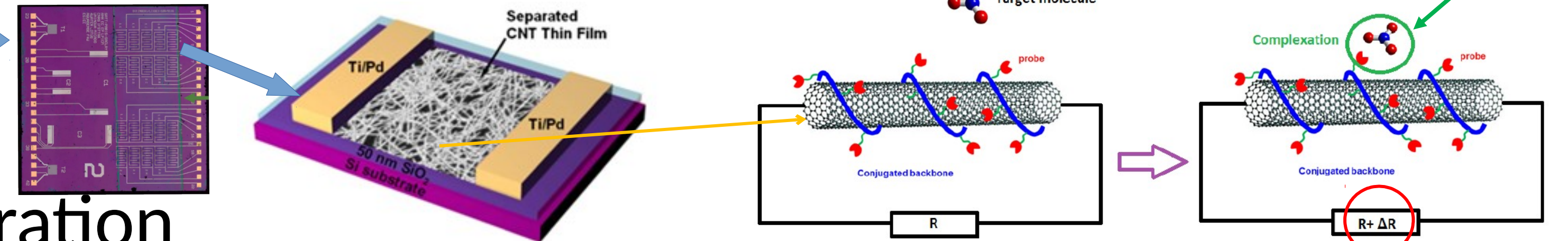


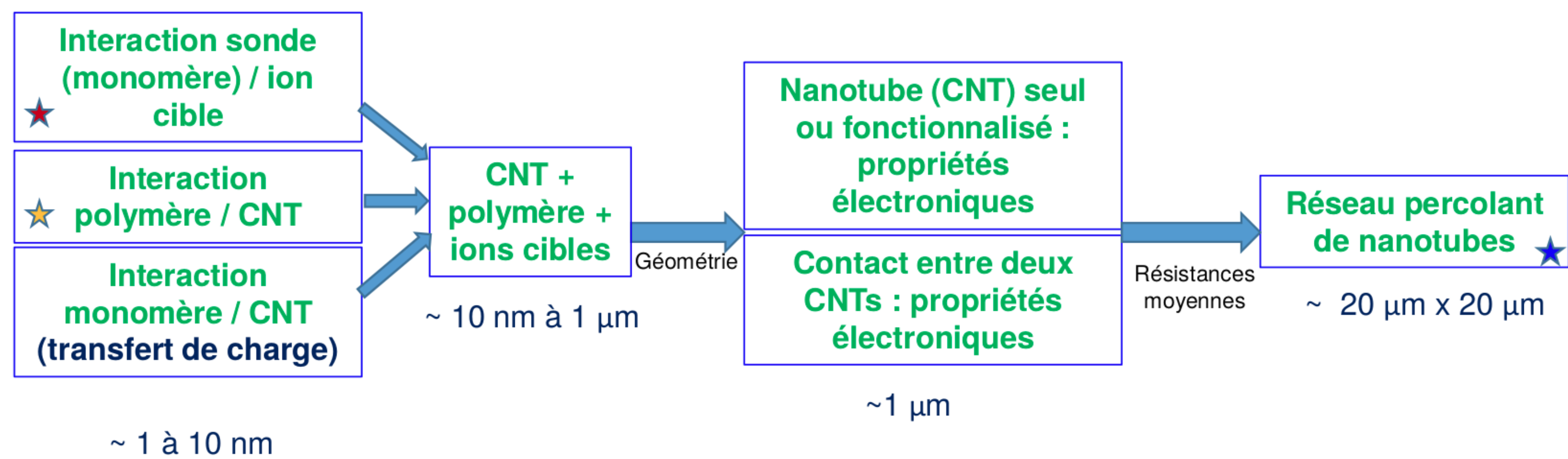
● Contexte et objectifs

- Enjeu d'atteinte du 'bon état chimique' de la Directive Cadre sur l'Eau.
- Enjeux d'adaptation de l'usage de l'eau à son niveau de qualité (ex : irrigation vs. eau potable).
- Mieux connaître la qualité de l'eau : mesures plus fréquentes et plus nombreuses.
- Capteurs **multi-paramètres** à bas coût (nanotubes de carbone et polymères).
- Objectifs du capteur : mesurer la concentration de divers **ions** d'intérêt (ex : ClO^- , Cl^- , F^- , NO_3^- , Cu^{2+} , etc.) par un changement de **résistance**.
- Objectifs de la thèse : comprendre les mécanismes de sensibilité du capteur et aider à la conception des **polymères / nanotubes** « optimaux » pour détecter un **ion** cible donné.



● Résumé

- Démarche de modélisation multi-échelle « en entonnoir »
- Paramétrer le modèle à l'échelle N à l'aide des résultats à l'échelle (N-1). Exemple :

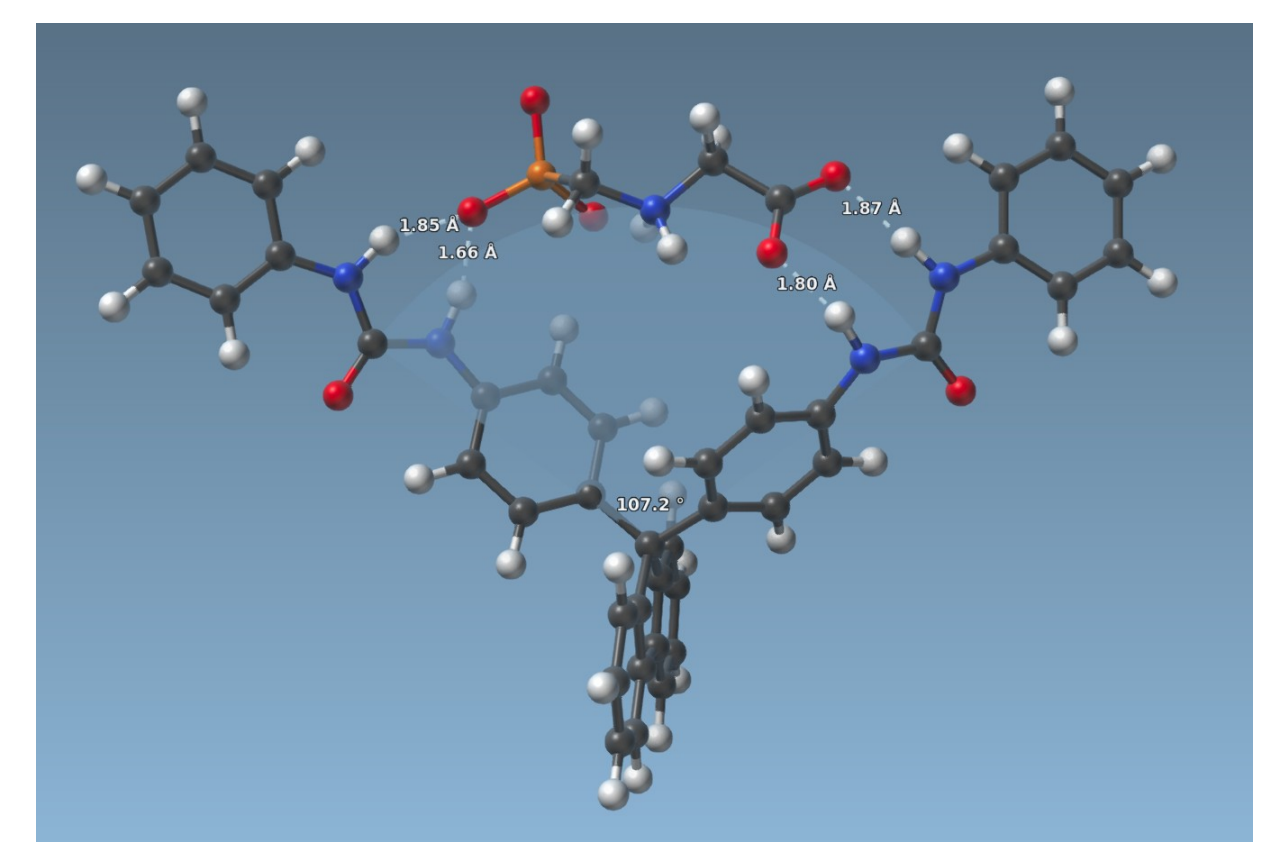


- déterminer les géométries probables → propriétés de transport à géométrie fixée.
- Choix du modèle, code et système: compromis entre *représentativité* du système modèle, *coût en calcul* et *précision/prédictivité* du modèle → système « minimal » d'intérêt.
- Réduction de modèles. Exemple: calculs quantiques → champs de force polarisables.

● Approche scientifique aux différentes échelles

- *Mésoscopique* : résistance équivalente de réseaux percolants aléatoires de nanotubes en fonction de paramètres élémentaires : **méthodes de Monte-Carlo**.
- *Microscopique* : interaction nanotube / polymères : **dynamique moléculaire**.
- *Nanoscopique* : interaction **sondes** (du polymère) – **ions** dans l'eau :

- Méthodes **DFT** (électrons) et **solvant implicite**.
- **Champs de force** polarisables (AMOEBA) et **solvant explicite**.
- Amélioration des méthodes de calcul des **multipôles locaux** (paramètres cruciaux des champs de force polarisables).
- **Métaux lourds**, systèmes à couche ouverte : développement de méthodes assurant la convergence numérique (minimisation directe) : modèle ROHF.



Calculs d'énergies libres d'interaction. Exemple : complexation d'un ion glyphosate $\text{C}_2\text{H}_6\text{NO}_5\text{P}_2^-$ (sonde urée).

● Résultats et discussion

- Indications de structure (longueur, groupements) optimale des chaînes et **sondes** polymériques.
- Construction d'une méthodologie pour prédire la sélectivité des **sondes** aux **ions dans l'eau**.
- Développement de nouvelles méthodes levant des verrous numériques (**métaux lourds** et problèmes de convergence) et méthodologiques (paramétrisation de **champs de force**, **solvant**).

● Conclusion et perspectives

- Étude du transport électronique d'un système modèle nanotube + (polymère) + ion à géométrie fixée (résumant les résultats de l'étude de l'interaction : nanotube / polymère / ion).
- Sélectivité sonde – ion transférable en termes de sélectivité capteur – ion ?