

Súmula Curricular – Modelo Fapesp

Prof. Marco Aurélio Pinheiro Lima

Instituto de Física da UNICAMP

1) **Formação:** Físico (USP), Mestrado em Física (USP), Doutorado em Química (CALTECH).

2) **Histórico Profissional, prêmios, etc:**

- Pesquisador do IEAV/CTA (1980-1988), São José dos Campos.
- Professor da Unicamp desde 1987 (Livre Docente pela UNICAMP em 1992 e Professor Titular desde 1999).
- Diretor do Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Bioetanol CTBE/CNPEM(2008-2012).
- Prêmio de Reconhecimento acadêmico Zeferino Vaz em 2001 e em 2013.
- Eleito, em 2015, membro titular da Academia de Ciências do Estado de São Paulo.
- Bolsista CNPq desde 1987.

3) **Lista de até 10 resultados científicos mais relevantes (ordem cronológica inversa):**

[1]. Romarly F. da Costa, Márcio T. do N. Varella, Márcio H. F. Bettega, and Marco A. P. Lima, "Recent advances in the application of the Schwinger multichannel method with pseudopotentials to electron-molecule collisions", *Eur. Phys. J. D* **69**, 1 (2015). DOI: [10.1140/epjd/e2015-60192-6](https://doi.org/10.1140/epjd/e2015-60192-6). *Artigo de revisão, a convite do editor, sobre as contribuições do grupo em espalhamento de elétrons por moléculas.*

[2]. Romarly F. da Costa, Eliane M. de Oliveira, Márcio H. F. Bettega, Márcio T. do N. Varella, Darryl B. Jones, Michael J. Brunger, Francisco Blanco, Rafael Colmenares, Paulo Limão-Vieira, Gustavo García, and Marco A. P. Lima, "Electron collisions with phenol: total, integral, differential and momentum transfer cross sections and the role of multichannel coupling effects on the elastic channel", *J. Chem. Phys.* **142**, 104304 (2015). DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4913824>. *Artigo em colaboração Nacional (UNICAMP, UFABC, UFPR) e Internacional (Austrália, Portugal e Espanha) onde confirmamos (anteriormente havíamos feito para furano e para etileno) com auxílio do método multicanal de Schwinger com pseudo-potenciais, a importância de efeitos de acoplamento multicanal para o espalhamento de elétrons com energias intermediárias (20-50 eV).*

[3]. Eliane M. de Oliveira, Thiago C. Freitas, Kaline Coutinho, Márcio T. do N. Varella, Sylvio Canuto, Marco A. P. Lima, and Márcio H. F. Bettega, "[Communication](#): Transient anion states of phenol...(H₂O)_n (n = 1, 2) complexes: Search for microsolvation signatures", *J. Chem. Phys.* **141**, 051105 (2014). DOI: [10.1063/1.4892066](#). *Projeto de colaboração nacional (UNICAMP, USP, e UFPR) sobre espalhamento de elétrons por moléculas micro-solvatadas, sob a coordenação de Márcio H. F. Bettega (UFPR). Aplicamos a estratégia para o espalhamento de fenol, visando encontrar assinaturas da solvatação nas seções de choque diferencial de espalhamento de elétrons por fenol. Nossas seções de choque integrais também mostraram o deslocamentos de ressonâncias, em conformidade com resultados anteriores e trata importante molécula constituinte da Biomassa (assunto também relacionado à um projeto temático da Fapesp que visou testes de utilização de plasma atmosféricos para o produção de etanol). A primeira autora foi bolsista pós-doc da FAPESP, sob minha supervisão.*

[4]. *Os dois artigos, a seguir, se completam:* Eliane M. de Oliveira, Romarly F. da Costa, Sergio d'A. Sanchez, Márcio H. F. Bettega, Alexandra P. P. Natalense, Marco A. P. Lima, and Márcio T. do N. Varella, "Low-energy electron scattering by cellulose and hemicellulose components", *Physical Chemistry Chemical Physics* **15**, 1682-9 (2013). DOI: [10.1039/c2cp43375c](#); Eliane M. de Oliveira, Sergio d'A. Sanchez, Márcio H. F. Bettega, Alexandra P. P. Natalense, Marco A. P. Lima, and Márcio T. do N. Varella, "Shape resonance Spectra of Lignin Subunits", *Phys. Rev. A* **86**, 020701-4 (R) (Rapid Communication) (2012). DOI: [10.1103/PhysRevA.86.020701](#). *Esse assunto, sob coordenação de Márcio T. Do N. Varella (USP), mostrou importante resultado do projeto temático (coordenado por mim) de utilização de plasmas atmosféricos para o produção de etanol. Componentes da celulose e da hemicelulose são menos sensíveis à descarga que os componentes da lignina. Resultado útil para pré-tratamento da biomassa com plasmas atmosféricos.*

[5]. M.A. Khakoo, J. Blumer, K. Keane, C. Campbell, H. Silva, M.C.A. Lopes, C. Winstead, V. McKoy, R.F. da Costa, L. G. Ferreira, M.A.P. Lima, M.H.F. Bettega, "Low-energy elastic scattering from methanol and ethanol", *Phys. Rev. A* **77**, 042705 (2008). *Projeto de colaboração nacional (USP, UFABC, USP, UNICAMP) e internacional (EUA) sobre ignição de biocombustíveis. Atuei como coordenador brasileiro do projeto bilateral CNPq/NSF. Esse assunto, visa a obtenção de dados (seções de choque de espalhamento de elétrons de baixa energias por*

moléculas que compõe combustíveis) relevantes para a simulação de plasmas e para a otimização de velas de ignição de motores.

[6]. Romarly F. da Costa, Fernando J. da Paixão, and Marco A. P. Lima, "Electron-impact excitation of H₂: Minimal Orbital Basis for Single Configuration Interaction", *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **37** L129-L135 (2004). *Projeto sobre implementação e uso de alvos moleculares descritos por excitações simples em interações de configurações no Método Multicanal de Schwinger com Pseudopotenciais para espalhamento de elétrons. Esse foi tema de tese de doutorado da primeira autora e abriu uma nova linha de pesquisa com um grande número de publicações (ver revisão na ref. 1 acima).*

[7]. Euclimar P. da Silva, José S. E. Germano, and Marco A. P. Lima "Z_{eff} according to the Schwinger Multichannel Method," *Phys. Rev. A* (Rapid Communication) **49**, R1527-30 (1994). *Primeira vez que usamos a função de onda de muitos corpos obtida com o Método Multicanal de Schwinger para calcular propriedades (probabilidade de aniquilação de pósitrons com elétron durante o processo de espalhamento). Tese de doutorado do primeiro autor, sob minha orientação.*

[8]. Márcio H. F. Bettega, Luiz G. Ferreira, and Marco A. P. Lima, "Transferability of Local-Density Norm-Conserving Pseudopotentials to Electron-Molecule Collision Calculations," *Phys. Rev. A* **47**, 1111-8 (1993). DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.47.1111>. Nesse artigo apresentamos pela primeira vez o uso de pseudo-potenciais que conservam a norma no método multicanal de Schwinger para o espalhamento de elétrons por moléculas. Esse assunto só foi possível devido a liderança do Prof. Luiz Guimarães Ferreira (hoje na USP e na ocasião na Unicamp) no assunto. Essa foi a tese de doutorado do primeiro autor, sob a orientação do Prof. Ferreira e sob minha co-orientação. Ela se mostrou muito eficiente, permitiu visitar a tabela periódica sem restrições e deu origem a outras teses e mais de 80 publicações. Dois exemplos destas visitas (mais citados) estão em: Márcio T. do N. Varella, Márcio H. F. Bettega, Marco A. P. Lima, and Luiz G. Ferreira, "Low-energy electron scattering by H₂O, H₂S, H₂Se and H₂Te," *J. Chem. Phys.* **111**, 6396-406 (1999) e Alexandra P.P. Natalense, Márcio H. F. Bettega, Luiz G. Ferreira, and Marco A. P. Lima, "Halogenation Effects in Electron Scattering from CHF₃, CH₂F₂, CH₃F, CHCl₃, CH₂Cl₂, CH₃Cl, CFCl₃, CF₂Cl₂, CF₃Cl" *Phys. Rev. A* **59**, 879-82 (1999).

[9]. José S. E. Germano and Marco A. P. Lima, "The Schwinger Multichannel Method for Positron-Molecule Scattering," *Phys. Rev. A* **47**, 3976-82 (1993). DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.47.3976>. *Nesse artigo apresentamos um método variacional para espalhamento de pósitrons por moléculas. Tese de doutorado do primeiro autor que deu origem a inúmeras publicações e outras teses e colocou nosso grupo entre os poucos grupos teóricos que calculam seções de choque de espalhamento de pósitrons por molécula*

[10]. Fernando J. da Paixão Filho, Marco A. P. Lima, and Vincent McKoy, "Spin Exchange in Elastic e^-O_2 Collisions," *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1698-701 (1992). *Primeiro cálculo de espalhamento de elétrons por moléculas com camadas eletrônicas abertas. Esse artigo mostra um importante resultado que em um espalhamento com spin polarizado, as estruturas (muito comuns em casos atômicos) nas seções de choque diferenciais de troca de spin (spin-flip) são amenizadas pelas médias em orientação da moléculas (razão de ser um Physical Review Letters). Posteriormente, verificamos que esse efeito estava presente em outras moléculas.*

4) **Lista de financiamentos à pesquisa vigentes:** Bolsa e reserva técnica de Pesquisador 1A do CNPq.

5) **Lista de orientações em andamento, com bolsas:** Atualmente não tenho alunos. Já formei 16 doutores (sendo 4 co-orientações), 6 alunos de mestrado, e supervisionei 4 pós-doutores.

6) **Indicadores quantitativos:** Publiquei mais de 160 artigos, com alunos e colaboradores, em revistas de prestígio internacional e tenho mais de 2500 citações de meus trabalhos.

7) **Links para páginas da web sobre minha produção científica e citações de meus trabalhos:**

- [ResearchID: C-1216-2013](http://www.researcherid.com/rid/C-1216-2013) (<http://www.researcherid.com/rid/C-1216-2013>)
- <http://orcid.org/0000-0002-3602-1546>
- <https://scholar.google.com.br/citations>

8) **Outras informações**

- **Página na Unicamp** <http://sites.ifi.unicamp.br/maplima/>
- **C. Lattes** (<http://buscatextual.cnpq.br/buscatextual/visualizacv.do?id=K4783080D5>)