

Lead institution: Imperial College London	
Supervisor name: Dr. Ronny Pini	Supervisor department: Department of Chemical Engineering
Co-supervisor: Prof. Dr. Caetano Miranda (University of São Paulo)	Co-supervisor department: Institute of Physics
Recipient: https://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/ https://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/application-form-rcgi/ Ref: 19PhD-IC-5	Type: Full PhD in Imperial College PhD-IC 5 Deadline: 24/02/2019
Project title: CO ₂ capture from natural gas: experimental co-adsorption studies and molecular simulations Captura de CO ₂ a partir do gás natural: estudos experimentais de co-adsorção e simulações moleculares	
Research theme area: Solid sorbents for CO ₂ capture; industrial CCS Absorventes sólidos para captura de CO ₂ ; CCS industrial	
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 Greenhouse gas management is at the heart of most of current grand challenges affecting both individuals and society. However, no level of research effort will yield fruitful results if the fundamental data and tools to make the appropriate judgements are not readily available. Attempts to evaluate CO ₂ capture technologies are based on the development, synthesis and improvement of advanced materials that best fit the needs of adsorption-based separations ^[1] . This effort must rely on high performance measurement and modelling of the relevant mixtures at the industrially relevant conditions. There is a particular need for experimental data on both equilibrium and kinetic aspects of multicomponent adsorption involving CO ₂ , which are to be used for the calibration of novel theoretical/computational approaches ^[2] . A gestão de gases de efeito estufa maioria é um dos principais desafios que afetam tanto os indivíduos quanto a sociedade. No entanto, nenhum nível de esforço de pesquisa produzirá resultados frutíferos se os dados e ferramentas fundamentais para fazer os julgamentos apropriados não estiverem prontamente disponíveis. As tentativas de avaliar as tecnologias de captura de CO ₂ baseiam-se no desenvolvimento, síntese e melhoria de materiais avançados que melhor se adequam às necessidades de separações baseadas em adsorção [1]. Este esforço deve basear-se em medições acuradas e na modelagem das misturas nas condições de operação relevantes. Há uma necessidade particular de dados experimentais sobre os aspectos de equilíbrio e cinética da adsorção multicomponente envolvendo CO ₂ , que devem ser usados para a calibração de novas abordagens teóricas / computacionais [2].	
Objectives This project is centred on developing a set of reference experimental data sets on industrial adsorbents of unary and binary adsorption equilibrium and kinetics over wide ranges of pressure and temperature to be used as the fundamental building blocks of any work to be done in the area of industrial CCS. In particular, we will we focus on the separation of CO ₂ from natural gas at elevated pressures, a technology that holds great promise for reducing CO ₂ emissions from	

industrial operations.

Este projeto está centrado no desenvolvimento de um conjunto de conjuntos de dados experimentais de referência em adsorventes industriais de equilíbrio e cinética de adsorção unária e binária em amplas faixas de pressão e temperatura para serem utilizados como referência para qualquer trabalho a ser realizado em captura e sequestro de carbono em escala industrial. Em particular, nos concentraremos na separação do CO₂ do gás natural a pressões elevadas, uma tecnologia que promete reduzir as emissões de CO₂ das operações industriais.

Methodology

A systematic experimental and modelling investigation will be undertaken by selecting emerging adsorbent materials with distinct characteristics, thus including both rigid and flexible microporous MOFs and mesoporous silica (with or without carbon-coating or amine-functionalization). These adsorbent materials will be evaluated in terms of both the kinetic and equilibrium adsorption selectivity. Experiments will be conducted using complementary techniques available in the laboratories of the PIs that enable covering the relevant P,T parameter space. The experimental work will be complemented with in silico pseudo-experimental data, obtained from molecular simulations calibrated against the experimental data. Knowledge developed by this synergy will help develop new concepts for materials tailored at exploiting differences at the molecular level. Results from the experiments and modelling work will also be used to propose engineering-quality models based on classic theories of adsorption (e.g. IAST and RAST) over a wide range of conditions which are more suited for integration in a process simulator.

Uma investigação sistemática experimental e de modelagem será realizada pela seleção de materiais adsorventes emergentes com características distintas, incluindo MOFs microporosos rígidos e flexíveis e sílica mesoporosa (com ou sem revestimento de carbono ou funcionalização de amina). Estes materiais adsorventes serão avaliados em termos de seletividade cinética e de adsorção de equilíbrio. Os experimentos serão conduzidos utilizando técnicas complementares disponíveis nos laboratórios dos PIs que permitem cobrir o espaço relevante do parâmetro P, T . O trabalho experimental será complementado com dados sob condições controladas in silico, obtidos a partir de simulações moleculares calibradas com os dados experimentais. O conhecimento desenvolvido por essa sinergia ajudará a desenvolver novos conceitos para materiais ajustando e explorando suas propriedades a nível molecular. Os resultados dos experimentos e de modelagem também serão usados para propor modelos de qualidade de engenharia baseados em teorias clássicas de adsorção (por exemplo, IAST e RAST) em uma ampla gama de condições que são mais adequadas para integração em simuladores de processos.

References

[1] Scholl DS and RP Lively. *Nature* (2016) 532, 435-7

[2] D’Alessandro D, B Smit and JR Long. *Angew Chem Int Ed* (2010) 49, 6058–82

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

Este projeto é adequado **APENAS PARA CANDIDATO BRASILEIRO ou estrangeiros com residência permanente no Brasil** que seja altamente motivado para atuar combinando atividades experimentais e de modelagem, produtivo e que trabalhe bem em equipe. Os candidatos devem ter graduação e/ou mestrado em Engenharias, Física, Ciência dos Materiais, Química, ou áreas afins. . Experiência prévia com pacotes computacionais (Por exemplo, Matlab, Labview) é um diferencial, 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 minima no IELTS 6,5.

This project would be suitable **ONLY FOR BRAZILIAN CANDIDATES or foreigners with permanent address in Brazil**, highly motivated to undertake both experimental and modelling activities, and to work as part of a team. Candidates must have an undergraduate and/or master's degree in Chemical Engineering or in a science/engineering subject appropriate for conducting the research described above. Preference will be given to candidates with programming experience using simulation software and/or numerical toolboxes (e.g. Matlab, Labview). Excellent communication skills required.

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

Information about the SCHOLARSHIP

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

Inscrição em <http://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/application-form-rcgi/> (REF 19PhD-IC 5) preferencialmente até 24/02/2019.

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

Enrollment at <http://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/application-form-rcgi/> (REF 19PhD-IC 5) preferably up to the 24/02/2019.