

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: 19PDR114		Type: Post-doctoral Period: up to 11/2020 Can be renewed for another 1 year	
Project title: (Portuguese and English) Modelagem molecular em multi-escala de nanoestruturas para processos de separação do 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 e confinamento desses fluidos e sua interação com superfícies em membranas. Dentro dessa perspectiva, devido a suas propriedades singulares, nanomateriais tem um potencial promissor para melhorar a eficiência de membranas para separação de metano / CO ₂ . A partir da combinação de cálculos e primeiros princípios e dinâmica molecular, investigaremos as interações do CO ₂ e CH ₄ e sua mistura em nanoestruturas e superfícies para adsorção, seletividade e separação de gases. 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, effects involving the mixing and confinement of these fluids and their interaction with membrane surfaces. From this perspective, because of their unique properties, nanomaterials have promising potential to improve the efficiency of membranes towards methane / CO ₂ separation. From the combination of calculations and first principles and molecular dynamics, we will investigate the interactions of CO ₂ and CH ₄ and their mixture in nanostructures and surfaces for adsorption, selectivity and gas separation.			
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: <ol style="list-style-type: none"> 1. Cálculos de primeiros princípios envolvendo CO₂ e CH₄ em superfícies de interesse 2. Validação e criação de potenciais interatômicos entre as moléculas e sistemas alvo. 3. Simulação do transporte de gás natural em membranas e sistemas nanoestruturados através da dinâmica molecular (forma e confinamento) 4. Análise das propriedades estruturais, dinâmicas e transporte do gás natural confinado nas membranas 5. Projeto ótimo de sistemas 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. First principles calculations involving CO₂ and CH₄ on surfaces of interest
2. Validation and creation of interatomic potentials between target molecules and systems.
3. Simulation of natural gas transport in nanostructured membranes and systems through molecular dynamics (shape and confinement)
4. Analysis of the structural, dynamic and transport properties of membrane-confined natural gas
5. Optimal design of systems 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(a) candidato(a) 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\$ 7.373,10 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 19PDR114 ou

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\$ 7.373,10 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 19PDR114