

RELATÓRIO DE ACTIVIDADE DE
JOÃO CARLOS BENTES WAERENBORGH

Investigador Principal
do Instituto Superior Técnico
Centro de Ciências e Tecnologias Nucleares (C²TN)

(ABRIL 2011 - MARÇO 2014)

Campus Tecnológico e Nuclear, Instituto Superior Técnico,
Universidade de Lisboa

João Carlos Bentes Waerenborgh

<http://orcid.org/0000-0001-6171-4099>

Scopus Author ID: 7003400700

Researcher ID C-3701-2011

Investigador Principal

- UCQR do Instituto Tecnológico e Nuclear (ITN) até Fevereiro de 2012
- UCQR do IST/ITN de Março de 2012 a Setembro de 2013
- C²TN (grupo "Estado Sólido") do IST desde Setembro de 2013

RESUMO DA ACTIVIDADE

A actividade de investigação foi desenvolvida no domínio da Química e Física do Estado Sólido com aplicação nas áreas de Ciência dos Materiais, Ciências da Terra e Preservação do Património Cultural.

A par da actividade de investigação fui responsável pelo Laboratório de Espectroscopia Mössbauer e pela respectiva protecção radiológica. Este laboratório do ex-Instituto Tecnológico e Nuclear (ITN) está actualmente integrado no Centro de Ciências e Tecnologias Nucleares (C²TN) do CTN, IST.

O trabalho decorreu no âmbito dos projectos de investigação financiados pela Fundação para a Ciência e Tecnologia, referidos no Anexo I. No presente triénio fui co-autor de 25 comunicações em Encontros e Congressos Científicos Internacionais (Anexo III), 1 capítulo de livro, 1 acta de um Congresso Ibérico e 33 artigos publicados em revistas com arbitragem científica e citação internacional, nomeadamente Scopus e Thomson ISI Web of Knowledge (Anexo IV).

Tenho sido com regularidade 'Referee' de artigos submetidos a revistas científicas internacionais na área da Ciência de Materiais: *Journal of Alloys and Compounds*, *Journal of Nanomaterials*, *Journal of Electroceramics*, etc. e de um projecto de investigação (*Mutual interactions of compounds containing iron in different oxidation states studied by means of Mössbauer spectroscopy*) submetido à *Czech Science Foundation*.

No que respeita à formação de investigadores orientei 1 pós-doutoramento e dei formação a estudantes de Doutoramento e Mestrado em espectroscopia Mössbauer (Anexo II).

Os resultados obtidos podem ser consultados em pormenor nos artigos cuja lista se apresenta no Anexo IV. As cópias dos artigos estão disponíveis em papel ou em forma digital (telefone interno 6220, e-mail jcarlos@ctn.ist.utl.pt)

Óxidos condutores mistos para células de combustível e electrocatálise

Investigação no âmbito dos projectos [Pr1] e [Pr2] com o objectivo de desenvolver novos materiais para as tecnologias electroquímicas relacionadas com a produção e transformação de energia, tais como as que utilizam pilhas de combustível de electrólito sólido ou membranas cerâmicas para a conversão do gás natural e biogás.

Neste triénio prepararam-se e caracterizaram-se novos materiais e estudou-se por espectroscopia Mössbauer de electrões de conversão o estado químico do ferro e as fases metaestáveis que se formam na superfície dos

eléctrodos em condições de funcionamento, durante os processos de oxidação parcial do metano. Salienta-se ainda a síntese de $\text{Sr}_4\text{Fe}_6\text{O}_{12}$ por redução topotáctica, cuja estrutura apresenta pares de tetraedros $\text{Fe}^{2.5+}\text{O}_4$ ligados por arestas, e de compostos da família $\text{YBa}(\text{Co}_{4-x}\text{Fe}_x)\text{O}_{7+\delta}$, promissores para armazenagem de oxigénio.

Comunicações em Congressos Internacionais (ver Anexo II) e publicações [A1, A2, A5, A7, A9-11, A16, A20, A22, A23, A26, A27, A32, A33]. Neste domínio orientei um estudante de pós-doutoramento [For1] e dois bolsiros de investigação MSc [For2, For3].

Colaboração com:

- Dept. Cerâmica e Vidro da Universidade de Aveiro (Prof. J. Frade, Prof. V. V. Kharton).
- State Key Laboratory of Rare Earth Resource Utilization, Institute of Applied Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Changchun, P. R. China (Prof. Min Feng Lü).
- CRISMAT, CNRS-ENSICAEN, Caen, France (Prof. B. Raveau).

Magnetismo e electrões fortemente correlacionados em intermetálicos

O comportamento magnético ou dos electrões fortemente correlacionados em compostos intermetálicos de metais de transição *d* e *f* tem sido desde há vários anos objecto de estudo do grupo do Estado Sólido do actual C²TN. Neste triénio foram caracterizados novos intermetálicos ternários dos sistemas U-Fe-Ge e U-Fe-Sb cujas propriedades magnéticas se devem à sub-rede do U mantendo-se a sub-rede do Fe no estado paramagnético. Os trabalhos, divulgados em Conferências e em publicações [A3, A4, A15, A18, A19] envolveram a colaboração com as equipas de investigação de:

- Laboratoire de Chimie du Solide et Inorganique Moléculaire, Univ. Rennes, France (Prof. H. Noël, O. Tougaït).
- Dept. Condensed Matter Physics, Charles University, Praga, Czech Republic (Prof. L. Havela).
- Faculty of Humanities and Natural Sciences, Prešov Univ., Slovakia (Prof. Marian Reiffers).

Estudo por espectroscopia Mössbauer de vários materiais

Estudo por espectroscopia Mössbauer de materiais moleculares:

Estudo da estrutura electrónica e propriedades magnéticas do Fe em diversos compostos moleculares, nomeadamente materiais multifuncionais com transição de spin e líquidos iónicos. Publicações [A8, A14, A17, A21, A24, A25, A28-30].

Colaboração com outros membros do grupo de "Estado Sólido" do C²TN, IST, e com:

- Dept. Física, FCT da Univ. Coimbra (Dr. M.R. Marques da Silva)
- Dept. Química Inorgânica, Facultat de Química, Universitat de València, Spain (Prof. E. Coronado)
- Serveis Centrals d'Instrumentació Científica, Universitat Jaume I, Castelló, Spain (Prof. R. Llusar).
- Facultad de Ciencias, Universidad de Cantabria, Santander, Spain (Prof. I. de Pedro)

Estudos de preservação do património cultural e ambiente

Estudo por espectroscopia Mössbauer de amostras de pedras da Sé de Lisboa e das rochas calcárias utilizadas como material de construção. Colaboração na respectiva análise mineralógica [Anexo IV, E1].

Caracterização química e mineralógica de solos e sedimentos na bacia de drenagem ácida da área mineira de Aljustrel [A12], de calcretos em lagoas costeiras, num clima semi-árido [A6], de solos de origem vulcânica desenvolvidos num clima semi-árido na Ilha do Fogo, Cabo Verde [A31]. Colaboração com o grupo "Engenharia e Técnicas Nucleares" do C²TN, IST, e com:

- Centro de Petrologia e Geoquímica do IST, Lisboa (Dr. M.A.Dionísio)
- CREMINER/LARSyS, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Portugal (Prof. M. Gonçalves)

Coordenação do Laboratório de Espectroscopia Mössbauer

Neste triénio mantiveram-se colaborações com as instituições de Investigação acima discriminadas, que conduziram à publicação de resultados em trabalhos conjuntos (Anexos III e IV). Esta actividade também se formalizou em projectos de investigação para os quais a espectroscopia Mössbauer contribui de forma determinante (ver Anexo I). Prosseguiu também o trabalho de colaboração e de apoio à investigação desenvolvida por linhas de actividade do C²TN, IST. Foi dada formação em espectroscopia Mössbauer a bolseiros de investigação e estudantes de *MSc* e *PhD* referidos no Anexo II.

Em 2012 actualizei o Programa de Protecção Radiológica do Lab. de Espectroscopia Mössbauer e a respectiva licença de funcionamento.

Neste triénio foram feitos estudos por Espectroscopia Mössbauer de transmissão de raios γ com absorvedores a temperaturas entre 300 e 1.4 K e espectroscopia com electrões de conversão interna. Desenvolveu-se um novo porta-amostras para amostras no estado líquido à temperatura ambiente (com o objectivo de estudar líquidos iónicos).

Comissões Científicas

- Membro da Comissão Científica do IX Congresso Ibérico de Arqueometria, Outubro de 2011, Lisboa, Portugal (<http://www.cia-ix.itn.pt/>)
- Membro do *International Advisory Committee* do *International Symposium on the Industrial Applications of the Mössbauer Effect*, Dalian, China, Setembro 2012. (<http://www.medc.dicp.ac.cn/conference/ISIAME2012ORG/>)

ANEXO I

Projectos de investigação financiados pela Fundação para a Ciência e a Tecnologia desde Abril 2011 a Março de 2014.

Investigador coordenador do projecto:

[Pr1] "Novel layered ferrite materials with mixed ionic-electronic conductivity for applications in alternative energy sources" (PTDC/CTM/64357/2006) (1 Janeiro 2008 - 31 Agosto 2011).

Investigador responsável pela participação do ITN nos projectos:

[Pr2] "Novel methodological approaches to analyze ion transport mechanism in complex crystal lattices and to forecast performance-determining parameters of the oxide materials" (PTDC/CTM-CER/114561/2009). Coordenação: E. Naumovich, Universidade de Aveiro, CICECO. (1 Janeiro 2011 - 31 Dezembro 2013).

Membro da equipa de investigação:

[Pr3] "Study and development of new molecular magnets" ("Estudo e desenvolvimento de novos magnetos moleculares") (PTDC/FIS/102284/2008). Coordenação: M. Ramos Marques da Silva. Dept. Física da Univ. de Coimbra (2 Maio 2010 - 1 Maio 2013).

Membro da equipa de projectos de Cooperação Transnacional FCT

[Pr4] Structural, electronic, magnetic, and thermal properties of ternary Uranium-Iron antimonides. Responsáveis: Marian Reiffers (Faculty of Humanities and Natural Sciences, Presov Univ., Slovakia), António Cândido Lampreia Pereira Gonçalves 2013-2014

Membro da equipa de projectos estratégicos financiados pela FCT

Membro Integrado "Strategic Project - UI 261 - 2011-2012" (PEst-OE/FIS/UI0261/2011) "Centro de Física da Matéria Condensada" Coordenador Científico *Maria Margarida da Fonseca Beja Godinho* (Fac Ciências da Univ. Lisboa)

Membro Colaborador "Strategic Project - UI 36 - 2011-2012" (PEst-C/FIS/UI0036/2011) "Centro de Estudos de Materiais por Difracção de Raios X" Coordenador Científico *José António de Carvalho Paixão* (Fac Ciências e Tecnologia da Univ. Coimbra)

Candidaturas a financiamento (membro da equipa)

- "Laboratório de Baixas Temperaturas e Campos Magnéticos Intensos" (ROTEIRO/0068/2013). Coordenador M.Almeida (IST). Categoria atribuída 2. Recomendado para integração no roteiro.

Projectos submetidos e não financiados (membro da equipa ou coordenador no IST)

- "Environmentally friendly and eficiente methods for extraction of rare earth elements from primary and secondary sources" (ENVIREE) (2013). ERA-MIN First Joint Call, FP7, Coordenador: Prof. Christian Ekberg, Chalmers University of Technology, Sweden. Coordenador no IST: M.I. Paiva.
- "Breakthrough Solutions for Mineral Extraction and Processing in Extreme Environments" (DeepElectroMetal). FP7-NMP-2013-LARGE-7. NMP.2013.4.1-2. Coordenador: Prof. Ludo Diels, Flemish Institute for Technological Research (VITO), Belgium. Coordenador no IST: M.I. Prudêncio.
- "Clays and Nanoparticles in Human Health: Radioactivity, Antimicroorganisms activity, and crystal chemistry". (PTDC/GEO-FIQ/2191/2012). Coordenador M.I. Dias, IST.
- "Layered mixed-conducting composites for intermediate-temperature solid oxide fuel cells and membranes" (PTDC/CTM-MAT/1311/2012). Coordenador V. Kharton, Univ. Aveiro. Coordenador no IST: J.C.Waerenborgh.
- "Condensed Matter at the Nanoscale - physical, chemical and biological systems" (RECI/FIS-NAN/0325/2012). Coordenador: M. M. Godinho, Fac. Ciências da Univ. Lisboa.
- "Molecular and crystal engineering of multifunctional materials with unconventional electronic and magnetic properties" (EXCL/QEQ-SUP/0184/2012). Coordenador M. Almeida, IST.

ANEXO II - Formação e enquadramento de Pós doutorados e estudantes de Doutorado desde Abril 2011 a Março de 2014

Supervisão de bolsa de pós-doutoramento

[For1] Ekaterina Tsipis (Janeiro de 2007 - Abril de 2013) bolsa de Pos-Doutoramento FCT (SFRH/BPD/28629/2006) "Novel ferrite-based mixed conductors for electrochemical applications" (Doutorada em Ciência e Engenharia de Materiais, Dept. Engenharia Cerâmica e do Vidro da Univ. Aveiro).

Supervisão de bolsas de investigação (MSc)

[For2] Marcella Citlalim Quevedo Reyes (21 de Abril de 2013 - 30 de Setembro 2013), bolsa de investigação (MSc) no projecto "Novel methodological approaches to analyze ion transport mechanism in complex crystal lattices and to forecast performance determining parameters of the oxide materials" (PhD Eng Química, Univ. Nacional Autonoma de Mexico).

[For3] Joana Raquel Teixeira Coutinho (12 de Setembro de 2012 - 19 de Abril de 2013), bolsa de investigação (MSc) no projecto "Novel methodological approaches to analyze ion transport mechanism in complex crystal lattices and to forecast performance determining parameters of the oxide materials" (MSc Química, Instituto Superior Técnico, Univ. Técnica de Lisboa).

Co-supervisão de bolsa de pós-doutoramento

[For4] Ekaterina Tsipis (Maio de 2013 - Julho de 2013) bolsa de Pos-Doutoramento FCT (SFRH/BPD/88938/2012) "Novel oxygen- and hydrogen-permeable mixed-conducting membranes for intermediate-temperature and unsteady-state operation" (Doutorada em Ciência e Engenharia de Materiais, Dept. Engenharia Cerâmica e do Vidro da Univ. Aveiro).

Teses de Doutorado ou de Mestrado onde se incluem resultados de espectroscopia Mössbauer obtidos em trabalhos de colaboração.

[For5] "Two-dimensional materials: from hybrid magnetic multilayers to superconducting single layers" Efrén Navarro Moratalla, *PhD* Nanociencia y Nanotecnología. Dirigida por el Dr Eugenio Coronado Miralles y el Dr Carlos Martí Gastaldo, Universidad de Valencia, Spain (2013).

[For6] "Complexos de Metais de Transição Baseados em Ligandos Ditiolatos Tiofênicos para Compostos Condutores e Magnéticos", Ana Isabel Soares das Neves, *PhD* in Chemistry. Supervisores: Doutor Manuel Almeida (ITN), Dr. Dulce Belo (ITN) Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa (2013).

[For7] - "Redes heterometálicas e novas arquitecturas supramoleculares baseadas em complexos de metais de transição com ligandos dito-azo" Ana Cláudia Pereira Cerdeira, *PhD* in Chemistry. Supervisores: Doutor Manuel Almeida (ITN), Dr. Dulce Belo (ITN). Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa (2013).

[For8] "Funcionalización química de calcogenuros clúster de Molibdeno con simetría C3 dirigida hacia sus aplicaciones en catálisis y el diseño de materiales" Ivan Sorribes, *PhD* Química Física. Orientador: Rosa Llusar. Universidad Jaume I, Castellon de la Plana, Spain (2012).

[For9] "Variations of actinide magnetism in uranium-based hydrides and other selected systems" PhD in Condensed Matter Physic Anna Maria Adamska, supervisors Ladislav Havela, Nhu-Tarnawska Hoa Kim Ngan, Charles Univ. Prague, Czech Republic (2011).

ANEXO III - Trabalhos apresentados em Conferências e Encontros Científicos dos quais fui co-autor desde Abril 2011 a Março de 2014.

Comunicações orais

ECerS XII, 12th Conf. European Ceramic Society, Stockholm, Sweden, June 19-23, 2011

<http://www.su.se/english/about/news-and-events/events/ecers-xii-12th-conference-of-the-european-ceramic-society-1.17665>

(C1) A. Yaremchenko, V. Kharton, V. Kolotygin, M. Patrakeeve, E. Tsipis, J. Waerenborgh "Mixed conductivity, stability and anode performance of Fe-doped (La,Sr)(Cr,Mg)O_{3-delta} for SOFC applications" (oral)

18th International Conference on Solid State Ionics, Warsaw, Poland, 3-8 July 2011 <http://www.ssi-18.net/>

(C2) E.N. Naumovich, M.V. Patrakeeve, E.V. Tsipis, A.A. Yaremchenko, V.A. Kolotygin, A.V. Kovalevsky, J.C. Waerenborgh, V.V. Kharton "Oxygen deficiency, defect interactions and transport in perovskite-type (Ln,A)(Fe,M)O_{3-δ} (Ln = La, Pr; A = Sr, Ba, Ca; M = Al, Nb)" (oral)

VIII Congresso Ibérico de Geoquímica, Castelo Branco, Portugal, 24-28 September 2011 <http://cigeoq2011.ipcb.pt>

(C3) R. Marques, M.I. Prudêncio, J.C. Waerenborgh, Fernando Rocha, M.I. Dias, E. Ferreira da Silva "Iron and other chemical elements in a paleosol developed on volcanic ash in Fogo island (Cape Verde)" (oral)

10th International Symposium on Ceramic Materials and Components for Energy and Environmental Applications, Dresden, Germany, May 20-22, 2012, www.cmcee12.de

(C4) E.V. Tsipis, V.V. Kharton, V.A. Kolotygin, E.N. Naumovich, M.V. Patrakeeve, A.L. Shaula, A.P. Viskup, J.C. Waerenborgh "Kinetic and thermomechanical stability, oxygen permeability and ionic conductivity of iron-containing mixed conductors for membrane applications" (oral)

Goldschmidt 2012, Montréal, Canada, June 24-29, 2012 <http://www.vmgoldschmidt.org/2012/index.htm>

(C5) Mário A. Gonçalves, João C. Waerenborgh, Flávia Maia, Cláudia Pinto, Cátia Prazeres, Susana Sério "Enhanced metal release from acid mine drainage sediments due to the interaction with municipal waste water" (oral)

4th International Symposium on Structure-Property Relationships in Solid State Materials, Bordeaux, France, 24-29 June 2012 <http://www.spssm4.com/>

(C6) V. Duffort, V. Caignaert, V. Pralong, N. Barrier, B. Raveau, M. Avdeev, E. V. Tsipis, J. C. Waerenborgh, H. Zheng and J. F., Mitchell " Structural and magnetic transitions in the LnBaFe₄O_{7+d} (Ln = Y, Dy-Lu) "114" ferrite family (oral)

9th ISEG - International Symposium on Environmental Geochemistry, Univ. Aveiro, Portugal, 15-22 July 2012 <http://9iseg.web.ua.pt/web/index.php>

(C7) R. Marques, J.C. Waerenborgh, M.I. Prudêncio, F. Rocha, E. Ferreira da Silva "Iron speciation in volcanic soils from Fogo Island (Cape Verde)" (oral)

10th Prague Colloquium on *f*-Electron Systems (PCFES), Prague, Czech Republic, August 21-24 (2012) <http://kfkf.cz/pcfes/>

(C8) M.S. Henriques, D.I. Gorbunov, J.C. Waerenborgh, L.C.J. Pereira, E.B. Lopes, L. Havela, A.V. Andreev, T. Klimczuk, A. Rudajevová, O. Tougait, R. Vilar, AP Gonçalves "Uranium-iron-germanium intermetallic compounds" (oral)

International Conference on Oxide Materials for Electronic Engineering OMEE-2012, Lviv, Ukraine, September 3-7, 2012 <http://www.omee.lp.edu.ua/>

(C9) A.L. Shaula, V.A. Kolotygin, E.N. Naumovich, J.C. Waerenborgh, Y.V. Pyvak, V.V. Kharton "Oxygen ionic transport in brownmillerite type Ca₂Fe₂O_{5+δ} and calcium-ferrite based composites (oral)

43th Journées des Actinides (JdA 2013), Sestri Levante, Italy, 6-9 April 2013 <http://jda2013.spin.cnr.it/>, <http://ec.europa.eu/dgs/jrc/downloads/enlargement/eia2013/2013-itu-a-04.pdf>

(C10) D.I. Gorbunov, M.S. Henriques, J.C. Waerenborgh, L. Havela, A.V. Andreev, Y. Skourski, A.P. Gonçalves "A single crystal study of U₃Fe₄Ge₄ (oral)

(C11) M.S. Henriques, D.I. Gorbunov, J.C. Waerenborgh, L. Havela, A.B. Shick, M. Diviš, A.V. Andreev, A.P. Gonçalves "Peculiar magnetism of U₂Fe₃Ge probed in single crystal studies (oral)

2nd Workshop on Strongly Correlated Systems: From Intermetallics to Molecular Materials, CTN, IST, Bobadela, Portugal, November 11-12, 2013 <http://www.itn.pt/pt/ev/2013/Workshop-SCES-2013.pdf/>

- (C12) A.P.Gonçalves, M.S.Henriques, J. C. Waerenborgh, I. Curlik, S. Il'kovič, M. Reiffers "Crystallographic and Physical Properties of the UFeSb₂ Uranium Antimonide" (oral)
- (C13) B. Vieira, L.C.J.Pereira, J. T. Coutinho, I.C. Santos, J. C. Waerenborgh, V. Gama "A Two-Step Iron(III) Spin Crossover Compound with Symmetry Breaking Spin-State Transition: [Fe(nsal₂-trien)]SCN" (oral)

Comunicações poster

18th International Conference on Solid State Ionics, Warsaw, Poland, 3-8 July 2011 <http://www.ssi-18.net/>

- (C14) A.L. Shaula, M.V. Patrakeev, E.N. Naumovich, J.C. Waerenborgh, V.V. Kharton "Redox behavior and transport properties of Ca₂(Fe,M)₂O_{5+δ} (M = Mn, Co)" (poster)
- (C15) E.V. Tsipis, J.C. Waerenborgh, A.A. Yaremchenko, V.V. Kharton "Surface states of Fe-containing electrodes and membranes in reducing atmospheres: a conversion-electron Mössbauer spectroscopy study" (poster)
- (C16) V.V. Kharton, E.V. Tsipis, Yu.S. Fedotov, E.N. Naumovich, S.M. Mikhalev, L.C.J. Pereira, J.C. Waerenborgh, M. Avdeev, S.I. Bredikhin "Intermediate-temperature oxygen diffusion and intercalation processes in YBaCo₄O_{7+δ} (δ = 0-1.5)" (poster)

Goldschmidt 2011, Prague, Czech Republic, August 14-19, 2011

<http://www.goldschmidt2011.org/abstracts/finalPDFs/1408.pdf>

- (C17) R. Marques, M.I. Prudêncio, J.C. Waerenborgh, F. Rocha, M.I. Dias, E. Ferreira da Silva "Geochemistry and mineralogy of volcanic ash red paleosol from Fogo island (Cape Verde)" (poster)

IX Congresso Ibérico de Arqueometria, ITN, Lisboa, Portugal, 26-28 October 2011. <http://www.cia-ix.itn.pt/>

- (C18) J.C.Waerenborgh, M.I.Prudêncio, M.I.Dias, M.A.Gaspar " Estudo por Espectroscopia Mössbauer da tecnologia de produção da cerâmica cinzenta Romana de Braga (Norte de Portugal)" (poster)

18th International Conference on Solid Compounds of Transition Elements SCTE2012, Lisbon, Portugal 31 march-5th April 2012 <http://scte2012.itn.pt/default.html>

- (C19) J. C. Waerenborgh, E. Tsipis, A.A. Yaremchenko, V. V. Kharton "Surface analysis of ferrite mixed-conducting membranes under air/CH₄ gradient by conversion-electron Mössbauer spectroscopy" (poster)
- (C20) M. Ramos Silva, J.N.J.Nogueira, P.A.O.C.Silva, C. Yuste-Vivas, L.C.J.Pereira, J. C. Waerenborgh "Oxo-bridged tri-nuclear Fe(III) complexes: structural and magnetic properties" (poster)
- (C21) A.P. Gonçalves, M.S. Henriques, L.C.J. Pereira, M. Almeida, L. Havela, J.C. Waerenborgh, E.B. Lopes, S. Mašková, O. Tougait, J.S.Brooks, A. Kiswandhi, E. Steven, T. Klimczuk "Low-temperature properties of orthorhombic UFeGe" (poster)

10th International Symposium on Ceramic Materials and Components for Energy and Environmental Applications, Dresden, Germany, May 20-22, 2012, www.cmcee12.de

- (C22) V.V.Kharton, S.Bredikhin, V.A.Kolotygin, M.F.Lü, E.V.Tsipis, J.C.Waerenborgh, A.A.Yaremchenko "Thermomechanical, transport and anodic properties of perovskite-type (La_{0.75}Sr_{0.25})_{0.95}Cr_{1-x}Fe_xO_{3-δ}" (poster)

Electroceramics XIII, Univ. Twente, Enschede, Netherlands, 24th-27th June 2012

<http://www.electroceramics13.com/>

- (C23) J.F. Monteiro, A.V. Kovalevsky, A. Yaremchenko, J. Waerenborgh, J.R. Frade "Ni/oxide catalyst composites for oxygen electrodes in alkaline media" (poster)

10th International Symposium on Systems with Fast Ionic Transport Chernogolovka, Russia, 1-4 July 2012.

<http://www.issfit10.issi.ru/>

- (C24) E.N. Naumovich, P.V.Anikina, E.V.Tsipis, M.V. Patrakeev, J.C. Waerenborgh, E.N. Naumovich, V.V. Kharton Defect formation and interaction in ruddlesden-popper type Sr₃LaFe_{3-x}Al_xO_{10-δ} " (poster)

Goldschmidt 2013, Florence, Italy, August 25-30, 2013 <http://goldschmidt.info/2013/>

- (C25) R. Marques, M.I. Prudêncio, J. C. Waerenborgh, J. T. Coutinho, F. Rocha, E. Ferreira da Silva, M.I. Dias Buried lava paleosol in NW Fogo island (Cape Verde) – chemical and mineralogical evolution (poster)

Abstracts publicados em Revistas Científicas com citação internacional

- R. Marques, M.I. Prudêncio, J.C. Waerenborgh, F. Rocha, M.I. Dias, E. Ferreira da Silva "Geochemistry and mineralogy of volcanic ash red paleosol from Fogo island (Cape Verde)" *Mineralogical Magazine* 75 (3), (2011) 1408
- M. A. Gonçalves, J.C. Waerenborgh, F. Maia, C. Pinto, C. Prazeres, S. Sérgio "Enhanced metal release from acid mine drainage sediments due to the interaction with municipal waste water" *Mineralogical Magazine* 76 (2012) 1772
- R. Marques, M.I. Prudêncio, J. C. Waerenborgh, J. T. Coutinho, F. Rocha, E. Ferreira da Silva, M.I. Dias "Buried lava paleosol in NW Fogo island (Cape Verde) – chemical and mineralogical evolution" *Mineralogical Magazine* 77 (5), (2013) 1687, DOI:10.1180/minmag.2013.077.5.1

Abstract publicado em livro

- M. I. Prudencio, F. Ruiz, M.I. Dias, E. Galan, J. C. Waerenborgh, M. Abad, I. Gonzalez, "The Semi-Arid Environment of the El Melah Lagoon (NE Tunisia): Closing Evolution to a Future Sabkha" pp. 155-156 in "Environmental Research Summaries" Volume 4, Editors: Danila S. Melekhin and Mikolai F. Dolukhanov, *Nova Science Publishers, Inc.*, (2012) [ISBN: 978-1-62257-601-2]

ANEXO IV Publicações com arbitragem científica desde 2011 a Março de 2014.

Capítulo de livros

- [E1] A. Dionísio, M. A. Sequeira Braga, J. C. Waerenborgh, "Fire-Induced Colour Modifications on Limestones used as Building Materials in Portuguese Monuments. A Case Study for Built Heritage", chapter 7 (pp. 221-244)" in "Advances in Materials Science Research. Volume 13". Ed. Maryann C. Wythers, *Nova Science Publishers, Inc.*, (2012) [ISBN: 978-1-62100-749-4]. [e-book ISBN: 978-1-62100-804-0]

Actas e 'Proceedings' de Congressos

- [P1] Rosa Marques, M.I. Prudêncio, J.C. Waerenborgh, Fernando Rocha, M.I. Dias, E. Ferreira da Silva, "Iron and other chemical elements in a paleosol developed on volcanic ash in Fogo Island (Cape Verde)" "Ferro e outros elementos químicos num paleosolo desenvolvido em cinzas vulcânicas na ilha do Fogo (Cabo Verde)" Proceedings VIII Cong. Iberico de Geoquímica (2011) 411-416

Artigos publicados desde 2011 em revistas com arbitragem científica e citação internacional (Scopus e Thomson ISI Web of Knowledge)

- (A1) E.V. Tsipis, E.N. Naumovich, M.V. Patrakeev, A.A. Yaremchenko, I.P. Marozau, A.V. Kovalevsky, J.C. Waerenborgh, V.V. Kharton "Oxygen deficiency, vacancy clustering and ionic transport in (La,Sr)CoO_{3-δ}" *Solid State Ionics* 192 (2011) 42-48, doi:10.1016/j.ssi.2010.03.029
- (A2) A.A. Yaremchenko, E.V. Tsipis, A.V. Kovalevsky, J.C. Waerenborgh, V.V. Kharton "Stability, oxygen permeability and chemical expansion of Sr(Fe,Al)O_{3-δ} - and Sr(Co,Fe)O_{3-δ}-based membranes" *Solid State Ionics* 192 (2011) 259-268 doi:10.1016/j.ssi.2010.04.026
- (A3) L. Havela, K. Miliyanchuk, A.P. Gonçalves, J.C. Waerenborgh, L.C.J. Pereira, P. Gaczyński, E.B. Lopes, J. Pešička, "Increase of T_C in UFe_{2+x} synthesized by ultrafast cooling" *Intermetallics* 19 (2011) 113-120 doi:10.1016/j.intermet.2010.10.006
- (A4) A.M. Adamska, L. Havela, A. Błachowski, K. Ruebenbauer, J. C. Waerenborgh, N.-T.H. Kim-Ngan, A. V. Kolomiets "Hydrogen absorption and ⁵⁷Fe Mössbauer effect in UFeGe" *J. Alloys and Comp.* 509 (2011) 5453-5459 doi:10.1016/j.jallcom.2011.02.096
- (A5) E.V. Tsipis, J.C. Waerenborgh, V.V. Kharton "Surface states and stability of iron-containing perovskite electrodes: employing the potential of conversion-electron Mössbauer spectroscopy" *Electrochemistry Communications* 13 (2011) 685-688 doi: 10.1016/j.elecom.2011.04.009
- (A6) M.I. Prudêncio, M.I. Dias, J.C. Waerenborgh, M.J. Trindade, F. Ruiz, R. Marques, M.A. Gouveia, M. Abad, Rare earth and other trace and major elemental distribution in a pedogenic calcrete profile (Slimene, NE Tunisia), *Catena* 87 (2011) 147-156, doi:10.1016/j.catena.2011.05.018.
- (A7) João C. Waerenborgh, Ekaterina V. Tsipis, Aleksey A. Yaremchenko, Vladislav V. Kharton "Surface analysis of mixed-conducting ferrite membranes by the conversion-electron Mössbauer spectroscopy" *J. Solid State Chem.* 184 (2011) 2610-2614, doi:10.1016/j.jssc.2011.07.003
- (A8) M. Clemente-León, E. Coronado, M. López-Jordà, J.C. Waerenborgh "Multifunctional magnetic materials obtained by insertion of spin crossover Fe^{III} complexes into chiral 3D bimetallic oxalate-based ferromagnets" *Inorg. Chem.* 50 (2011) 9122-9130 doi:10.1021/ic201293f
- (A9) J.C. Waerenborgh, E.V. Tsipis, L.C.J. Pereira, M. Avdeev, E.N. Naumovich, V.V. Kharton "Magnetization, Mössbauer and isothermal dilatometric behavior of oxidized YBa(Co,Fe)₄O_{7+δ}" *Dalton Trans.* 41 (2012) 667-678 DOI:10.1039/C1DT11212K
- (A10) M.F. Lü, E.V. Tsipis, J.C. Waerenborgh, A.A. Yaremchenko, V.A. Kolotygin, S. Bredikhin, V.V. Kharton "Thermomechanical, transport and anodic properties of perovskite-type (La_{0.75}Sr_{0.25})_{0.95}Cr_{1-x}Fe_xO_{3-δ}" *Journal of Power Sources* 206 (2012) 59-69, doi:10.1016/j.jpowsour.2012.01.100

- (A11) A.L. Shaula, A.A. Markov, E.N. Naumovich, J.C. Waerenborgh, Y.V. Pivak, V.V. Kharton "Redox behavior and transport properties of brownmillerite $\text{Ca}_2(\text{Fe},\text{M})_2\text{O}_{5\pm\delta}$ (M= Mn, Co)" *Solid State Ionics* 225 (2012) 206-210 doi:10.1016/j.ssi.2011.11.016
- (A12) F. Maia, C. Pinto, J.C. Waerenborgh, M.A. Gonçalves, C. Prazeres, O. Carreira, S. Sério, "Metal Partitioning in Sediments and Mineralogical Controls on the Acid Mine Drainage in Ribeira da Água Forte (Aljustrel, Iberian Pyrite Belt, Southern Portugal)" *Appl. Geochem.* 27 (2012) 1063-1080 <http://dx.doi.org/10.1016/j.apgeochem.2012.02.036>
- (A13) Minfeng Lü, Xiaolong Deng, João C. Waerenborgh, Xiaojie Wu, Jian Meng "Redox chemistry and magnetism of $\text{LaSrM}_{0.5}\text{Ru}_{0.5}\text{O}_{4\pm\delta}$ (M = Co, Ni and Zn) Ruddlesden Popper phases" *Dalton Trans.* 41 (2012) 11507-11518 doi:10.1039/C2DT31462B
- (A14) Ivan Sorribes, Francesc Lloret, Joao C. Waerenborgh, Victor Polo, Rosa Llusar, Cristian Vicent "Cubane-type $\text{Mo}_3\text{FeS}_4^{4+,5+}$ Complexes Containing Outer Diphosphane Ligands: Ligand Substitution Reactions, Spectroscopic Studies and Electronic Structure" *Inorg. Chem.* 51 (2012) 10512-10521 dx.doi.org/10.1021/ic300368z
- (A15) D. Berthebaud, O. Tougait, M. Potel, E.B. Lopes, J.C. Waerenborgh, A.P. Gonçalves, H. Noël "Crystal structure and electronic properties of the new compound $\text{U}_3\text{Fe}_4\text{Ge}_4$ " *J. Alloys and Comp.* 554 (2013) 408-413 dx.doi.org/10.1016/j.jallcom.2012.11.162.
- (A16) J.F. Monteiro, J.C. Waerenborgh, A.V. Kovalevsky, A. Yaremchenko, J.R. Frade "Mechanical Activation of $\text{Sr}_{0.9}\text{K}_{0.1}\text{FeO}_{3-\delta}$ Electrocatalysts" *J. Solid State Chem.* 198 (2013) 169-175 dx.doi.org/10.1016/j.jssc.2012.10.009.
- (A17) M. Ramos Silva, J. N. J. Nogueira, P. A. O. C. Silva, C. Yuste-Vivas, L. C. J. Pereira, J. C. Waerenborgh "Oxo-bridged trinuclear Fe(III) complexes: structural and magnetic properties", *Solid State Phenomena* 194 (2013) 162-170 doi:10.4028/www.scientific.net/SSP.194.162 (ISSN: 1662-9779)
- (A18) M.S. Henriques, D. I. Gorbunov, J.C. Waerenborgh, L. Havela, A.B. Shick, M. Diviš, A.V. Andreev, A.P. Gonçalves "Unusual 5f magnetism in the $\text{U}_2\text{Fe}_3\text{Ge}$ ternary Laves phase: a single crystal study" *J. Phys.: Condens. Matter* 25 (2013) 066010 doi:10.1088/0953-8984/25/6/066010
- (A19) M.S. Henriques, D.I. Gorbunov, J.C. Waerenborgh, L. Havela, A.V. Andreev, Y. Skourski, A.P. Gonçalves, "Magnetic, thermal, and transport properties of single-crystalline $\text{U}_3\text{Fe}_4\text{Ge}_4$ " *J. Alloys and Comp.* 555 (2013) 304-310 dx.doi.org/10.1016/j.jallcom.2012.12.092
- (A20) E.M. Domingues, E.V. Tsipis, A.A. Yaremchenko, F.M. Figueiredo, J.C. Waerenborgh, A.V. Kovalevsky, J.R. Frade "Redox stability and electrical conductivity of $\text{Fe}_{2.3}\text{Mg}_{0.7}\text{O}_{4\pm\delta}$ spinel prepared by mechanochemical activation" *Journal of the European Ceramic Society* 33 (2013) 1307-1315 dx.doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2012.12.014
- (A21) B. J. C. Vieira, J. T. Coutinho, I. C. Santos, L. C. J. Pereira, J.C. Waerenborgh, Vasco da Gama "[Fe(nsal₂trien)]SCN, A new two-step iron (III) spin crossover compound, with symmetry breaking spin-state transition and an intermediate ordered state." *Inorg. Chem.* 52 (2013) 3845-3850 DOI: 10.1021/ic302533b
- (A22) Min Feng Lü, João C. Waerenborgh, Colin Greaves "Sr₄Fe₆O₁₂: low temperature Fe²⁺ - Fe³⁺ charge order within pairs of edge-linked tetrahedra" *Angewandte Chemie International Edition* 52 (2013) 4833-4836 <http://dx.doi.org/10.1002/anie.201209473>
- (A23) M.V. Patrakeev, A.A. Markov, E.V. Shalaeva, E.V. Tsipis, J.C. Waerenborgh, V.V. Kharton, I.A. Leonidov, V.L. Kozhevnikov "Phase separation-promoted ion conduction in $\text{SrFe}_{0.67}\text{Ta}_{0.33}\text{O}_{3-\delta}$ ceramics" *Solid State Ionics* 244 (2013) 17-22 <http://dx.doi.org/10.1016/j.ssi.2013.05.001>
- (A24) Miguel Clemente-León, Eugenio Coronado, Maurici López-Jordà, João C. Waerenborgh, Cédric Desplanches, Hongfeng Wang, Jean-François Létard, Andreas Hauser, Antoine Tissot "Stimuli responsive hybrid magnets: Tuning the photoinduced spin-crossover in Fe(III) complexes inserted into layered magnets" *J. Amer. Chem. Soc.* 135 (2013) 8655-8667 dx.doi.org/10.1021/ja402674x
- (A25) I. de Pedro, A. García-Saiz, J. González, I. R. de Larramendi, T. Rojo, C.A.M. Afonso, S.P. Simeonov, J. C. Waerenborgh, J.A. Blanco, B. Ramajo, J. R. Fernández, "Magnetic ionic plastic crystal Choline[FeCl₄]" *Phys. Chem. Chem. Phys.* 15 (2013) 12724-12733 DOI: 10.1039/c3cp50749a
- (A26) J.C. Waerenborgh, E.V. Tsipis, J.E. Auckett, C.D. Ling, V.V. Kharton "Magnetic structure of Sr₂Fe₂O₅ brownmillerite by single-crystal Mössbauer spectroscopy" *J. Solid State Chem.* 205 (2013) 5-9 <http://dx.doi.org/10.1016/j.jssc.2013.06.030>

- (A27) V. Duffort, T. Sarkar, V. Caignaert, V. Pralong, B. Raveau, M. Avdeev, A. Cervellino, J.C. Waerenborgh, E.V. Tsipis "Lifting the Geometric Frustration through a Monoclinic Distortion in "114" YBaFe₄O_{7.0}: Magnetism and Transport" *J. Solid State Chem.* 205 (2013) 225-235 <http://dx.doi.org/10.1016/j.jssc.2013.06.002>
- (A28) E. Coronado, M. Giménez-Marqués, C. Martí-Gastaldo, G. Mínguez-Espallargas, E. Navarro-Moratalla, J. C. Waerenborgh, "Hybrid magnetic superconductors formed by TaS₂ layers and spin crossover complexes" *Inorg. Chem.* 52 (2013) 8451-8460 [dx.doi.org: 10.1021/ic400320g](http://dx.doi.org/10.1021/ic400320g)
- (A29) G. Abellán, E. Coronado, C. Martí-Gastaldo, J.C. Waerenborgh, A. Ribera "Interplay Between Chemical Composition and Cation Ordering in the Magnetism of Ni/Fe Layered Double Hydroxides" *Inorganic Chemistry* 52 (2013) 10147-10157 [dx.doi.org//10.1021/ic401576q](http://dx.doi.org/10.1021/ic401576q)
- (A30) S.M.Ostrovsky, O.S.Reu, A.V.Palii, M. Clemente-León, E. Coronado, J. C. Waerenborgh, S.I. Klokishner "Modeling the Magnetic Properties and Mössbauer Spectra of Multifunctional Magnetic Materials Obtained by Insertion of a Spin-Crossover Fe(III) Complex into Bimetallic Oxalate-Based Ferromagnets" *Inorg. Chem.* 52 (2013) 13536-13545 dx.doi.org/10.1021/ic401997w
- (A31) R. Marques, J.C. Waerenborgh, M.I. Prudêncio, M.I. Dias, F. Rocha, E. Ferreira da Silva "Iron speciation in volcanic topsoils from Fogo island (Cape Verde) – iron oxide nanoparticles and trace elements concentrations" *Catena* 113 (2014) 95-106 <http://dx.doi.org/10.1016/j.catena.2013.09.010>
- (A32) A.A. Yaremchenko, V.V. Kharton, V.A. Kolotygin, M.V. Patrakeev, E.V. Tsipis, J.C. Waerenborgh" Mixed conductivity, thermochemical expansion and electrochemical activity of Fe-substituted (La,Sr)(Cr,Mg)O_{3-δ} for solid oxide fuel cell anodes" *Journal of Power Sources* 249 (2014) 483-496 <http://dx.doi.org/10.1016/j.jpowsour.2013.10.129>
- (A33) Minfeng Lü, Xiaolong Deng, João C. Waerenborgh, Xiaojie Wu, Jian Meng, Crystal structure, oxidation state and magnetism of Sr_xLa_{2-x}Cu_{0.5}Ru_{0.5}O₄ (x = 1, 1.5), *J. Solid State Chem.* 211 (2014) 1-7 <http://dx.doi.org/10.1016/j.jssc.2013.11.039>

Sacavém, 28 de Março de 2014

João Carlos Bentes Waerenborgh