

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: 19PDR115	Type: Post-doctoral Period: up to 11/2020 Can be renewed for another 1 year
Project title: (Portuguese and English) Design computacional de nanomateriais para Separação do Gás Natural Computational Design of Natural Gas Separation Nanomaterials	
Research theme area: (Portuguese and English) Estudo do fluxo interno em nanocanais transportando CO ₂ , CH ₄ e sua mistura a partir de modelagem molecular Study of internal flow in nanochannels transporting CO ₂ , CH ₄ and their mixture from molecular modeling	
Abstract (Portuguese and English) A alta concentração de dióxido de carbono no gás natural é atualmente um desafio na indústria petrolífera. Diversos dispositivos de separação tem sido desenvolvidos para isolar o metano dos demais componentes, incluindo a tecnologia de membranas. Um desafio é desenvolver membranas de filtração eficientes exibindo alta seletividade e permeabilidade com a finalidade de isolar o metano do gás natural. A compreensão dos fenômenos envolvidos no transporte do metano (CH ₄) e do dióxido de carbono (CO ₂) na nanoescala é fundamental para o desenvolvimento de futuras membranas para aplicações em processos de separação do gás natural. Em particular, efeitos que envolvem a mistura desses fluidos, o confinamento espacial, efeitos termodinâmicos, entre outros, influenciando o diagrama de fases. Nesse contexto, nanomateriais à base de carbono são sistemas promissores para o desenvolvimento de membranas eficientes destinadas à separação CH ₄ /CO ₂ . Usando um esquema de múltiplas escalas que combina cálculos de primeiros princípios com simulações de dinâmica molecular, queremos investigar as propriedades de transporte do CO ₂ , CH ₄ , e sua mistura em nanoestruturas à base de carbono para melhor compreender o processo de separação de gases, bem como efeitos de confinamento no diagrama de fases do gas natural, e as suas propriedades dinâmicas e transporte.	

The high concentration of carbon dioxide in natural gas is currently a challenge in the oil industry. Several separation devices have been developed to isolate methane from other components, including the membrane technology. A challenge is to develop efficient filtering membranes exhibiting high selectivity and permeability to isolate methane from natural gas. The understanding of the phenomena involved in the transport of methane (CH₄) and carbon dioxide (CO₂) at the nanoscale is essential for the development of the future membranes for natural gas separation processes. In particular, the effects involving the mixture of these fluids, the spatial confinement, thermodynamic effects, among others, influencing the phase diagram. In this context, carbon-based nanomaterials are promising systems for the development of efficient CH₄/CO₂ separation membranes. Using a multi-scale scheme that combines first-principle calculations with molecular dynamics simulations, we will investigate the transport properties of CO₂, CH₄, and their mixture in carbon-based nanostructures to better understand the gas separation process, as well as, their effects on the natural gas phase diagram, and their dynamical and transport 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 das propriedades da fase *bulk* da mistura CH₄/CO₂ considerando concentrações típicas do gás natural. Determinar através de simulações de dinâmica molecular a viscosidade, difusão e densidade em diferentes condições de temperaturas e pressões;
2. Determinação das propriedades do gás natural confinado em nanotubos de carbono de diferentes diâmetros e comparação com as fases *bulk*. Investigar as propriedades estruturais, dinâmicas e transporte do gás natural nesses nanocanais através de simulações de dinâmica molecular;
3. Cálculo da seletividade dos nanotubos de carbono para um determinado componente e otimização das 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 CH₄ / CO₂ mixture bulk phase properties considering typical natural gas concentrations. Perform molecular dynamics simulations to determine: viscosity, diffusion and density under different temperature and pressure conditions;
2. Systematic study of the physical-chemical properties of natural gas confined within carbon nanotubes of different diameters and comparison with bulk phases counterpart. Determine the structural, dynamical and transport properties of natural gas within nanochannels by using molecular dynamics simulations;
3. Calculation of carbon nanotube selectivity for a given component and optimization 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\$ 7.373,10 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 19PDR115

The prospective candidate should have a PhD in Physics, Nanoscience, Materials Science, Chemistry, Engineering or related of 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 19PDR115