

Lead institution: Escola Politecnica	
Supervisor name: Profs Julio Meneghini and Thiago Lopes and Caetano Miranda	Department: PNV-PME, Poli USP
Recipient: https://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/ Ref: 23PDR230 - Post Doctoral Fellowship Deadline for submission: November 05th, 2023	Type: Post-doctoral Period: (hours/week) 40/week Number of months: 24 initial with possibility of extension Intended beginning date: November/2023 (Flexible)
Project title: (Portuguese and English) <i>Oportunidade de Pós-Doutorado em Triagem de Materiais e Cálculos de Primeiros Princípios para Catálise Heterogênea e Células de Combustível para Produção de Hidrogênio</i> <i>Post-Doctoral Opportunity in Materials Screening and First-principles Calculations for Heterogeneous Catalysis and Fuel Cells to Produce hydrogen</i>	
Research theme area: (Portuguese and English) Células de Combustível, Reforma de Etanol, Produção de Hidrogênio, Aprendizado de Máquina, Teoria Funcional da Densidade Fuel Cells, Ethanol Reforming, Hydrogen Production, Machine Learning, Density Functional Theory	
Abstract (Portuguese and English) O candidato irá colaborar com os pesquisadores do projeto 83 do FAPESP-Shell Centro de Pesquisa para a Inovação de Gases de Efeito Estufa da POLI-USP na Universidade de São Paulo. Resumo do programa e os projetos podem ser encontrados no site da RCGI (http://www.rcgi.poli.USP.br/). O(A) candidato(a) selecionado(a) combinará aprendizado de máquina e cálculos de primeiros princípios para investigar materiais para catálise heterogênea e descrever de reações de catálise eletroquímica, com foco específico na reforma a vapor do etanol para produzir hidrogênio seletivamente. Esta posição oferece uma oportunidade única para empregar ambas as metodologias e contribuir para avanços significativos em células de combustível de óxido sólido e no desenvolvimento de tecnologias energéticas de próxima geração. Esta vaga também trás a possibilidade de o pós-doutorando desenvolver um período de pesquisa no Imperial College London. The candidate will collaborate with researchers from the project 83 of the FAPESP-Shell Research Centre for Greenhouse Gas Innovation of POLI-USP at the University of São Paulo. Summary of the program and projects can be found at the RCGI website (http://www.rcgi.poli.usp.br/). A successful candidate will combine machine learning and first-principles calculations to investigate materials for heterogeneous catalysis and electrochemical catalysis reactions, specifically focusing on the steam reforming of ethanol to produce hydrogen selectively. This	

position offers a unique opportunity to employ both methodologies to contribute to cutting-edge advancements in solid oxide fuel cells and the development of next-generation energy technologies. This position allows the candidate to apply for and develop an internship research period at Imperial College London.

Description (Portuguese and English)

O candidato contribuirá alinhado aos principais objetivos do projeto:

1. Utilizar técnicas computacionais avançadas e algoritmos de aprendizado de máquina para identificar e avaliar materiais adequados para células de combustível de óxido sólido de etanol direto, com foco em catalisadores para a reforma a vapor do etanol.
2. Realizar simulações de Teoria Funcional da Densidade para obter insights sobre os mecanismos catalíticos em níveis atômicos e moleculares.
3. Colaborar de perto com uma equipe multidisciplinar de pesquisadores para integrar suas descobertas no desenvolvimento de células de combustível de óxido sólido que funcionam com etanol.

The applicant will contribute in line with the main objectives of the project:

1. Employ advanced computational techniques and machine learning algorithms to identify and assess materials suitable for the catalysis in direct ethanol solid oxide fuel cells, focused on the steam reforming of ethanol.
2. Conduct First Principles calculations to investigate and describe the mechanisms of catalysed reactions, including steam reforming of ethanol.
3. Collaborate closely with a multidisciplinary team of researchers to integrate your findings into developing solid oxide fuel cells running on ethanol.

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

Este projeto é adequado para um candidato altamente motivado e requer habilidades em linguagens de programação, experiência em aprendizado de máquina e DFT e proficiência em inglês são necessárias.

- O candidato deve ser doutor em Física, Química, Computação, Ciência dos Materiais ou Engenharia.

This project would be well-suited to a highly motivated candidate requiring Programming skills, experience in machine learning and DFT and proficiency in English are required.

- The postdoc candidate should hold a PhD in Physics, Chemistry, Computation, Materials Science or Engineering.

Funding Notes: This Postdoc scholarship is funded by FAPESP. The scholarship will cover a standard maintenance stipend of R\$ 9,047.40 per month.

Work place: PNV-PME, Poli USP / Avenida Prof. Luciano Gualberto, Travessa do Politécnico – número 380, CEP – 05508-010 – São Paulo – SP



Documents/Information to be Sent:

Ref: 23PDR230

- 1) Fill-in the application form:

<https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSfV4KkheEQeMJKiDnkVkOQiDm5pvKU28bFJR5uNhYpJgU0Dhw/viewform>

Deadline: November 5th, 2023

In case you have any question, please write to rcgi.opportunities@usp.br