

Statistical field theory to study supercritical CO₂ under confinement

Contact : Dr. Antoine Carof, Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques, UMR 7019
54 000 Nancy, France (antoine.carof@univ-lorraine.fr)

Keyword : Statistical physics, physical chemistry, molecular dynamics, supercritical fluid, confinement

Description of the project :

Our research project aims to understand the thermodynamic and structural properties of the supercritical CO₂ (scCO₂) in a complex environment. scCO₂ is indeed a common fluid in different technologies, in particular for the development towards more environmentally friendly industrial processes. For example, industrial CO₂ emission could be captured directly at the industrial sites and stored in geological reservoirs.[1] To assess the validity of this strategy, we need to elucidate the structure and the thermodynamics of the scCO₂ within these multiscale reservoirs. In our group, we are developing new theoretical and simulation tools to study the properties of scCO₂ in such a complex environment.

On the fundamental side, the recent developments in the classical density functional theory (cDFT) allows its extension to molecular [2] and supercritical fluids,[3] such as scCO₂. cDFT is a powerful statistical field theory based on the molecular density, which gives (theoretically) the same results as molecular dynamics simulations, but at a cost at least 10,000 times smaller.[4] We propose here to implement this strategy to evaluate the properties of scCO₂ in confinement with different size, shape and interfacial properties. The results will be compared with molecular dynamics simulations, to assess the success of the cDFT.

During the internship, the master student will acquire or improve their skills in term of: programming, statistical physics, molecular simulations, bibliographic research. **This internship will be followed by an ANR-funded PhD**, which will extend this project, in the theoretical/numerical aspects.

Applicant's profile: Master 2 student or equivalent in chemistry, materials science or physics and be interested in doing theoretical work. Autonomous and thorough.

Work context: The internship will take in place at the LPCT. The LPCT studies cover a wide range of topics, from the equilibrium and non-equilibrium dynamics of complex systems - a major issue in contemporary physics and chemistry The LPCT is an equal opportunity laboratory with a working environment actively promoting equality, diversity, and inclusion.

How to apply: send an e-mail to Antoine Carof (antoine.carof@univ-lorraine.fr)

[1] International Energy Agency. CO₂ Storage Resources and Their Development; Paris, 2022. <https://www.iea.org/reports/co2-storage-resources-and-their-development>

[2] Ding, L.; Levesque, M.; Borgis, D.; Belloni, L. Efficient Molecular Density Functional Theory Using Generalized Spherical Harmonics Expansions. J. Chem. Phys. 2017, 147 (9), 094107. <https://doi.org/10.1063/1.4994281>

[3] Mohamed Houssein, M.; Belloni, L.; Borgis, D.; Ingrassio, F.; Carof, A. Molecular Integral Equations Theory in the near Critical Region of CO₂. arXiv March 13, 2024. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2310.14667>

[4] Evans, R.; Oettel, M.; Roth, R.; Kahl, G. New Developments in Classical Density Functional Theory. J. Phys.: Condens. Matter 2016, 28 (24), 240401. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/28/24/240401>

Théorie statistique des champs pour étudier le CO₂ supercritique sous confinement

Contact : Antoine Carof, Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques, UMR 7019
54 000 Nancy, France (antoine.carof@univ-lorraine.fr)

Mots clés : Physique statistique, chimie physique, dynamique moléculaire, fluide supercritique, confinement

Description du projet :

Notre projet de recherche vise à comprendre les propriétés thermodynamiques et structurales du CO₂ supercritique (scCO₂) dans un environnement complexe. Le scCO₂ est en effet un fluide présent dans différentes technologies, notamment pour le développement de procédés industriels plus respectueux de l'environnement. Par exemple, les émissions industrielles de CO₂ pourraient être capturées directement sur les sites industriels et stockées dans des réservoirs géologiques[1]. Pour évaluer la validité de cette stratégie, nous devons élucider la structure et la thermodynamique du scCO₂ dans ces réservoirs multi-échelles. Dans notre groupe, nous développons de nouveaux outils théoriques et de simulation pour étudier les propriétés du scCO₂ dans un environnement complexe.

Sur le plan fondamental, les développements récents de la théorie classique de la fonctionnelle de la densité (cDFT) permettent son extension aux fluides moléculaires [2] et supercritiques,[3] tels que le scCO₂. La cDFT est une puissante théorie statistique des champs basée sur la densité moléculaire, qui donne (théoriquement) les mêmes résultats que les simulations de dynamique moléculaire, mais à un coût au moins 10 000 fois inférieur[4]. Nous proposons ici de mettre en œuvre cette stratégie pour évaluer les propriétés du scCO₂ en confinement avec différentes tailles, formes et propriétés interfaciales. Les résultats seront comparés à des simulations de dynamique moléculaire, afin d'évaluer le succès de la cDFT.

Pendant le stage, l'étudiant acquerra ou améliorera ses compétences en termes de : programmation, physique statistique, simulations moléculaires, recherche bibliographique. **Ce stage sera suivi d'une thèse financée par l'ANR**, qui prolongera ce projet, en particulier dans les aspects théoriques/numériques.

Profil du candidat : Etudiant en Master 2 ou équivalent en chimie, science des matériaux ou physique. Être intéressé par un travail théorique. Autonome et rigoureux.

Contexte de travail : Le stage se déroulera au LPCT. Les études du LPCT couvrent un large éventail de sujets, de la dynamique à l'équilibre et hors équilibre des systèmes complexes - un enjeu majeur de la physique et de la chimie contemporaines. Le LPCT est un laboratoire d'égalité des chances avec un environnement de travail promouvant activement l'égalité, la diversité et l'inclusion.

Comment candidater : envoyer un e-mail à Antoine Carof (antoine.carof@univ-lorraine.fr)

[1] International Energy Agency. CO₂ Storage Resources and Their Development; Paris, 2022. <https://www.iea.org/reports/co2-storage-resources-and-their-development>

[2] Ding, L.; Levesque, M.; Borgis, D.; Belloni, L. Efficient Molecular Density Functional Theory Using Generalized Spherical Harmonics Expansions. J. Chem. Phys. 2017, 147 (9), 094107. <https://doi.org/10.1063/1.4994281>

[3] Mohamed Houssein, M.; Belloni, L.; Borgis, D.; Ingrassio, F.; Carof, A. Molecular Integral Equations Theory in the near Critical Region of CO₂. arXiv March 13, 2024. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2310.14667>

[4] Evans, R.; Oettel, M.; Roth, R.; Kahl, G. New Developments in Classical Density Functional Theory. J. Phys.: Condens. Matter 2016, 28 (24), 240401. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/28/24/240401>