

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: 23PhD231 Deadline for submission: November 5th,2023	Type: PhD student Period: (hours/week) 40/week Number of months: 36 Intended beginning date: November/2023 (flexible)
Project title: (Portuguese and English) <i>Estudos das Propriedades Físicas e de Transporte em Células a Combustível por Meio de Simulações Multiescala.</i> <i>Studies of Physical and Transport Properties in Fuel Cells Through Multiscale Simulations.</i>	
Research theme area: (Portuguese and English) Células a Combustível, Etanol, Propriedades Físicas, Propriedades de Transporte, Simulação Multiescala Fuel Cells, Ethanol, Physical Properties, Transport Properties, Multiscale simulation	
Abstract (Portuguese and English) <p>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/).</p> <p>O objetivo principal deste projeto de pesquisa de doutorado é investigar as propriedades físicas e de transporte em eletrólitos e eletrodos por meio de simulações multiescala. Nossa meta é compreender e descrever tanto o comportamento dos eletrodos e eletrólitos quanto as suas interfaces para aplicações, como a produção de hidrogênio a partir do etanol. Vamos utilizar técnicas computacionais avançadas para determinar as propriedades termodinâmicas, cinéticas e de transporte dos materiais, empregando metodologias multiescala que incluem simulações de dinâmica molecular, método Coarse-graining e Dinâmica dos Fluidos Computacional. O(A) candidato(a) se beneficiará de colaborações com grupos computacionais e experimentais dentro do projeto "Do Fundamento à Aplicação: Alcançando Novas Fronteiras em Tecnologias de Células a Combustível" a ser desenvolvido na Escola Politécnica da Universidade de São Paulo em colaboração com o Instituto de Física e do Centro de Pesquisas para Inovação em Gás (RCGI). Esta vaga também trás a possibilidade de o doutorando desenvolver um período de pesquisa no Imperial College London.</p> <p>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/).</p> <p>This doctoral research project aims to investigate the physical and transport properties of electrolytes and electrodes through multiscale simulations. As a team, we aim to understand and</p>	

describe the behavior of electrodes and electrolytes and their interfaces for applications such as hydrogen production from ethanol. A successful candidate will employ advanced computational techniques to determine materials' thermodynamic, kinetic, and transport properties using multiscale methodologies, including molecular dynamics simulations, coarse-graining methods, and Computational Fluid Dynamics. The candidate will benefit from collaborations with computational and experimental, as well as with groups from Imperial College London within the project "From Fundamentals to Applications: Achieving New Frontiers in Fuel Cell Technologies," to be developed at the Polytechnic School of the University of São Paulo in collaboration with the Institute of Physics and the RCGI. This position allows the candidate to apply for and develop a PhD research period at Imperial College London.

Description (Portuguese and English)

O candidato contribuirá alinhado aos principais objetivos do projeto:

1. *Benchmark* e desenvolvimento de potencial interatômico para as espécies químicas em eletrólitos e eletrodos.
2. Conduzir simulações moleculares para determinar propriedades físicas e de transporte em diferentes escalas de comprimento e tempo.
3. Mapeamento das simulações moleculares para a Dinâmica dos Fluidos Computacional
4. Realizar simulações utilizando a Dinâmica dos Fluidos para diferentes eletrólitos e eletrodo.
5. 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. Benchmarking and development of interatomic potentials for chemical species in electrolytes and electrodes.
2. Conduct molecular simulations to determine physical and transport properties at different length and time scales.
3. Mapping molecular simulations to Computational Fluid Dynamics.
4. Perform simulations using Computational Fluid Dynamics for various electrolytes and electrodes.
5. Collaborate closely with a multidisciplinary and international 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 experiência em modelagem computacional e proficiência em inglês são necessárias.

- O candidato deve possuir graduação em Física, Ciência dos Materiais, Química, Engenharia ou áreas afins.

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

- The postdoc candidate should have a degree in Physics, Materials Science, Chemistry, Chemical Engineering, or related fields.

Funding Notes: This Phd scholarship is funded by FAPESP. The scholarship will cover a standard maintenance stipend following FAPESP values (at <https://fapesp.br/valores/bolsasnopais>).

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: 23PhD231

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