

Lead institution: Imperial College London	
Supervisor name: Erich A. Müller	Supervisor department: Chemical Engineering
Co-supervisor: Prof. Caetano R. Miranda / Prof. Julio Meneghini	Co-supervisor department: University of São Paulo
Recipient: https://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/ https://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/application-form-rcgi/ Ref: 19PhD-IC-3	Type: Full PhD in Imperial College London PhD-IC 3
Project title: Adsorption and transport of CO ₂ in nanoporous solids Adsorção e transporte de CO ₂ em sólidos nanoporosos	
Research theme area: Adsorption and transport of CO ₂ in nanoporous solids Adsorção e transporte de CO ₂ em sólidos nanoporosos	
ESTA OPORTUNIDADE É APENAS PARA CANDIDATOS BRASILEIROS ou estrangeiros com residência permanente no Brasil para uma bolsa CNPq / Shell de Doutorado no Imperial College de Londres.	
This opportunity is exclusive for BRAZILIAN candidates or foreigners with permanent address in Brazil for a PhD scholarship in the Imperial College in London.	
Introduction Despite the importance of predicting flows through disordered media (i.e. in oil and gas reservoirs, in membranes for fluid separation, in the transport of drugs through biomembranes), there are very few studies available in the literature, which combine multi-scale tools capable of bridging the nano- and the macro-scales. It has been shown that nano-flows through disordered media exhibit transport properties deviating from their continuum analogs. Here we will investigate this in more detail and advance the field substantially by employing cutting-edge non-equilibrium molecular dynamics simulations of nano-scale flows to furnish relevant transport properties (e.g. permeabilities, diffusion coefficient, solubility, etc) of CO ₂ in nano-confinement.	
Apesar da importância de prever fluxos através de meios desordenados (isto é, em reservatórios de óleo e gás, em membranas para separação de fluidos, no transporte de drogas através de biomembranas), existem poucos estudos disponíveis na literatura, que combinam ferramentas multi-escala capazes de conectar nano e macro escalas. Foi demonstrado que os nano-fluxos através de meios desordenados exibem propriedades de transporte que se desviam de seus análogos contínuos. Aqui iremos investigar isto em mais detalhe e avançar substancialmente o campo empregando técnicas avançadas. de simulações de dinâmica molecular em condições de não equilíbrio para escoamentos em nanoescala com o intuito de fornecer propriedades de transporte relevantes (por exemplo permeabilidades, coeficiente de difusão, solubilidade etc) de CO ₂ em nano-confinamento.	

Objectives

The long-term objective of the research is to obtain an understanding of the fundamental physics behind the adsorption and transport processes at the micro- and nanoscale with the aid of well-guided computer simulations. A coarse-grained molecular simulation approach is expected to allow the researchers to cover mixture complexities, system sizes, time and length scales inaccessible with any other experimental or modelling technique, filling a current gap in knowledge. The project will aim at exploring the relationships between the properties of the porous media (pore size distribution, shape and rugosity of nanopores, connectivity, chemical composition of the surfaces, heterogeneities, etc) on the local and macroscopically averaged adsorption and flow properties. These in-silico calculations are accurate enough to be used as guidelines for the reverse-engineering of membranes and porous media (membranes and/or adsorption beds) for fluid phase separation and purification.

O objetivo a longo prazo da pesquisa é obter uma compreensão da física fundamental por trás dos processos de adsorção e transporte na micro e nanoescala, com o auxílio de simulações computacionais bem guiadas. Espera-se que uma abordagem de simulação molecular de granulação grossa permita aos pesquisadores cobrir complexidades de mistura, tamanhos de sistema, escalas de tempo e comprimento inacessíveis com qualquer outra técnica experimental ou de modelagem, preenchendo uma lacuna atual no conhecimento. O projeto terá como objetivo explorar as relações entre as propriedades dos meios porosos (distribuição do tamanho dos poros, forma e rugosidade dos nanoporos, conectividade, composição química das superfícies, heterogeneidades, etc.) nas propriedades de adsorção e fluxo locais e macroscópicos. Esses cálculos in-silico são precisos o suficiente para serem usados como diretrizes para a engenharia reversa de membranas e meios porosos (membranas e / ou leitos de adsorção) para separação e purificação de fase fluida.

Methodology

It is proposed to perform large-scale coarse-grained molecular dynamics simulations of CO₂ (and mixtures) permeating through model confined regions. Non-equilibrium techniques similar to those used to study flow of mixtures through porous media, previously documented in the literature [1,2] will be employed which allow direct evaluation of adsorption, diffusion and permeability. The geometry and the chemical composition of surface of the pores will be systematically modified to gain an understanding of the effects of these variables on the permeability and selectivity of the porous networks. We will employ coarse-grained models which allow for the implementation of very large system sizes and the exploration of large time scales which in turn will provide unique information on both the equilibrium and dynamical properties of CO₂ transport in nanoconfinement. Coarse graining is a term that refers to the use of simplified molecular models, where the atomistic detail is removed and substituted by the description of molecules in terms of “super-atoms” which represent, typically, a small number of heavy atoms. For example, in a standard CG representation, a CO₂ molecule could be modelled as an isotropic spherical bead where all the electronic details, the intramolecular vibrations, bond bending and molecular topology are incorporated within a point pair-wise interaction model [3].

Propõe-se realizar simulações de dinâmica molecular de granulação grossa em larga escala de CO₂ (e misturas) permeando através de regiões confinadas de modelo. Técnicas de não-equilíbrio semelhantes às utilizadas para estudar o fluxo de misturas através de meios porosos, previamente documentadas na literatura [1,2], serão empregadas permitindo a avaliação direta da adsorção, difusão e permeabilidade. A geometria e a composição química da superfície dos poros serão sistematicamente modificadas para compreender os efeitos dessas variáveis na permeabilidade e seletividade das redes porosas. Empregamos modelos de granulação grossa que permitem a implementação de sistemas de tamanhos muito grandes e a exploração de grandes escalas de tempo que, por sua vez, fornecerão informações exclusivas sobre as propriedades de equilíbrio e dinâmica do transporte de CO₂ na nanoconfinição. Graining grosseiro é um termo que se refere ao uso de modelos moleculares simplificados, onde o detalhe atômico é removido e substituído pela descrição de moléculas em termos de "super-átomos", que representam, tipicamente, um pequeno número de átomos pesados. Por exemplo, em uma representação padrão em CG, uma molécula de CO₂ poderia ser modelada como uma esfera esférica isotrópica onde todos os detalhes eletrônicos, as vibrações intramoleculares, flexão de ligações e topologia molecular são incorporadas em um modelo de interação de pares de pontos [3].

References

- [1] H. Frentrup, et al., "Transport diffusivities of fluids in nanopores by non-equilibrium molecular dynamics simulation", *Mol. Simul.*, 38, 540–553 (2012)
- [2] H. Frentrup, K. Hart, C. Colina, and E. Muller, "In Silico Determination of Gas Permeabilities by Non-Equilibrium Molecular Dynamics: CO₂ and He through PIM-1," *Membranes*, 5, 99–119, (2015).
- [3] C. Avendaño, T. Lafitte, A. Galindo, C. S. Adjiman, G. Jackson, and E. A. Müller, "SAFT-γ Force Field for the Simulation of Molecular Fluids. 1. A Single-Site Coarse Grained Model of Carbon Dioxide," *J. Phys. Chem. B*, 115, 11154–11169, (2011).

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

This project would be suitable **ONLY FOR BRAZILIAN CANDIDATES** or **foreigners with permanent address in Brazil**, highly motivated to work in research employing computational simulations. Candidates must have an undergraduate /master's degree in Mechanical, Chemical, Petroleum Engineering, Chemistry or Physics. Required programming / scripting skills and experience with simulation software, as well as excellent communication skills.

Minimum grade for PhD Brazilian applicants in Imperial College is 7.5 out of 10 and a minimum 6,5 IELTS score.

Este projeto é adequado **APENAS PARA CANDIDATO BRASILEIRO** ou **estrangeiros com residência permanente no Brasil** que seja altamente motivado para atuar em pesquisa

envolvendo simulações computacionais. Os candidatos devem ter graduação / mestrado em Engenharia Mecânica, Química, Petróleo, ou formação em Física ou Química). São necessárias habilidades de programação/script e experiência com softwares de simulação, além de excelentes habilidades de comunicação.

Nota mínima para candidatos brasileiros aplicarem para o PhD no Imperial College é 7,5 de 10 e nota mínima no IELTS 6,5.

Information about the SCHOLARSHIP / enrolment

O candidato selecionado receberá o patrocínio integral dos valores de “*tuition*” para realização do doutorado no Imperial College e uma bolsa concedida pelo CNPq.

Preencher a ficha de inscrição no link

<http://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/application-form-rcgi/> (REF 19PhD-IC 3) e enviar CV em inglês + histórico escolar do mestrado e graduação, incluindo seu ranking na classe/curso para o e-mail rcgi.opportunities@usp.br, até 20/02/2019.

The selected candidate will be covered for full tuition and a scholarship from CNPq.

To enrol for this opportunity, fill in the form

<http://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/application-form-rcgi/> (REF 19PhD-IC 3) and send your CV + record transcript of your master’s and undergraduate courses, including your ranking in the course to the e-mail rcgi.opportunities@usp.br up to the 20/02/2019.