

<b>Lead institution: Escola Politecnica</b>	
<b>Supervisor name: Profs Julio Meneghini and Thiago Lopes and Caetano Miranda</b>	<b>Department: PNV-PME, Poli USP</b>
<b>Recipient:</b> <a href="https://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/">https://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/</a> <b>Ref: 23PDR253 – Post Doctoral Fellowship</b> <b>Deadline for submission: October 20<sup>th</sup>, 2023</b>	<b>Type: Post-doctoral</b> <b>Period: (hours/week) 40/week</b> <b>Number of months: 24 initial with possibility of extension</b> <b>Intended beginning date: November/2023 (Flexible)</b>
<b>Project title: (Portuguese and English)</b> <i>Oportunidades de Pós-Doutorado em Triagem de Materiais para Eletrólitos e Propriedades de Transporte em Células de Combustível</i>  <i>Post-doctoral opportunities in Materials Screening for Electrolyte and Transport Properties in Fuel Cells</i>	
<b>Research theme area: (Portuguese and English)</b> Células de Combustível, Etanol, Eletrólitos, Condução de Íons, Propriedades de Transporte, Aprendizado de Máquina, e Modelagem Atomística  Fuel Cells, Ethanol, Electrolytes, Ion Conduction, Transport Properties, Machine Learning, and Atomistic Modeling	
<b>Abstract (Portuguese and English)</b> 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 ( <a href="http://www.rcgi.poli.USP.br/">http://www.rcgi.poli.USP.br/</a> ).  O(A) candidato(a) selecionado(a) empregará machine learning para realizar uma triagem de materiais, baseada em cálculos de primeiros princípios e dados experimentais, com o propósito de selecionar materiais de eletrólitos e, posteriormente, descrever suas propriedades de transporte por meio de modelagem atomística. 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 ( <a href="http://www.rcgi.poli.usp.br/">http://www.rcgi.poli.usp.br/</a> ).  A successful candidate will employ machine learning to perform material screening based on first-principles calculations and experimental data to select electrolyte materials and describe their transport properties through atomistic modeling. 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. Utilizar técnicas computacionais avançadas e algoritmos de aprendizado de máquina para identificar e avaliar materiais adequados como eletrólitos de células de combustível de óxido sólido a etanol direto, incluindo condução iônica por prótons e íons oxigênio.
2. Realizar simulações de dinâmica molecular para descrever e calcular propriedades física e de transporte dos eletrólitos.
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 as electrolytes in direct ethanol solid oxide fuel cells, including both proton and oxygen ions.
2. Conduct molecular dynamics simulations to describe and calculate the physical and transport properties of the systems.
3. Collaborate closely with a multidisciplinary team of researchers to integrate your findings into the experimental 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 de linguagens de programação, experiência em aprendizado de máquina e dinâmica molecular e proficiência em inglês são necessárias.

- O candidato deve ser doutor em Matemática, Física, 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 molecular dynamics and proficiency in English are required.

- The postdoc candidate should hold a PhD in Mathematics, Physics, 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: 23PDR253**

- 1) Fill-in the application form:

<https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSfV4KkheEQeMJKiDnkVkOOiDm5pvKU28bFJR5uNhYpigU0Dhw/viewform>

**Deadline: October 20<sup>th</sup>, 2023**

In case you have any question, please write to [rcgi.opportunities@usp.br](mailto:rcgi.opportunities@usp.br)