

*Relatório de Actividades*

*Abril de 2014– Março de 2017*

*da Investigadora Auxiliar  
Elsa Maria Simões Branco Lopes*

*Relatório de Actividades da Inv. Auxiliar Elsa Maria Simões Branco Lopes  
no Triénio Abril de 2014-Março de 2017*

### **1.1- Breve Descrição da actividade em I&D**

A minha actividade foi desenvolvida como Investigadora Auxiliar no Departamento de Ciências e Engenharias Nucleares do IST, no Grupo de Estado Sólido sob a direcção do Professor Manuel Leite de Almeida.

No triénio de Abril de 2014 a Março de 2017 salienta-se o trabalho desenvolvido na procura de novos materiais termoeléctricos do qual resultaram várias publicações e comunicações, de destacar os valores de ZT de 0.8 obtidos para  $\alpha\text{-As}_{2-x}\text{Sn}_x\text{Te}_3$  a 523 K para  $x = 0.05$ . O estudo de propriedades de transporte em sólidos condutores de base molecular também deu origem com a várias publicações e comunicações, nomeadamente com o aparecimento dos novos compostos de base molecular em bicamada, que apresentam propriedades metálicas e até supercondutoras. No que diz respeito ao estudo das propriedades de transporte em novos sistemas intermetálicos com electrões fortemente correlacionados ou com propriedades eléctricas e magnéticas interessantes (baseados em elementos  $f$ ,  $p$ ,  $d$ ).também houve novos resultados.

#### *Novos materiais Termoeléctricos*

E.B. Lopes<sup>1</sup>, A.P. Gonçalves<sup>1</sup>, J.B. Vaney<sup>4,5</sup>, G. Delaizir<sup>3</sup>, B. Lenoir<sup>4</sup>, O. Rouleau<sup>2</sup>, A. Pradel<sup>5</sup>, A. Piarristeguy<sup>5</sup>, J. Monnier<sup>2</sup>, E. Alleno<sup>2</sup>, M. Ribes<sup>5</sup>, C. Morin<sup>2</sup>, C. Candolfi<sup>4</sup>, C. Godart<sup>2</sup>, A. Dauscher<sup>4</sup>

1- Grupo Estado Sólido, IST/CTN

2- Laboratório de Química Metalúrgica das Terras Raras do CNRS de Thiais

3-ENSCI, Centre Européen de la Céramique, Limoges

4- Institut Jean Lamour (IJL), CNRS-Université de Nancy

5- Institut Charles Gerhardt (ICG), CNRS-Université Montpellier

A importância da procura de novos materiais para aplicações termoeléctricas, com elevado ZT, relaciona-se com a possibilidade de aplicações destes materiais em sistemas de refrigeração e produção de energia alternativos. O trabalho em vidros de calcogenetos condutores foi desenvolvido em colaboração com os investigadores acima mencionados e respectivas instituições, no âmbito do projecto francês *ANR-PROGELEC-VTG*, do qual fiz

parte desde Novembro de 2011 e que terminou em finais de 2015. Na continuação do trabalho que já tinha sido desenvolvido anteriormente o estudo detalhado do sistema  $\text{As}_2\text{Te}_3$  revelou várias fases  $\alpha\text{-As}_2\text{Te}_3$ ,  $\beta\text{-As}_2\text{Te}_3$ ,  $\beta'\text{-As}_2\text{Te}_3$  que foram estudadas em detalhe bem como o seu potencial para virem a ser usadas em novos materiais termoelectricos. Foi possível obter resultados muito interessantes de como os calcogenetos condutores, que possuem uma condutividade térmica baixa, mesmo na forma policristalina e que com a dopagem adequada podem apresentar valores de ZT próximos de 1 a altas temperaturas, como foi o caso do ZT de 0.8 obtido para  $\alpha\text{-As}_{2-x}\text{Sn}_x\text{Te}_3$  com  $x = 0.05$  a 523K ou 0.22 no caso do  $\beta\text{-As}_{2-x}\text{Bi}_x\text{Te}_3$  para  $\text{Bi}=0.015$  a 300K [P6, P7, P8, P9, P10, P11, P12, P14, P15, O5, O6, O7, O8, O11, Pa4, Pa5, Pa12, Pa13].

As tetraedrites e outros materiais semelhantes (skinerite) também foram objecto de estudo, por se tratar de materiais termoeléctricos mais baratos, amigos do ambiente e que com a dopagem adequada apresentam valores de ZT perto de 1 a 700K e podem ser facilmente usados em aplicações, ver [P13, P16, P20, O2, O3, O9, O14, O15, Pa1, Pa10, Pa11]. Foram realizados vários estudos nomeadamente síntese de tetraedrites por via alternativa a partir de cristalização de vidros e estudos de dopagem da tetraedrite com Ni, Bi e Se.

### *Condutores moleculares de baixa dimensionalidade*

D. Belo<sup>1</sup>, A.I.S. Neves<sup>1</sup>, R.A.L. Silva<sup>1</sup>, M.L. Afonso<sup>1</sup>, E.B. Lopes<sup>1</sup>, L.C.J. Pereira<sup>1</sup>, J.C. Waerenborgh<sup>1</sup>, I.C. Santos<sup>1</sup>, E. Canadell<sup>2</sup>, M. Almeida<sup>1</sup>, C. Rovira<sup>2</sup>.

1- Grupo Estado Sólido, IST/CTN

2- Inst. de Ciència de Materiais de Barcelona, (CSIC)

Em relação aos compostos condutores moleculares em estudo no grupo de Estado Sólido foram estudadas as propriedades de transporte eléctrico, nomeadamente a resistividade e o poder termoeléctrico e magnetoresistência de novos condutores moleculares de baixa dimensionalidade, os principais laboratórios e investigadores com os quais colaboramos neste tema encontram-se acima referidos.. Destacam-se os compostos em estrutura em bicamada do tipo  $(\text{CNB-EDT-TTF})_4\text{X}$  com  $\text{X}=\text{PF}_6^-$ ,  $\text{ClO}_4^-$ ,  $\text{I}_3^-$ , em que existem vários polimorfos [P17, P19]. São compostos 2D metálicos com propriedades pouco comuns, com bandas bastante preenchidas (7/8 no caso do  $\text{PF}_6^-\text{ClO}_4^-$  e quase  $1/2$  no  $\text{I}_3^-$ ), duas superfícies de Fermi quase degeneradas e massas efectivas altas [P1, P4]. O

$(CNB\text{-}EDT\text{-}TTF)}_4I_3$ ) é supercondutor abaixo de 3K, se bem que a transição não seja completa (provavelmente um questão de qualidade da amostra) e possui um campo critico muito baixo 360mT a 1.5K [P19]. Foi encontrado um novo “spin-ladder”  $\alpha\text{-}(DT\text{-}TTF)_2[Au(i\text{-}mnt)_2]$  embora seja fracamente desordenado [P3]. Vários outros novos compostos moleculares foram estudados [P2, P5, P18, P21] como o  $(DT\text{-}TTF)[Cu(dcdmp)_2]$ ,  $(DT\text{-}TTF)_2[Cu(dcdmp)_2]$ ,  $(DT\text{-}TTF)_3[Cu(dcdmp)_2]_2$ ,  $(\alpha\text{-}mDTTF)[Co(mnt)_2]$ ,  $(\alpha\text{-}mDT\text{-}TTF)_3[Au(mnt)_2]_2$ , etc..

### *Materiais Intermetálicos*

A. P. Gonçalves<sup>1</sup>, M. S. Henriques<sup>1</sup>, E. B. Lopes<sup>1</sup>, J. C. Waerenborgh<sup>1</sup>, L. C. J. Pereira<sup>1</sup>, M. Almeida<sup>1</sup>, O. Tougait<sup>2</sup>, H. Noel<sup>2</sup>, M. Pasturel<sup>2</sup>, A. Lignie<sup>2</sup>, L. Havela<sup>3</sup>, D. I. Gorbunov<sup>5</sup>

1- Grupo Estado Sólido, IST/CTN

2- Lab. Chimie du Solide et Inorganique Moléculaire, CNRS Rennes, França

3- Cond. Matter Phys., Faculty of Mathematics and Physics, Charles Univ., Praga

5- Institute of Physics, Prague, Czech Republic

No âmbito do tema sistemas intermetálicos com electrões fortemente correlacionados ou com propriedades magnéticas interessantes (baseados em elementos *f*, *d* e *p*) existem colaborações com investigadores de instituições que se encontram acima referidos de que resultaram uma publicação [P1] e duas comunicações [O1, O4]. O meu envolvimento nos sistemas intermetálicos tem a ver o estudo das propriedades de transporte nomeadamente resistência, magnetoresistência e poder termoeléctrico.

Uma nova fase de  $U_{34}Fe_{4-x}Ge_{33}$  foi estudada em monocrystal e medidas as propriedades magnéticas e de transporte. Este composto apresenta comportamento de tipo metálico e condução predominante por buracos e ordena ferro ou ferrimagneticamente a  $T_C=28K$ . Em consequência da ordenação magnética, foram observados abaixo da temperatura de ordenação, na resistividade uma subida da mesma, um aumento do declive do poder termoeléctrico e uma anomalia no calor específico e uma magnetoresistência positiva [P1].

## **1.2- Participação em projectos de I&D**

- Membro do projecto- “*Verre Thermo-Generateur*”, ANR-PROGELEC-VTG , 2011-2015 , financiado pela Agence Nationale de la Recherche (ANR) Francesa.
- Membro do projecto- “*Novel topological insulator and superconducting materials*”, P2020-PTDC/FIS-NAN/6099/2014, liderado pelo Prof. António Paixão do Departamento de Física da Universidade de Coimbra e iniciado em Maio de 2016.
- Membro do projecto Europeu M-ERA.NET 2016, “*Functional Materials*”- “*Sustainable Thermoelectric Modules based on Non-toxic Silicides and Sulphides for Recovery of Waste Heat to Power Generation-THERMOSS*”, recentemente aprovado e liderado pela Dra. Theodora Kyratsti da Universidade do Chipre, que deve iniciar brevemente.

## **1.3- Publicações**

### **1.3.1- Revistas Internacionais**

P1- M.S. Henriques, D.Berthebaud, A. Lignie, J.C. Waerenborgh, E.B. Lopes, M. Pasturel, O. Tougait, A.P. Gonçalves, A novel ternary uranium-based intermetallic  $U_{34}Fe_{4-x}Ge_{33}$ : structure and physical properties, Journal Alloys Compounds 606 (2014) 154-163. DOI: 10.1016/j.jallcom.2014.03.189.

P2- A.I.S. Neves, I.C. Santos, J.T. Coutinho, L.C.J. Pereira, R.T. Henriques, E.B. Lopes, H. Alves, M. Almeida, D. Belo, 5-Methylthiophene-2,3-dithiolene Transition Metal Complexes, European Journal Inorganic Chemistry (2014) 3989-3999. DOI: 10.1002/ejic.201402048.

P3- R.A.L. Silva, I.C. Santos, J. Wright, J.T. Coutinho, L.C.J. Pereira, E.B. Lopes, S. Rabaça, J. Vidal-Gancedo, C. Rovira, M. Almeida, D. Belo, Dithiophene-TTF Salts; New Ladder Structures and Spin-Ladder Behavior, Inorganic Chemistry 54 (2015) 7000-7006, DOI: 10.1021/acs.inorgchem.5b01013.

P4- S. Oliveira, J.J. Ministro, I.C. Santos, D. Belo, E.B. Lopes, S. Rabaça, E. Canadell, M. Almeida, Bilayer Molecular Metals Based on Dissymmetrical Electron Donors, Inorganic Chemistry 54 (2015) 6677-6679, DOI: 10.1021/acs.inorgchem.5b01240.

P5- R.A.L. Silva, I.C. Santos, E.B. Lopes, S. Rabaça, S. Galindo, M. Mas-Torrent, C. Rovira, M. Almeida, D. Belo, A Methyl-Substituted Thiophene-Tetrathiafulvalene Donor and Its Salts, European Journal of Inorganic Chemistry 30 (2015) 5003-5010, DOI: 10.1002/ejic.201500806.

P6- J.B. Vaney, A. Piarristeguy, V. Ohorodniichuck, O. Ferry, A. Pradel, E. Alleno, J. Monnier, E.B. Lopes, A.P. Gonçalves, G. Delaizir, C. Candolfi, A. Dauscher, B. Lenoir, Effective medium theory based modeling of the thermoelectric properties of composites: comparison between predictions and experiments in the glass-crystal composite system  $\text{Si}_{10}\text{As}_{15}\text{Te}_{75}$   $\text{Bi}_{0.4}\text{Sb}_{1.6}\text{Te}_3$ , Journal of Materials Chemistry C 42 (2015) 11090-11098, DOI: 10.1039/c5tc02087e

P7- C. Morin, S. Corallini, J. Carreau, J.B. Vaney, G. Delaizir, J.C. Crivello, E.B. Lopes, A. Piarristeguy, J. Monnier, C. Candolfi, V. Nassif, G.J. Cuello, A. Pradel, A.P. Gonçalves, B. Lenoir, E. Alleno, Polymorphism in Thermoelectric  $\text{As}_2\text{Te}_3$ , Inorganic Chemistry 54 (2015) 9936-9947, DOI: 10.1021/acs.inorgchem.5b01676.

P8- J.B. Vaney , J. Carreau, G. Delaizir, C. Morin, J. Monnier, E. Alleno, A. Piarristeguy, A. Pradel, A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, C. Candolfi, A. Dauscher, B. Lenoir, Thermoelectric Properties of the  $\alpha$ - $\text{As}_2\text{Te}_3$  Crystalline Phase, Journal Electronic Materials (2015) 1-6, DOI: 10.1007/s11664-015-4063-3.

P9 J.-B. Vaney, J. Carreau, G. Delaizir, A. Pradel, A. Piarristeguy, E. Alleno, J. Monnier, A.P. Gonçalves, C. Candolfi, A. Dauscher, B. Lenoir, "High Temperature Thermoelectric Properties of Sn-Doped  $\beta$ - $\text{As}_2\text{Te}_3$ , Advanced Electronic Materials (2015) 1400008, DOI: 10.1002/aelm.201400008.

P10- J.B. Vaney , J. Carreau, G. Delaizir, C. Morin, J. Monnier, E. Alleno, A. Piarristeguy, A. Pradel, A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, C. Candolfi, A. Dauscher, B. Lenoir, Low-Temperature Transport Properties of Bi-Substituted  $\beta$ -As<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> Compounds, Journal Electronic materials 45 (2016) 1786–1791, DOI: 10.1007/s11664-015-4227-1

P11- J.B. Vaney, J. Carreau, G. Delaizir, A. Piarristeguy, A. Pradel, E. Alleno, J. Monnier, E.B. Lopes, A.P. Gonçalves, A. Dauscher, C. Candolfi, B. Lenoir, High thermoelectric performance in Sn-substituted alpha-As<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, Journal Materials Chemistry C 4 (2016) 2329-2338, DOI: 10.1039/c5tc04267d.

P12- J.B. Vaney, J. Carreau, G. Delaizir, C. Morin, J. Monnier, E. Alleno, A. Piarristeguy, A. Pradel, A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, C. Candolfi, A. Dauscher, B. Lenoir, Thermoelectric Properties of the alpha-As<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> Crystalline Phase, Journal Electronic Materials 45 (2016) 1447-1452, DOI: 10.1007/s11664-015-4063-3.

P13- A. P. Gonçalves, E. B. Lopes, J. Monnier, J. Bourgon, J. B. Vaney, A. Piarristeguy, A. Pradel, B. Lenoir, G. Delaizir, M.F.C. Pereira, E. Alleno, C. Godart, Fast and scalable preparation of tetrahedrite for thermoelectrics via glass crystallization, Journal Alloys Compounds 664 (2016) 209-217, DOI: 10.1016/j.jallcom.2015.12.213.

P14- J.-B. Vaney, J.-C. Crivello, C. Morin, G. Delaizir, J. Carreau, A. Piarristeguy, J. Monnier, E. Alleno, A. Pradel, E. B. Lopes, A. P. Gonçalves, A. Dauscher, C. Candolfi and B. Lenoir, Electronic structure, low-temperature transport and thermodynamic properties of polymorphic beta-As<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, RSC Advances 6 (2016) 52048, DOI: 10.1039/C6RA01770C.

P15- J.-B. Vaney, G. Delaizir, A. Piarristeguy, J. Monnier, E. Alleno, E. B. Lopes, A. P. Gonçalves, A. Pradel, A. Dauscher, C. Candolfi, B. Lenoir, High-temperature thermoelectric properties of the  $\beta$ -As<sub>2-x</sub>Bi<sub>x</sub>Te<sub>3</sub> solid solution, APL Materials 4 (2016) 104901, DOI: 10.1063/1.4950947.

P16- A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, B. Villeroy, J. Monnier, C. Godart, B. Lenoir, Effect of Ni, Bi and Se on the tetrahedrite formation, RSC Advances 6 (2016) 102359, DOI: 10.1039/c6ra21482g.

P17- S. Oliveira, I.C. Santos, E.B. Lopes, J.T. Coutinho, L.C.J. Pereira, D. Belo, S. Rabaça, M. Almeida, Charge-Transfer Salts Based on a Dissymmetrical Cyano-Substituted Tetrathiafulvalene Donor, European Journal of Inorganic Chemistry, 8 (2016), 1287-1292, DOI: 10.1002/ejic.201501343

P18- R.A.L. Silva, I.C. Santos, E.B. Lopes, S. Rabaca, J. Vidal-Gancedo, C. Rovira, M. Almeida, D. Belo, DT-TTF Salts with  $[\text{Cu}(\text{dcdmp})_2]$ : The Richness of Different Stoichiometries, Crystal Growth & Design, 16 (2016), 3924-3931, DOI: 10.1021/acs.cgd.6b00484

P19- S. Rabaça, S. Oliveira, I. C. Santos, V. Gama, D. Belo, E. B. Lopes, E. Canadell, M. Almeida, Polymorphism and Superconductivity in Bilayer Molecular Metals  $(\text{CNB-EDT-TTF})_4\text{I}_3$ , Inorganic Chemistry, 55 (2016), 10343-10350 DOI: 10.1021/acs.inorgchem.6b01555

P20- A. P. Gonçalves, E. B. Lopes, J. Monnier, E. Alleno, C. Godart, M. F. Montemor, J. B. Vaney, B. Lenoir, Tetrahedrites for Low Cost and Sustainable Thermoelectrics, Solid State Phenomena 257 (2016), 135-138 DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.257.135

P21- M. M. Andrade, R. A. L. Silva, I. C. Santos, E. B. Lopes, S. Rabaça, L C. J. Pereira, J T. Coutinho, J P. Telo, C. Rovira, M. Almeida, D. Belo, Gold and nickel alkyl substituted bis-thiophenedithiolene complexes: anionic and neutral forms, Inorganic Chemistry Frontiers 4 (2017), 270-280 DOI: 10.1039/C6QI00447D

## **1.4- Comunicações por convite orais e em poster em encontros científicos (Nacionais e Internacionais)**

### **1.4.1- Comunicações Orais**

O1- A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, L.C.J. Pereira, J.C. Waerenborgh, J. Marçalo, A. Cruz, M.S. Henriques, T. Wiss, T. Stora, S. Maskova, L. Havela, The (almost) unexplored world of uranium nanomaterials, 13th International Symposium on Physics of Materials (ISPMA 13), Prague, Czech Republic, 31 August-4 September, 2014, oral.

O2- A.P. Gonçalves, E.B. Lopes , J. Monnier , C. Godart , V. Ohorodniichuk, C. Candolfi, B. Lenoir, Studies on tetrahedrite-based materials for thermoelectric applications, 12th European Conference on Thermoelectrics (ECT2014), Madrid, Spain, 24-26 September 2014,oral.

O3- A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, J.B. Vaney, A. Piarristeguy, A. Pradel, A. Dauscher, B. Lenoir, G. Delaizir, E. Alleno, J. Monnier, C. Godart, Rapid preparation of tetrahedrite samples by glass crystallization, Reunion du GDR Thermoélectricité, Thiais, France, 13-14 October 2014,oral.

O4- D.I. Gorbunov, M.S. Henriques, A.V. Andreev, Z. Arnold, S. Surblé, S. Heathman, J.-C. Griveau, E.B. Lopes, J. Prchal, L. Havela, A.P. Gonçalves, High-pressure effects on the itinerant 5f ferromagnet U<sub>2</sub>Fe<sub>3</sub>Ge, 44èmes Journées des Actinides, Ein Gedi, Israel, 24-29 April 2014, oral.

O5- C. Morin, J. Carreau, J.B. Vaney, G. Delaizir, E. Alleno, A. Piarristeguy, J. Monnier, C. Godart, M. Ribes, A. Pradel, A.P.Gonçalves, E.B. Lopes, C. Candolfi, A. Dauscher, B. Lenoir, Propriétés structurales et microstructurales en température de As<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, Máteriaux2014, Colloque 02-Matériaux pour le stockage et la conversion de l'énergie, Montpellier, France, 24-28 November 2014, oral.

O6- J.B. Vaney, C. Candolfi, V. Ohorodniichuk, A. Piarristeguy, E.B. Lopes, A. Pradel, B. Lenoir, Thermoelectric properties and microstructure of composites based on telluride semiconducting glasses., 12th European Conference on Thermoelectrics- ECT2014, Madrid, Spain 24-26 September 2014, oral.

O7- J.B. Vaney, C. Candolfi, V. Ohorodniichuk, A. Piarristeguy, E.B. Lopes, A. Pradel, B. Lenoir, Composites à base de verres de chalcogenures: une solution pour la thermoélectricité, Reunion du GDR Thermoélectricité, Thiais, France, 13-14 October 2014, oral.

O8- J.B. Vaney, C. Candolfi, V. Ohorodniichuk, A. Piarristeguy, E.B. Lopes, A. Pradel, B. Lenoir, Propriétés thermoélectriques et microstructure de composites à base de verres de chalcogénures, Máteriaux2014, Colloque 02-Matériaux pour le stockage et la conversion de l'énergie, Montpellier, France, 24-28 November 2014, oral.

O9- A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, J.B. Vaney, A. Piarristeguy, A. Pradel, A. Dauscher, B. Lenoir, C. Candolfi, G. Delaizir, J. Monnier, C. Godart, Tetrahedrite synthesis by glass crystallization, 34th Annual International Conference on Thermoelectrics-ICT2015 and 13th European Conference on Thermoelectrics- ECT2015, 28 June-2 July 2015, Dresden, Germany, oral.

O10- S. Oliveira, S. Rabaça, I. C. Santos, E.B. Lopes, E. Canadell, M. Almeida, Bilayer molecular metals (CNB-EDT-TTF)4X. A new prototype of 2D Molecular Conductors, 11th International Symposium on Crystalline Organic Metals; Superconductors and Ferromagnets - ISCOM'2015, Bad Gögging, Germany, September 6-11, 2015, oral.

O11- E.B. Lopes, A. P. Gonçalves, C. Morin, J. Monnier, J.C. Crivello, E. Alleno, A. Piarristeguy, S. Corallini, A. Pradel, J. Carreau, G. Delaizir, J.B. Vaney, C. Candolfi, B. Lenoir, Thermoelectric properties and polymorphism of As<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, C2TN Workshop on Advanced Materials, CTN/IST, Bobadela, Portugal, 21 December 2015, oral.

O12- S. Oliveira, I.C. Santos, E.B. Lopes, J.T. Coutinho, L.C.J. Pereira, D. Belo, E. Canadell, S. Rabaça, M. Almeida, Bilayer molecular metals (CNB-EDT-TTF)4X; new 2D Molecular Conductors, C2TN Workshop on Advanced Materials, CTN/IST, Bobadela, Portugal, 21 December 2015, oral.

O13- R.A.L. Silva, I.C. Santos, J.T. Coutinho, L.C.J. Pereira, E.B. Lopes, S. Rabaça, J.V.-Gancedo, C. Rovira, M. Almeida, D. Belo, The Quest for Molecular Spin-Ladders, C2TN Workshop on Advanced Materials, CTN/IST, Bobadela, Portugal, 21 December 2015, oral.

O14- A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, J. Monnier, E. Alleno, C. Godart, J.-B. Vaney, B. Lenoir, Tetrahedrites: A Way for Sustainable Thermoelectrics?, TMS2016-145th Annual Meeting and Exhibition, Nashville, Tennessee, EUA, 14 a 18 de Fevereiro de 2016, oral convidada.

O15- A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, J. Monnier, E. Alleno, C. Godart, M.F. Montemor, J.-B. Vaney, B. Lenoir, Tetrahedrites for low cost and sustainable thermoelectrics, 20th International Conference on Solid Compounds of Transition Elements (SCTE-2016), Zaragoza, Spain, from April 11th to 15th, 2016, oral.

O16- S. Rabaça, S. Oliveira, V. Gama, I.C. Santos, E.B. Lopes, D. Belo, E. Canadell, and M. Almeida, 2D Molecular Bilayer Conductors; (CNB-EDT-TTF)4X, 6th EuCheMS Chemistry Congress, Sevilha, Spain, 11-15 September 2016, oral.

O17- S. Oliveira, V. Gama, I.C. Santos, E.B. Lopes, D. Belo, S. Rabaça, E. Canadell, M. Almeida, Bilayer Molecular Metals, C2TN Workshop on Advanced Materials, CTN, IST, Bobadela, Portugal, November 10, 2016, oral.

#### **1.4.2- Comunicações em Paineis.**

Pa1- E.B. Lopes, A.P. Gonçalves, J. Monnier, C. Godart, J.B. Vaney, C. Candolfi, B. Lenoir, Electrical transport properties of skinnerite-based materials, 12th European Conference on Thermoelectrics- ECT2014, Madrid, Spain, 24-26 September 2014, poster.

Pa2- S. Rabaça, I.C. Santos, E. B. Lopes and M. Almeida, S. Oliveira, Charge transfer salts of a new asymmetric TTF donor with Cyano Coordinating Groups, 10th Inorganic Chemistry Conference of the Portuguese Society of Chemistry, Costa da Caparica, Portugal, 11-12 April, 2014.

Pa3- R.A.L. Silva, A.I.S. Neves, E.B. Lopes, I.C. Santos, M.L. Afonso, J.T. Coutinho, L.C.J. Pereira, C. Rovira, M. Almeida, D. Belo, Charge Transfer salts based on a  $\alpha$ -DT-TTF, 10th Inorganic Chemistry Conference of the Portuguese Society of Chemistry, Costa Caparica, 11-12 April 2014.

Pa4- B. Lenoir, J.B. Vaney, J. Carreau, G. Delaizir, A. Pradel, A. Piarristeguy, C. Morin, E. Alleno, J. Monnier, E.B. Lopes, A.P. Gonçalves, C. Candolfi, A. Dauscher, Thermoelectric properties of the  $\beta$ -As<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> compounds, 34th Annual International Conference on Thermoelectrics-ICT2015 and 13th European Conference on Thermoelectrics- ECT2015, 28 June-2 July 2015, Dresden, Germany, Poster

Pa5- C. Morin, J. Carreau, J.B. Vaney, S. Corallini, G. Delaizir, J.C: Crivello, E.B. Lopes, A. Piarristeguy, J. Monnier, C. Candolfi, M. Ribes, A. Pradel, A.P. Gonçalves, B. Lenoir, E. Alleno, Polymorphism in thermoelectric As<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, 34th Annual International Conference on Thermoelectrics-ICT2015 and 13th European Conference on Thermoelectrics-ECT2015, 28 June-2 July 2015, Dresden, Germany, Poster

Pa6- D. Belo, R.A.L. Silva, L.C.J. Pereira, E.B. Lopes, , M. Almeida, The quest for soluble SCMM, 11th International Symposium on Crystalline Organic Metals; Superconductors and Ferromagnets - ISCOM'2015, Bad Gögging, Germany, September 6-11, 2015, poster.

Pa7- R. A. L. Silva, I. C. Santos, J. Wright, J. T. Coutinho, L. C. J. Pereira, E. B. Lopes, S. Rabaça, J. V. Gancedo, C. Rovira, M. Almeida, D. Belo, Spin-Ladder structures and spin-ladder behaviour in thiophenic-TTF salts, 11th International Symposium on Crystalline Organic Metals; Superconductors and Ferromagnets (ISCOM'2015), Bad Gögging, Germany, September 6-11, 2015, poster.

Pa8- S. Oliveira, J. J. Ministro, I. C. Santos, E. B. Lopes, D. Belo, S. Rabaça, E. Canadell, M. Almeida, (CNB-EDT-TTF)<sub>n</sub>X: Charge transfer salts based on a Dissymmetrical TTF donor with Cyano Coordinating Groups, 11th International Symposium on Crystalline Organic Metals; Superconductors and Ferromagnets - ISCOM'2015, Bad Gögging, Germany, September 6-11, 2015, poster.

Pa9- E.B. Lopes, L. C. J. Pereira, J. C. Waerenborgh, M. Almeida, Baixas Temperaturas e Campos Magnéticos Intensos na Caracterização Eléctrica e Magnética de Materiais, 2º Workshop Plataforma IST-Nanotecnologia e Materiais. Os Materiais e a Industria Nacional, IST, Lisboa, 14-15 September 2015, poster.

Pa10- A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, L.M. Ferreira, M.F. Montemor, J. Monnier, Oxidation studies of tetrahedrites, 14th European Conference on Thermoelectrics, Lisbon, Portugal, September 20-23, 2016, poster.

Pa11- E.B. Lopes, A.P. Gonçalves, J. Monnier, J. Bourgon, J.-B. Vaney, A. Piarristeguy, A. Pradel, B. Lenoir, G. Delaizir, M.F.C. Pereira, E. Alleno, C. Godart, Tetrahedrite synthesis by glass crystallization, 14th European Conference on Thermoelectrics, Lisbon, Portugal, September 20-23, 2016, poster.

Pa12- J.-B. Vaney, G. Delaizir, A. Pradel, A. Piarristeguy, E. Alleno, J. Monnier, E.B.Lopes, A.P. Gonçalves, C. Candolfi, A. Dauscher, B. Lenoir, Thermoelectric Properties of iodine-doped  $\beta$ -As<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, 14th European Conference on Thermoelectrics, Lisbon, Portugal, September 20-23, 2016, poster.

Pa13- C. Morin, J. Monnier, J.-B. Vaney, A. Piarristeguy, J. Carreau, G. Delaizir, C. Candolfi, B. Lenoir, A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, A. Pradel, A. Dauscher, E. Alleno, Ball milling effect on the thermoelectric properties of glass-ceramic Cu-As-Te materials, 14th European Conference on Thermoelectrics, Lisbon, Portugal, September 20-23, 2016, poster.

### **3- Actividades de Formação avançada e Docência**

#### **3.1.1- Formação de Estudantes em Teses de Doutoramento**

- Formação da estudante de Doutoramento do Instituto Superior Técnico, Rafaela Antunes Leão da Silva no âmbito da Cadeira de Técnicas Experimentais Avançadas, na orientação do trabalho “Electrical Transport Properties of Molecular Conductors“, concluído em Novembro de 2016.

- Formação da estudante de Doutoramento do Instituto Superior Técnico, Sandrina Oliveira Simões no âmbito da Cadeira de Técnicas Experimentais Avançadas, na orientação do trabalho “Electrical Transport Properties of Molecular Conductors“, concluído em Novembro de 2016.

#### **3.1.2 Actividades Lectivas**

- Trabalho experimental “Determinação do factor de potência de um termoeléctrico” realizado por dois grupos (de 3 estudantes) do 3º ano do curso de Mestrado Integrado em Engenharia Física Tecnológica MEFT do IST, no âmbito da cadeira de Laboratório de Física Experimental Avançada.

### **3.2 Participação em júris, comissões, órgãos directivos de sociedades científicas**

#### **Participação em Júris de Provas Académicas**

##### **Júris de Provas Académicas de Doutoramento**

- Vladislav Andreevich Kolotygin, Provas de doutoramento em Ciência e Engenharia de Materiais, tese intitulada “ Materiais à base de Óxidos com Estrutura do Tipo Perovskite e Compósitos como ânodos de PCES- Propriedades funcionais e Comportamento Electroquímico em Células com Electrólitos sólidos à base de Galatos e Silicatos”, Universidade de Aveiro, 27 Fevereiro de 2015.

##### **Júris de Provas Académicas de Mestrado**

- Ana Cláudia Gomes Teixeira, Provas de Mestrado mestrado em Engenharia de Materiais do Instituto Superior Técnico, tese intitulada “Caracterização de Propriedades Térmicas e Elétricas de Compósitos WC-Co”, 12 de Dezembro de 2016.

#### **4.1 Conferências e Encontros Científicos**

Foi responsável ou colaborou na organização das seguintes conferências e encontros científicos:

14th European Conference on Thermoelectrics ECT2016, Lisbon, Portugal, September 20-23, 2016, Membro do comité de organização

#### **4.2- Outros**

Responsável pelo novo Liquefactor Linde L70 da série TCF e que está instalado desde Julho 2010. O novo Liquefactor encontra-se em funcionamento produzindo cerca de 10000 litros de Hélio líquido anualmente e tem uma produção de 27 l/hora o que permite responder rapidamente às necessidades de hélio líquido tanto para os utilizadores de equipamentos criogénicos do IST/CTN como para outros utilizadores externos.

Sacavém, 30 de Março de 2017.

Elsa Branco Lopes