



Lead institution: University of São Paulo Polytechnic School	
Supervisor name: Rita Maria de Brito Alves Reinaldo Giudici	Department: Chemical Engineering
Recipient: https://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/ Ref: 22PDR192 - Postdoctoral fellowship Deadline for submission: May 30th, 2023	Type: Postdoctoral fellowship Period: Full time Number of months: 24 Intended beginning date: June, 2023
Project title: (Portuguese and English) Dehidroaromatização de Etano - Modelagem e Engenharia de Reatores Ethane Dehydroaromatization - Modeling and Reactor Engineering	
Research theme area: (Portuguese and English) Modelagem de Processos Químicos e Engenharia de reatores Process Modeling and Reactor Engineering	
Abstract: (Portuguese and English) Selective and efficient conversion of the ethane component of natural gas is a long-standing challenge that holds promise for valorizing stranded or highly distributed resources and for utilizing natural gas in sustainable applications beyond electricity generation and building heat. Catalytic conversion of ethane to ethylene and aromatic hydrocarbons through non-oxidative dehydrogenation and dehydroaromatization of ethane (EDH and EDA) are potentially key technologies due to their high selectivity to products. The former represents an attractive alternative to conventional thermal cracking of ethane. The latter can produce valuable aromatic hydrocarbons from a cheap feedstock. Combining CO ₂ reduction with the tandem reactions of ethane dehydrogenation and aromatization can also mitigate CO ₂ emissions. A one-step process can produce liquid aromatics from the reactions of CO ₂ and ethane. Nevertheless, further progress in catalytic science and technology is indispensable to implement these processes beneficially. This project will combine advanced synthetic and analytic capabilities, careful kinetics/mechanistic studies, and theory to produce new atomistic and molecular-level understandings in the efficient conversion of ethane. The fundamental knowledge gained will be focused on addressing coupling catalyst development and insights to optimal reactor designs and comprehensive microkinetic models that will allow rapid and efficient development of ethane conversion processes over different scales. Reactor engineering approaches to improve the efficiency of the EDA process will also be evaluated. These may include cofeeding CO ₂ , catalytic membrane reactors, and chemical looping. The candidate will collaborate with researchers from the project Project 71 - FAPESP/RCGI/CINE-NSF/CISTAR Center to Center Collaboration (C2C) of the FAPESP-Shell Research Centre for 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 conversão seletiva e eficiente do componente etano do gás natural é um desafio de longa data que promete valorizar recursos não utilizados ou altamente distribuídos e utilizar gás natural em aplicações sustentáveis além da geração de eletricidade e aquecimento. A conversão catalítica de etano em etileno e hidrocarbonetos aromáticos por meio de desidrogenação não oxidativa e desidroaromatização de etano (EDH e EDA) são tecnologias potencialmente importantes devido à sua alta seletividade para os produtos. O primeiro representa uma alternativa atraente ao craqueamento térmico convencional do etano. Este último pode produzir hidrocarbonetos aromáticos valiosos a partir de uma matéria-prima barata. Combinar a redução de CO₂ com as reações em tandem de desidrogenação e aromatização de etano também pode mitigar as emissões de CO₂. Um processo de uma etapa pode produzir aromáticos líquidos a partir das reações de CO₂ e etano. No entanto, um maior progresso na ciência e tecnologia catalítica é indispensável para implementar esses processos de forma benéfica.

Este projeto combinará recursos sintéticos e analíticos avançados, estudos cinéticos/mecanísticos cuidadosos e teoria para produzir novos entendimentos atomísticos e de nível molecular na conversão eficiente de etano. O conhecimento fundamental adquirido será focado no desenvolvimento de catalisadores de acoplamento e insights para projetos de reatores ideais e modelos microcinéticos abrangentes que permitirão o desenvolvimento rápido e eficiente de processos de conversão de etano em diferentes escalas. Abordagens de engenharia de reator para melhorar a eficiência do processo EDA também serão avaliadas. Estes podem incluir co-alimentação de CO₂, reatores de membrana catalítica e loop químico.

O candidato colaborará com pesquisadores do projeto Projeto 71 - FAPESP/RCGI/CINE-NSF/CISTAR Center to Center Collaboration (C2C) do FAPESP-Shell Research Center for Gas Innovation da POLI-USP da Universidade de São Paulo. Resumo do programa e projetos podem ser encontrados no site do RCGI (<http://www.rcgi.poli.usp.br/>).

Description: (Portuguese and English)

The postdoctoral activities are projected for two years and will follow a list of activities (scientific reports and paper writing will be performed concomitantly). The applicant will contribute to line with the main objectives of the project:

1. Modelling and simulation of chemical production processes
2. Estimation of kinetic parameters by adjusting different kinetic models to the collected data;
3. Development of catalytic reactor designs
4. Development of case studies

As atividades de pós-doutorado são projetadas para dois anos e seguirão uma lista de atividades (relatórios científicos e redação de artigos serão realizados concomitantemente). O candidato contribuirá de acordo com os principais objetivos do projeto:

1. Modelagem e simulação de processos
2. Estimativa de parâmetros cinéticos ajustando diferentes modelos cinéticos aos dados coletados;
3. Desenvolvimento de projetos de reatores catalíticos
4. Desenvolvimento de estudos de caso e avaliação de cenários

Requirements to fill the position: (Portuguese and English)

This project would be well-suited to a highly motivated candidate requiring experience in the development, implementation and analysis of mathematical models and reactor engineering.

- The candidate must have a PhD in chemical engineering or any relevant engineering and computational sciences field.
- It is necessary to have experience with computational modelling, optimization, chemical process engineering, reactor engineering and development of mathematical optimization and computational models for engineering systems.

It is necessary a background in process engineering and computational sciences with good skills in programming.

- Ability to work with multidisciplinary research teams.
- Familiarity with techno-economic analysis is desirable.
- Proficiency in English is required.

Este projeto é adequado para um candidato altamente motivado e requer experiência no desenvolvimento, implementação e análise de modelos matemáticos e engenharia de reatores.

- O candidato deve ter doutorado em engenharia química.
- É necessário ter experiência com modelagem computacional, otimização, engenharia de processos químicos, engenharia de reatores e desenvolvimento de otimização matemática e modelos computacionais para sistemas de engenharia.
- É necessário formação em engenharia de processos e ciências da computação com bons conhecimentos de programação.
- Capacidade de trabalhar com equipes de pesquisa multidisciplinares.
- Familiaridade com análise tecno-econômica é desejável.
- É necesserário ter proficiência em inglês.

Funding Notes: This Postdoc fellowship is funded by FAPESP. The fellowship will cover a standard maintenance stipend of R\$ 8.479,20 (Reais) per month.

Work place: Department of Chemical Engineering / Rua do Lago, 250, Semi Industrial Building, Bl A, 3o andar

Financiamento: Esta bolsa de Pós-Doutorado é financiada pela FAPESP. A bolsa cobrirá uma bolsa de manutenção padrão de R\$ 8.479,20 (Reais) por mês.

Local de trabalho: Departamento de Engenharia Química / Rua do Lago, 250, Prédio Semi-Industrial, Bl A, 3º andar



Documents/Information to be Sent:

Ref: 22PDR192

1) Fill-in the application form:

https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSfV4KkheEQeMJKiDnkVkoQIDm5pvKU28bFJR5uNhYpjgU0Dhw/viewform?usp=sf_link

2) **Send the following documents to rcgi.opportunities@usp.br**

- Updated CV including all your publications (with a link to the Lattes Curriculum, if applicable);
- Number of publications, number of citation and H index (base Scopus and Google Scholar) - for Postdoctoral positions;
- Date of PhD conclusion - for Postdoctoral positions;
- A copy of the academic record/academic transcript of both graduate and undergraduate courses;
- A motivation letter highlighting your background and research interests (in English) **to be filled in the application form.**

Deadline: May 30th, 2023

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