

<b>Lead institution:</b> Chemistry Institute / USP	
<b>Supervisor name:</b> Atualpa Braga	<b>Department:</b> Chemistry
<b>Recipient:</b> <a href="https://sites.usp.br/rcgi/opportunities/">https://sites.usp.br/rcgi/opportunities/</a> <b>Ref:24PDR284 – Postdoctoral Fellowship</b> <b>Deadline for submission: June 20<sup>th</sup>, 2024</b>	<b>Type:</b> Postdoc Fellowship <b>Period:</b> 12 <b>Number of months:</b> 12 <b>Intended beginning date:</b> July 2024
<b>Project title: (Portuguese and English)</b> <p>Conversão catalítica de metanol a aromáticos sob alta pressão</p> <p>Catalytic conversion of methanol to aromatics under high pressure</p>	
<b>Research theme area: (Portuguese and English)</b> <p>Catálise, MTA, e cinética química.</p> <p>Catalysis, MTA and chemical kinetics.</p>	
<b>Abstract (Portuguese and English)</b> <p>O candidato irá colaborar com os pesquisadores do projeto “Conversão catalítica de metanol a aromáticos sob alta pressão” Projeto 113 do programa CCU do FAPESP-Shell Centro de Pesquisa para a Inovação em Gases do Efeito Estufa da Universidade de São Paulo. Resumo do programa e os projetos podem ser encontrados no site da RCGI (<a href="https://sites.usp.br/rcgi/">https://sites.usp.br/rcgi/</a>).</p> <p>The candidate will collaborate with researchers from the project "Catalytic conversion of methanol to aromatics under high pressure" of the Project 113 - CCU program of the FAPESP-Shell Research Centre for Gas Innovation at the University of São Paulo. Summary of the program and projects can be found at the RCGI website (<a href="https://sites.usp.br/rcgi/">https://sites.usp.br/rcgi/</a>).</p>	
<b>Description (Portuguese and English)</b> <p>O(A) pesquisador(a) contribuirá alinhado(a) aos principais objetivos do projeto que visa desenvolver a conversão catalítica de metanol em aromáticos (MTA), um dos principais componentes dos combustíveis sustentáveis de aviação (SAFs). O(A) candidato(a) atuará no IQ-USP.</p> <p>Este projeto visa desenvolver e otimizar a conversão catalítica de metanol em aromáticos. Para este efeito, concebemos uma estratégia baseada em três grandes pacotes de trabalho. Esses pacotes de trabalho contribuem coletivamente para o objetivo geral de desenvolver uma abordagem integrada para a conversão catalítica de metanol em aromáticos, abrangendo projeto de catalisador, desenvolvimento de processos e insights teóricos. O plano de trabalho do candidato a PostDoc será dedicado ao pacote de trabalho Insights Teóricos; as atividades se concentrarão no uso de métodos computacionais.</p>	

The researcher will contribute in alignment with the main objectives of the project aimed at developing the catalytic conversion of methanol to aromatics (MTA), one of the main components of sustainable aviation fuels (SAFs). The candidate will work at IQ-USP.

This project aims to develop and optimize the catalytic conversion of methanol into aromatics. For this purpose, we conceived a strategy based on three major work-packages. These work packages collectively contribute to the overall goal of developing an integrated approach for the catalytic conversion of methanol into aromatics, encompassing catalyst design, process development, and theoretical insights. The work plan for the Postdoc candidate will be dedicated to Theoretical Insights work-package; the activities will focus on using computational methods.

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

O(A) candidato(a) deve possuir doutorado em química, física ou engenharia, tendo realizado seus estudos computacionais estudando reações na área de catálise heterogênea, com experiência nas seguintes áreas:

- Cálculos baseados na Teoria do Funcional de Densidade e em função de onda;
- Estudos periódicos e usando grandes clusters envolvendo catálise heterogênea;
- Sistemas sólidos porosos, principalmente zeólitas e/ou MOFs;
- Noções de programação em linguagens interpretadas como python, perl, bash, etc.;
- Familiaridade em alguma distribuição Linux ou FreeBSD;
- Familiaridade com programas para cálculos periódicos como VASP, Quantum Espresso ou CP2K;
- Familiaridade com programas para cálculo de estrutura eletrônica ORCA, CREST, xtB e Gaussian.

O(A) candidato(a) deve ter obtido o grau de doutor há no máximo cinco anos e é desejável ter experiência trabalhando em centros de pesquisa no exterior.

The candidate must hold a PhD in chemistry, physics, or engineering, having conducted computational studies on reactions in the field of heterogeneous catalysis, with experience in the following areas:

- Density Functional Theory (DFT) and wave function-based calculations;
- Periodic studies and using large clusters involving heterogeneous catalysis;
- Porous solid systems, mainly zeolites and/or MOFs;
- Programming skills in interpreted languages such as Python, Perl, Bash, etc.;
- Familiarity with Linux or FreeBSD distributions;
- Familiarity with software for periodic calculations such as VASP, Quantum ESPRESSO, or CP2K;
- Familiarity with electronic structure calculation software such as ORCA, CREST, xtB, and Gaussian

The candidate must have obtained their PhD within the last five years, and it is desirable to have experience working in research centers abroad.

**Funding Notes:** This Postdoc fellowship is funded by FUSP/Shell. The fellowship will cover a standard maintenance stipend of R\$ 9.047,40 per month.

**Work place:** Instituto de Química da Universidade de São Paulo, Av. Prof. Lineu Prestes 748, Butantã, São Paulo, Brazil.



**Documents/Information to be Sent:**

**Ref: 24PDR284**

- 1) Access the link <https://sites.usp.br/rcgi/opportunities/>
- 2) Find the Position **Ref: 24PDR284**
- 3) Click on Application to apply

**Deadline: June 20<sup>th</sup>, 2024.**

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