

Lead institution: Escola Politécnica	
Supervisor name: Profs. Julio Meneghini, Daniela A. Damasceno and Thiago Lopes	Department: PNV-PME, Poli USP
Recipient: https://sites.usp.br/rcgi/opportunities/ Ref: 24PDR286 – Postdoctoral Fellowship Deadline for submission: July 5th, 2024	Type: Post-doctoral Period: (hours/week) 40/week Number of months: 12 initial with possibility of extension Intended beginning date: August, 2024 (flexible)
Project title: (Portuguese and English) <p>Estudo das Propriedades Mecânicas, Físicas e de Transporte em Processos Multifísicos por Meio de Simulações Multiescala.</p> <p>Studies of Mechanical, Physical, and Transport Properties in Multi-physical Processes Through Multiscale Simulations.</p>	
Research theme area: (Portuguese and English) <p>Células a Combustível, Etanol, Propriedades Termomecânicas, Propriedades de Transporte, Interfaces, Simulação Multiescala</p> <p>Fuel Cells, Ethanol, Thermomechanical Properties, Transport Properties, Interfaces, Multiscale simulation</p>	
Abstract (Portuguese and English) <p>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 (https://sites.usp.br/rcgi/).</p> <p>O objetivo principal deste projeto de pesquisa de pós-doutorado é investigar as propriedades físicas, mecânicas e de transporte em processos multifísicos, tais como células a combustível, por meio de simulações multiescala. Nossa meta é compreender e descrever tanto o comportamento de componentes individuais quanto suas interfaces para aplicações como a produção de hidrogênio a partir do etanol. Utilizaremos técnicas computacionais avançadas para determinar as propriedades termomecânicas e de transporte, empregando metodologias multiescala que incluem simulações de dinâmica molecular, método coarse-graining e dinâmica dos fluidos computacionais. O(A) candidato(a) se beneficiará de colaborações com grupos computacionais e experimentais dentro dos projetos em desenvolvimento na Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, no Centro de Pesquisas para Inovação em Gás (RCGI) e no Imperial College London.</p> <p>The candidate will collaborate with researchers from the project 87 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 (https://sites.usp.br/rcgi/).</p>	

The main objective of this postdoctoral research project is to investigate the physical, mechanical, and transport properties in multi-physical processes, such as fuel cells, through multiscale simulations. Our goal is to understand and describe both the behavior of individual components and their interfaces for applications such as hydrogen production from ethanol. We will utilize advanced computational techniques to determine thermomechanical and transport properties, employing multiscale methodologies that include molecular dynamics simulations, the coarse-graining method, and computational fluid dynamics. The candidate will benefit from collaborations with computational and experimental groups within ongoing projects at the Polytechnic School of the University of São Paulo, the Research Centre for Gas Innovation (RCGI), and Imperial College London.

Description (Portuguese and English)

O(a) candidato(a) contribuirá alinhado aos principais objetivos do projeto:

- 1) *Benchmark* e desenvolvimento de potencial interatômico para as espécies químicas em eletrólitos, eletrodos, e materiais de selagem.
- 2) Conduzir simulações moleculares para determinar propriedades mecânicas, 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 os componentes individuais e suas interfaces.
- 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, electrodes, and sealing materials.
- 2) Conduct molecular simulations to determine, mechanical, 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 individual components and interfaces.
- 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(a) candidato(a) altamente motivado, e 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, and 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 Postdoc fellowship is funded by FUSP. The fellowship 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

Documents/Information to be Sent:

Ref: 24PDR286

- 1) Access the link <https://sites.usp.br/rcgi/opportunities/>
- 2) Find the Position **Ref: 24PDR286**
- 3) Click on Application to apply

Deadline: July 5th, 2024.

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