

Lead Institution: Chemical Engineering, Polytechnic School, USP Work Address of the position: Avenida Prof. Lineu Prestes, 580 Cidade Universitária São Paulo, SP , Brazil	
Supervisor name: Luis Alberto Follegatti Romero	Department: Department of Chemical Engineering
Co-supervisor name: Reinaldo Camino Bazito	Department: Department of Fundamental Chemistry
Application: http://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/application-form-rcgi/ http://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/ Ref: 18PhD078	Type: Doctorate Number of months: 48
Project title: (Portuguese and English) Equilíbrio líquido-vapor e propriedades das Misturas de CO ₂ relevantes para captura, transporte e armazenamento de CO ₂ sob condições sub e supercríticas Vapor-liquid Equilibrium and properties of CO ₂ Mixtures relevant for CO ₂ capture, transport and storage under sub- and supercritical conditions	
Research theme area: (Portuguese and English) Fluidos Supercríticos / Comportamento de fases de CO ₂ / Físico Química / Termodinâmica Supercritical Fluids / CO ₂ phase behaviour / Physical Chemistry / Thermodynamics	
Abstract (Portuguese and English) O objetivo principal deste projeto está vinculado ao projeto 43 do RCGI (www.usp.br/rcgi). O conhecimento sobre propriedades termodinâmicas e comportamento de fases desempenha um papel importante no projeto e operação de muitos processos envolvidos na captura de CO ₂ , sistemas de transporte e armazenamento de dutos (CCTS). Nestas operações, podem existir condições extremas e prolongadas (-25 a 60 ° C) e pressões (até 300 bar), o que significa que o CO ₂ pode ser líquido ou supercrítico. O principal componente é o CO ₂ , freqüentemente em uma fração molar entre 95% e 99% e junto com CO ₂ , água, hidrocarbonetos e uma ampla gama de outros componentes menores chamados impurezas como N ₂ , Ar, H ₂ , O ₂ , SO ₂ , CO, CH ₄ e O H ₂ S pode estar presente na faixa de composição de várias centenas de ppm a vários por cento. Embora o CO ₂ contaminado esteja longe de ser um tópico novo, ainda existem lacunas de conhecimento nas operações de CCTS. Isso se deve em parte às lacunas nos dados experimentais disponíveis em relação às propriedades termodinâmicas e ao equilíbrio de fases das misturas de CO ₂ e, em parte, devido à falta de capacidade de modelagem ou validação do modelo. Por exemplo, para a propriedade volume, não há dados experimentais publicados para CO ₂ / O ₂ , CO ₂ / CO, CO ₂ / N ₂ O ₄ , CO ₂ / COS e CO ₂ / NH ₃ e o volume líquido de CO ₂ / H ₂ . Por outro lado, não há dados de equilíbrio líquido-vapor sobre CO ₂ / COS e poucos dados sobre a mistura binária CO ₂ / N ₂ O ₄ . Os dados experimentais disponíveis para misturas de CO ₂ multicomponentes também são escassos. Conseqüentemente, o objetivo deste projeto é obter novas propriedades termofísicas e dados de fase de equilíbrio líquido-vapor de fluidos ricos em CO ₂ a temperatura e pressão sob condições sub e supercríticas. Muitas equações de estado estão disponíveis para cálculos termodinâmicos de misturas de CO ₂ , no entanto, a precisão das equações é menor perto das pressões críticas. Assim, testaremos a equação CPA (cubic-plus-association) de estado ou SAFT para os sistemas de relevância nas operações de CCTS.	

The main goals of this project are linked to project 43 of the RCGI (www.usp.br/rcgi).

The knowledge about thermodynamic properties and phase behavior plays an important role in the design and operation of many processes involved in CO₂ capture, pipeline transportation and storage systems (CCTS). In these operations, cases extreme and extended temperatures (-25 to 60 °C) and pressures (up to 300 bar) conditions may exist, which means that CO₂ can be either liquid or supercritical. The major component is CO₂ often at a mole fraction between 95% and 99% and together with CO₂, water, hydrocarbons, and a wide range of other minor components called impurities like N₂, Ar, H₂, O₂, SO₂, CO, CH₄ and H₂S can be present at the composition range from several hundred ppm to several percent. Although contaminated CO₂ is far from a new topic, there are still knowledge gaps in CCTS operations. This is partly due to gaps in the available experimental data regarding the thermodynamic properties and phase equilibrium of CO₂ mixtures, and, partly due to lack of modelling capabilities or model validation. For example, for the volume property, there are no published experimental data for CO₂/O₂, CO₂/CO, CO₂/N₂O₄, CO₂/COS and CO₂/NH₃ and the liquid volume of CO₂/H₂. On the other hand, there are no vapor-liquid equilibrium data about CO₂/COS and few data about the CO₂/N₂O₄ binary mixture. The experimental data available for multi-component CO₂ mixtures are also scarce. Consequently, the aim of this project is to obtain new thermophysical properties and vapor-liquid equilibrium phase data of CO₂-rich fluids at temperature and pressure under sub- and supercritical conditions. Many equations of state are available for thermodynamic calculations of CO₂ mixtures, however, the accuracy of the equations are lower near the critical pressures. Thus, we will test the CPA (cubic-plus-association) equation of state or SAFT to the systems of relevance in CCTS operations.

Description (Portuguese and English)

Objetivos:

O candidato a doutorado desenvolverá um projeto de pesquisa que incluirá uma parte experimental e de modelagem:

- 1) Medições experimentais de propriedades de fase de misturas binárias de CO₂ com contaminantes (especialmente densidade, viscosidade e entalpia);
- 2) Medições experimentais e modelagem de dados de equilíbrio vapor-líquido para misturas binárias e ternárias contendo componentes menores presentes em sistemas CCTS. As misturas binária e ternária serão selecionadas tendo em conta a relevância dos componentes secundários específicos, a ausência de dados experimentais ou a existência de dados de fraca qualidade (dados experimentais que não preencham os testes termodinâmicos de consistência).

Resultados Esperados:

Os resultados esperados podem ser resumidos nos seguintes itens:

- Um banco de dados abrangente de propriedades termofísicas e um procedimento confiável correspondente, incluindo um conjunto de parâmetros termodinâmicos para modelagem.
- Um banco de dados abrangente e preciso de equilíbrio vapor-líquido (VLE) e um procedimento confiável correspondente, incluindo um conjunto de parâmetros termodinâmicos, para calcular o equilíbrio de fases em CCTS.
- Os resultados obtidos no presente projeto serão divulgados à comunidade através da apresentação de trabalhos em diversas reuniões científicas, divulgando-os em periódicos que abordam os temas relacionados à engenharia de processos, equilíbrio de fases e propriedades físico-químicas.

Cronograma:

Atividades do Projeto: 1) Coleta de dados experimentais da literatura; 2) medidas de propriedades termofísicas; 3) medição e modelagem de AVA para compostos menores em CO₂ relacionados ao processo de captura, transporte e armazenamento.

Atividades	2018	2019	2020
1			
2			
3			

Objectives:

The doctorate candidate will develop a research project that will include an experimental and modelling part:

- 3) Experimental measurements of phase properties of binary mixtures of CO₂ with contaminants (especially density, viscosity and enthalpy);
- 4) Experimental measurements and modelling of vapor-liquid equilibrium data for binary and ternary mixtures containing minor components present in CCTS systems. The binary and ternary mixtures will be selected taking into account the relevance of the specific minor components, the absence of experimental data or the existence of poor quality data (experimental data that does not fulfill the thermodynamic tests of consistence).

Expected Results:

The expected results can be summarized in the following items:

- A comprehensive data bank of thermophysical properties and a corresponding reliable procedure, including set of thermodynamic parameters for modeling.
- A comprehensive and precise data bank of vapor-liquid equilibrium (VLE) and a corresponding reliable procedure, including a set of thermodynamic parameters, for calculating phase equilibrium in CCTS.
- The results obtained in the present project will be disseminated to the community by presenting papers in several scientific meetings, publishing them in journals covering the topics related to process engineering, phase equilibrium and physical-chemical properties.

Timetable:

Project Activities: 1) Collecting experimental data from literature; 2) Thermophysical properties measurements; 3) VLE measurement and modeling for minor compounds in CO₂ related with the capture, transportation and storage process.

Activities	2018	2019	2020
1			
2			
3			

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

O candidato a DOUTORADO deve possuir graduação e/ou mestrado em Química ou Engenharia Química (ou área similar) e interesse ou experiência prévia em pesquisa científica nessas áreas.

O candidato selecionado receberá bolsa de R\$ 2.784,60 (primeiro ano) e R\$ 3.446,40 (2º, 3º e 4º ano) reais mensais concedida pela FUSP - Fundação de Apoio a Universidade de São Paulo.

The DOCTORATE candidate must have a bachelor's and/or a master degree in Chemistry or Chemical Engineering (or similar area) and interest or previous experience with scientific research in those areas.

The selected candidate will receive a scholarship of R\$ 2.784,60 (first year) and R\$ 3.446,40 (2nd , 3rd and 4th year) reais monthly granted by FUSP - Foundation of Support to the University of São Paulo.