC, SCR, TWC)

9 / Chimie de la combustion et formation des polluants

- Rupture et formation de liaisons lors de la combustion
- Mécanismes de formation des polluants (NOx, CO, particules, HAP)
- Chimie des carburants alternatifs : hydrogène, méthanol, ammoniac

10 / Techniques spectroscopiques de caractérisation

- Spectroscopie infrarouge (IR) et Raman pour analyse moléculaire
- Spectroscopie photoélectronique X (XPS) pour analyse de surface selon Zare

Afrique Formation

- Diffraction des rayons X (XRD) pour analyse structurale

11 / Modélisation moléculaire et simulation

- Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) selon Parrinello
- Dynamique moléculaire et simulations Monte-Carlo
- Applications à la conception de matériaux pour batteries et catalyseurs

12 / Chimie du CO2 et matériaux de capture

- Structure moléculaire du CO2 et propriétés chimiques
- Mécanismes d'adsorption sur amines, MOF et zéolithes selon Yaghi
- Conversion catalytique du CO2 en carburants de synthèse

13 / Atomistique des carburants alternatifs et e-fuels

- Chimie moléculaire de l'hydrogène et stockage dans les matériaux
- Synthèse des e-fuels : réactions de Fischer-Tropsch à l'échelle atomique
- Biocarburants et leur compatibilité moléculaire avec les systèmes existants

14 / Perspectives et nouvelles frontières

- Nouveaux matériaux par design atomique : batteries solides, supercondensateurs
- Intelligence artificielle et machine learning pour la découverte de matériaux
- Chimie computationnelle et accélération de l'innovation pour la transition énergétique

Afrique Formation

Approche pédagogique

- Support Ecrit et Projection
- Exposés Interactifs, Podcasts et Vidéos
- Brainstorming et Jeux de Rôle
- Mises en Situation pour faciliter l'assimilation
- Cas Pratiques et Labs inclus pour leur impact opérationnel
- Test de Validation des Acquis des Connaissances

Prochaines dates programmées

12 au 21 Jan. 2027	Présentiel - Casablanca
08 au 17 Mars 2027	Présentiel - Casablanca
03 au 12 Mai 2027	Présentiel - Casablanca
28 Juin au 07 Juil. 2027	Présentiel - Casablanca
23 Août au 01 Sep. 2027	Présentiel - Casablanca

Autres dates possibles sur demande. Contactez-nous pour organiser une session intra-entreprise.

Réservation & Renseignements

Téléphone : +212 522 247 210
Email : contact@afrique-formation.com
Web : https//www.afrique-formation.com

Afrique Formation — Tous droits réservés