

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: 23PDR232 Deadline for submission: October 20 th , 202	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>Oportunidades de Pós-Doutorado em Células a Combustível: Descrição de Reações Catalisadas por Modelagem DFT e Atomística</i> <i>Post-doctoral opportunity in Fuel Cells: Description of Catalysed Reactions through DFT and Atomistic Modelling</i>	
Research theme area: (Portuguese and English) Células de Combustível, Etanol, Eletrólitos, Condução de Íons, Propriedades Físicas, Física de materiais e Modelagem Atomística Fuel Cells, Ethanol, Electrolytes, Ion Conduction, Physical Properties, Materials Physics, and Atomistic Modeling	
Abstract (Portuguese and English) O candidato irá colaborar com os pesquisadores do projeto 87 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) irá investigar e descrever as reações heterogêneas e eletroquimicamente catalisadas nas células de combustível de óxido sólido (SOFCs) utilizando a Teoria Funcional da Densidade (DFT) e modelagem atomística. Vários estudos até agora têm se concentrado no transporte em SOFC e na caracterização de reações químicas através de cálculos de primeiros princípios. No entanto, ainda há muito trabalho a ser feito para incorporar os efeitos da temperatura, do eletrólito e diferentes composições de materiais. Especificamente, é essencial compreender como esses efeitos afetam as reações nos ânodos das SOFC e os fenômenos interfaciais nas interfaces do anodo e do eletrólito. 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 project 87 of the FAPESP-Shell Research Centre for Greenhouse Gas Innovation of POLI-USP at the University of São Paulo. A summary of the program and projects can be found at the RCGI website (http://www.rcgi.poli.usp.br/). A successful candidate will investigate and describe heterogeneous and electrochemically catalyzed reactions in solid oxide fuel cells (SOFCs) using Density Functional Theory (DFT) and	

atomistic modeling. Several studies so far have focused on transport in SOFCs and the characterization of chemical reactions through first-principles calculations. However, much work must be done to incorporate the effects of temperature, solvent, and different material compositions. Specifically, it is essential to understand how these effects influence reactions at the anodes of SOFCs and interfacial phenomena at the anode and electrolyte interfaces. This position allows the candidate to apply for and develop a research period at Imperial College London.

Description (Portuguese and English)

O candidato contribuirá alinhado aos principais objetivos do projeto:

1. Realizar cálculos de Primeiros Princípios e simulações atomísticas para descrever as reações heterogêneas e eletroquimicamente catalisadas nas SOFCs
2. Colabore 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. Conduct First Principles calculations and atomistic simulations to investigate and describe heterogeneous and electrochemically catalyzed reactions in SOFCs.
2. Collaborate closely with a multidisciplinary team of researchers to integrate your findings into the development of 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 cálculos de primeiros princípios e dinâmica molecular 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 first principles calculations and molecular dynamics 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 FUSP. The scholarship will cover a standard maintenance stipend of R\$ 8.479,20 per month.

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



Research Centre for Greenhouse Gas Innovation

Documents/Information to be Sent:

Ref: 23PDR232

- 1) Fill-in the application form:

<https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSfV4KkheEQeMJKiDnkVkOQiDm5pvKU28bFJR5uNhYpigU0Dhw/viewform>

Deadline: October 20th, 2023

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