

Lead institution: Instituto de Física – IFUSP (Institute of Physics) – Universidade de São Paulo Work Address of the position: Universidade de São Paulo Instituto de Física/IF		Dep. de Física dos Materiais e Mecânica/DFMT - Ed. Van de Graaff – Grupo SAMPA Rua do Matão, Travessa R, 187 – Cidade Universitária, 05508-090 São Paulo, SP - Brazil	
Supervisor name: Caetano Rodrigues Miranda		Department: IFUSP	
Co-supervisor (if any): Julio R. Meneghini		Department: EP – USP - Mechanical Engineering	
Applications: http://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/application-form-rcgi/ www.rcgi.poli.usp.br/opportunities Ref: 18PDR060		Type: Post-doctoral Period: 05/2018 - 05/2020 Number of months: 24	
Project title: (Portuguese and English) Modelagem molecular em multi-escala de nanoestruturas para processos de separação de gás natural Multiscale molecular modeling of nanostructures for natural gas separation processes			
Research theme area: (Portuguese and English) SIMULAÇÕES NUMÉRICAS DE FLUXO INTERNO EM DUTOS TRANSPORTANDO CO ₂ , CH ₄ E ÓLEO A PARTIR DE DINÂMICA MOLECULAR NUMERICAL SIMULATIONS OF INTERNAL FLOW IN DUCTS CARRYING CO ₂ , CH ₄ AND OIL EMPLOYING MOLECULAR DYNAMICS			
Abstract (Portuguese and English) A compreensão do transporte de metano e dióxido de carbono em nanoescala é de grande importância para o desenvolvimento de aplicações futuras em processos de separação de gás natural. Em particular, efeitos que envolvem a mistura desses fluidos, confinamento e efeitos termodinâmicos, entre outros, no diagrama de fase de gás natural. Nanomateriais à base de carbono são sistemas mais promissores para dispositivos de membrana em separação de metano / CO ₂ . Usando um esquema em múltiplas escalas que combina os primeiros princípios e cálculos de transporte eletrônico e dinâmica molecular, investigaremos as propriedades de transporte de CO ₂ e CH ₄ e sua mistura em nanoestruturas e membranas à base de carbono para melhor compreender os fenômenos como separação de gases, diagrama de fase e transporte e dinâmica propriedades.			
The understanding of the transport of methane and carbon dioxide at the nanoscale is of great importance for the development of future applications in natural gas separation processes. In particular, phenomena which involve their mixture, confinement and thermodynamic effects, among others on the natural gas phase diagram. Carbon based nanomaterials are the most promising channels for membranes devices on methane/CO ₂ separation. Using a multiscale scheme which combines first principles and electronic transport calculations and molecular dynamics, we will investigate the transport properties of CO ₂ and CH ₄ and their mixture in carbon based nanostructures and membranes to better understand the phenomena as gas separation, phase diagram and transport and dynamic properties.			

Description (Portuguese and English)

Os objetivos e atividades a serem desenvolvidas neste projeto vinculado aos projetos 8 e 41 do RCGI (www.usp.br/rcgi) são:

1. Determinação do diagrama de fase da mistura de metano / CO₂ por modelagem molecular
2. Simulações de gás natural nanofluidico em nanocanais de nanotubos de carbono (CNT) através de dinâmica molecular
3. Análise das propriedades estruturais, dinâmicas e topológicas do gás natural confinado em nanocanais à base de carbono
4. Determinação do Diagrama de fase por modelagem molecular dos sistemas confinados
5. Cálculos de transporte eletrônico de metano / mistura de CO₂ em CNTs
6. Simulação do transporte de gás natural em membranas à base de carbono através da dinâmica molecular (forma e confinamento)
7. Análise das propriedades estruturais, dinâmicas e topológicas das membranas à base de carbono confinado a gás natural
8. Projeto ótimo de nanoestruturas para processos de separação de gás natural

The objectives and activities to be developed in this project linked to projects 8 and 41 of the RCGI (www.usp.br/rcgi) are:

1. Determination of Methane / CO₂ mixture phase diagram by molecular modeling
2. Simulations of nanofluidic natural gas in nanochannels of carbon nanotubes (CNT) through molecular dynamics
3. Analysis of the structural, dynamics and topological properties of natural gas confined on carbon based nanochannels
4. Phase diagram by molecular modeling under confinement
5. Electronic transport calculations of Methane / CO₂ mixture on CNTs
6. Simulation of natural gas transport on carbon based membranes through molecular dynamics (shape and confinement)
7. Analysis of the structural, dynamics and topological properties of natural gas confined carbon based membranes
8. Optimal design of nanostructures for natural gas separation processes

Requirements to fill the position. (Ex: specific experience, minimum or maximum years after concluding the course) (Portuguese and English)

O candidato em potencial deve ter um doutorado em Física, Nanociência, Ciência dos Materiais, Química, Engenharias ou campos relacionados, e deve ter experiência anterior em modelagem computacional. Os candidatos ideais devem ter um bom conhecimento de cálculos dos primeiros princípios e dinâmica molecular.

INFORMAÇÕES SOBRE A BOLSA:

O candidato selecionado receberá uma bolsa de pós-doutorado FAPESP no valor de R\$ 7.174,80 (cerca de US\$ 2.200 dólares) mensalmente pagos em Reais e um fundo de contingência de pesquisa (reserva técnica), equivalente a 15% do valor anual da bolsa que deve ser gasto em itens diretamente relacionados à atividade de pesquisa, bem como o financiamento de deslocamento, se necessário e aplicável. Mais informações sobre a bolsa estão em: fapesp.br/en/postdoc.

Existe a possibilidade de oferecimento de Bolsa de Estágio de Pesquisa no Exterior (BEPE) por um período do pós-doutoramento, caso seja de interesse do projeto. Nesta situação, a seleção da instituição e o período será definido pelo coordenador do projeto, em função do propósito do estágio e das necessidades do projeto. <http://www.fapesp.br/6557>

MAIORES INFORMAÇÕES E INSCRIÇÃO EM <http://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities> REF 18PDR060 ou <http://www.rcgi.poli.usp.br/wp-content/uploads/2018/03/18PDR060.pdf>

The prospective candidate should have a PhD in Physics, Nanoscience, Materials Science, Chemistry, Engineering or related fields, and must have a strong previous track record in computational modelling. Ideal candidates should have a good knowledge of first-principles calculations and molecular Dynamics.

INFORMATION ABOUT FELLOWSHIP

The selected candidate will receive a FAPESP Post-Doctoral fellowship in the amount of R\$ 7.174,80 (about US\$ 2,200 dollars) monthly payed in Reais and a research contingency fund (technical reserve), equivalent to 15% of the annual value of the fellowship which should be spent on items directly related to the research activity, as well as displacement funding, if necessary and applicable. More information about the fellowship is at: fapesp.br/en/postdoc.

There is the possibility of offering a Research Internship abroad (BEPE) during part of the post-doctoral assignment, if it is of interest to the project. In this situation, the selection of the institution and the period will be defined by the project coordinator, depending on the purpose of the internship and the needs of the project. <http://www.fapesp.br/6557>

MORE INFORMATION AND APPLICATION AT <http://www.rcgi.poli.usp/opportunities> REF 18PDR060 or <http://www.rcgi.poli.usp.br/wp-content/uploads/2018/03/18PDR060.pdf>