

CONTRACTS DOCTORAUX 2021

Titre du projet de thèse : Etude théorique de la chimie de l'iode pour la propulsion électrique

Directeur de thèse : André SEVERO PEREIRA GOMES (PhLAM)

Co-directeur et co-encadrants (le cas échéant) : Nicolas SISOURAT (LCPMR), HDR

Laboratoire(s) d'accueil : PhLAM/Laboratoire Chimie Physique Matière et Rayonnement (LCPMR), Sorbonne Université

Programme(s) éventuels de rattachement (CPER, Labex/Equipex, ANR, Europe, LAI, ...) : ANR EXIPEP (PI : Nicolas SISOURAT, en cours d'évaluation), LAI MESONM.

Cotutelle (O/N) : N

Tout autre information utile :

Résumé du projet de thèse (en 20 lignes maximum) :

Le développement de propulseurs électriques de faible puissance est une étape cruciale pour répondre à la demande croissante de technologie des petits satellites. Dans ce contexte, l'iode est un candidat prometteur pour remplacer les propulseurs actuellement utilisés (par exemple le xénon), pour des raisons à la fois technologiques et économiques. Cependant, la chimie de l'iode pour la propulsion électrique est peu ou mal comprise, en raison du manque de données sur les processus électroniques élémentaires se produisant au sein du propulseur. Ce projet de thèse est de fournir le premier modèle complet de la chimie de l'iode pour les conditions typiques rencontrées dans les propulseurs électriques, en utilisant une combinaison de calculs de structure électronique relativiste de pointe, de simulations de collisions atomiques et moléculaires et de modélisation de cinétique chimique. Le doctorant développera et utilisera les méthodes numériques nécessaires pour calculer les taux de réactions des réactions se produisant entre les différentes espèces atomiques et moléculaires de l'iode (I^+ , I , I_2 , I_2^+ , I_2^- , ...). Dans une deuxième étape, il implémentera ces données dans un modèle cinétique. Avec un tel code à la pointe de la technologie, il étudiera la composition d'un propulseur d'iode en conditions réelles, permettant la détermination des paramètres optimaux pour une efficacité élevée des propulseurs. Afin de calculer les taux de réactions entre les différentes espèces de l'iode, le doctorant utilisera une approche de dynamique moléculaire, i.e. Landau-Zener Surface Hopping. Cette approche a l'avantage significatif que seules les surfaces d'énergie potentielle (SEP, calculés avec le code DIRAC) adiabatiques sont nécessaires, contrairement à la plupart des méthodes standards pour lesquelles des couplages non adiabatiques sont nécessaires et des procédures de diabatisation fastidieuses doivent être appliquées.

PhD GRANTS 2021

PhD project title: Theoretical study of the chemistry of iodine for electric propulsion

PhD Supervisor: André SEVERO PEREIRA GOMES (PhLAM)

Co-supervisor(s) (if any): Nicolas SISOURAT (LCPMR), HDR

Laboratory/ies: PhLAM/Laboratoire Chimie Physique Matière et Rayonnement (LCPMR), Sorbonne Université

Research program(s) concerned (CPER, Labex/Equipex, ANR, Europe, LAI ...): ANR EXIPEP (PI : Nicolas SISOURAT, en cours d'évaluation), LAI MESONM.

Cotutelle (Y/N): N

PhD project summary (max. 20 lines):

The development of low-power electric thrusters is an important milestone for meeting the growing demand from small satellite development. In this context, iodine is a promising candidate for replacing current propulsion technologies based on Xenon, for both technical and economic reasons. The chemistry of iodine for electric propulsion is poorly understood due to a lack of data on the underlying elementary physical processes taking place within the thrusters. This thesis will address this lack of data, by providing a complete model for iodine chemistry under typical propulsor conditions, through a combination of state of the art relativistic electronic structure calculations, atomic and molecular collision simulations, and chemical kinetics simulations. The candidate will develop and apply suitable methods for calculating reaction and reaction rates for processes involving different iodine containine species (I^+ , I , I_2 , I_2^+ , I_2^- , ...). Subsequently, the candidate will employ these data for construcing the kinetic models, and from that model the physics of the propulsor under operation conditions, establishing optimal working parameters. In order to calculate the reaction rates of the different species, the candidarte will employ molecular dynamics approaches such as Landau-Zener Surface Hopping. This approach has the advantage of only requiring adiabatic potential energy surfaces (PES, to be obtained with the DIRAC code), in contrast to most other approaches which require non-adiabatic couplings and thus require complicated diabatization procedures.