

João Guilherme Martins Correia

IST25451

Relatório Triannual de 16-02-2018 a 15-02-2021

APRESENTAÇÃO

1. MISSÃO: RESPONSABILIDADES, OBJECTIVOS, ENQUADRAMENTO
2. TRABALHOS PUBLICADOS & TRABALHO EM CURSO
- A. PUBLICAÇÕES EFETUADAS / APROVADAS NO TRIÉNIO, COMENTADAS
- B. TRABALHOS CIENTÍFICOS EM CURSO E FINALIZAÇÃO, COMENTADOS
- C. TRABALHOS R&D EM CURSO E FINALIZAÇÃO, COMENTADOS
- D. PROJECTOS CIENTÍFICOS E DE FINANCIAMENTO

APÊNDICES

A.1 [Curriculum Vitae](#)

A.2 Relatórios finais dos projetos:

[CERN/FIS-NUC/0005/2017](#) e [CERN/FIS-NUC/0004/2015](#)

1. MISSÃO: RESPONSABILIDADES, OBJECTIVOS, ENQUADRAMENTO

De 2018 a 2021, enquanto Investigador Principal do DECN integrado no C2TN, grupo ETN, tive por missão continuada de assegurar o funcionamento, acesso e utilização da infraestrutura experimental portuguesa no ISOLDE-CERN. Desde 1998 que é da minha responsabilidade a manutenção, o desenvolvimento, a organização e coordenação da execução dos projetos científicos, dos projetos de financiamento e respetivos relatórios, que são o garante da operacionalidade e da razão de ser - científica e de treino - desta infraestrutura.

Património físico e intelectual do CTN-IST e da FCUL, esta infraestrutura experimental da Universidade de Lisboa no estrangeiro, utiliza a panóplia de feixes de iões radioativos produzidos no [ISOLDE](#) para a caracterização de materiais usando técnicas radioativas nucleares (MCRNT- Material's Characterization With Radioactive Nuclear Techniques). Tendo sido desenvolvida e consolidada ao longo de muitos anos de atividade e inovação, tem sido palco para a formação e treino de estudantes de mestrado e doutoramento portugueses e estrangeiros. Neste âmbito tenho sido com regularidade co-orientador / orientador em teses de doutoramento de estudantes das Universidades de Lisboa, Aveiro e Porto.

As tarefas de coordenador das atividades científicas desenvolvidas, de responsável pelo R&D e funcionamento da infraestrutura MCRNT são indissociáveis da minha produtividade científica e, da orientação de estudantes. Da minha atividade diária faz parte o acompanhamento laboratorial e a coordenação local ou à distância, das atividades em curso com estudantes e colegas. Voluntariamente, tenho vindo a adotar uma gestão de opinião mais moderada, relativamente a estratégias para a realização das múltiplas propostas científicas aprovadas pelo INTC (comité científico de avaliação do CERN-ISOLDE). Só assim, se criam lideranças mantendo o entusiasmo, vivacidade e frescura na abordagem em paralelo com a atualidade dos assuntos. Mantenho sempre a proximidade a colaboradores e a novos estudantes oriundos de várias universidades a quem dou, inevitavelmente e com gosto, a formação necessária, por vezes sob a forma de pequenos cursos sobre a teoria da parte física e dos métodos de análise de tratamento de dados e estatísticos aplicados ao trabalho em curso. Dou particular atenção à discussão da viabilidade experimental de uma ideia, ao acompanhamento da análise e interpretação de dados e à orientação científica geral dos múltiplos projetos em curso.

Em paralelo com a atividade científica, da discussão minuciosa de publicações ou novas propostas científicas a submeter ao INTC tenho tido um papel de relevo na parte inovadora aplicada. Designamos por R&D o desenvolvimento e testes de novos equipamentos por nós concebidos e manufaturados indispensáveis à realização e otimização de experiências, frequentemente orientados para a utilização de novos núcleos sonda. De facto, existem elementos tão relevantes como, ex., o oxigénio, berílio, cobre, estanho que só têm isótopos adequados para sondas nanoscópicas com semividas curtas de alguns minutos ou segundos que necessitam de experiências efetuadas em linha no ISOLDE com equipamento dedicado e aquisição de dados especializada (¹¹Be (13.8s), ^{68m}Cu(3.75m), ¹⁹O(27s)). Num outro domínio, temos vindo a melhorar significativamente o processo de implantação de isótopos radioativos em gelo – dedicado a experiências de biofísica e molecular no que diz respeito, em particular, à ergonomia e segurança das manipulações. Tenho-me dedicado também ao refinamento dos métodos de análise que permitem fazer progredir as técnicas numa perspetiva de obter mais informação de dados complexos em medidas de interações nucleares hiperfinas, uma fonte de informação nanoscópica única na proximidade do núcleo sonda inserido no material a estudar.

Noutro âmbito, não tenho participado pessoalmente em muitas conferências internacionais. Os fundos são parcos e dou prioridade ao envio dos estudantes sempre que possível. Obviamente que acompanho o processo de escolha das conferências, elaboração das apresentações orais e posters dos estudantes que oriento diretamente. Tenho recusado alguns convites para apresentações orais em conferências onde não sou completamente financiado. Sem dúvida que o facto do ISOLDE - CERN ser um lugar central facilita os contactos uma vez que além dos encontros internacionais que são agendados no CERN a curiosidade e a visibilidade do CERN atraem pontualmente cientistas de um largo espectro de interesses, por convite ou iniciativa pessoal, e bons estudantes o que facilita grandemente os contactos e o encontro de pontos de convergência e sinergias.

Não tenho tido responsabilidade de tarefas de gestão no contexto do C2TN ou DECN, o que me seria impossível de facto executar, uma vez que não estou com frequência no CTN mas no CERN-ISOLDE, na nossa infraestrutura experimental em missão. Saliento neste âmbito que os relatórios científicos dos projetos de financiamento que coordeno são da minha primeira autoria e, são o espelho mais completo do meu trabalho de gestão, de coordenação e/ou de desenvolvimento, e como tal indissociáveis do conceito deste relatório.

Em suma, no cumprimento da estratégia delineada pelos últimos relatórios trianuais, e numa perspetiva conceptual mais geral, assegurei no laboratório internacional – ISOLDE/CERN, a autonomia e a continuidade da participação de cientistas portugueses que utilizam feixes de iões radioativos com técnicas nucleares aplicadas à investigação e caracterização nanoscópica de materiais. Não há atualmente outro laboratório de produção de isótopos radioativos com a variedade de elementos, altos rendimentos e pureza necessários a estudos aplicados a uma vasta panóplia de interesses em, e.g., física dos materiais, biofísica e medicina. No entanto, quando necessário e possível, de forma complementar, usamos isótopos de vidas longas com elementos de natureza refratária (produzidos com menos intensidade no ISOLDE) por ativação de neutrões no ILL-Grenoble, ou por implantação no separador BONIS do HSKP-Univ Bonn.

Por último gostaria de salientar um aspeto marginal da minha atividade que é mais de observação e de identificação de nichos de atividade de interesse geral onde podemos intervir com preponderância. Um laboratório internacional da natureza do ISOLDE/CERN é um lugar rico de ideias e possibilidades muito para além das minhas atividades diretas. O facto de Portugal ser membro do CERN, que tem excelente visibilidade internacional e nacional, motiva frequentemente a visita de personalidades políticas e académicas de natureza diversa ao CERN, sendo que já visitaram o ISOLDE o Prof. Arlindo quando era presidente do IST e por duas vezes S. Exc. o Ministro da Ciência e Tecnologia, Manuel Heitor, além de outras individualidades acompanhantes. A visita ao ISOLDE foi motivada por duas razões essenciais: porque o CERN considera ser o ISOLDE uma experiência onde Portugal desempenha um papel de relevo com autonomia reconhecida (embora não sejamos membros da colaboração por idiossincrasias que não relevam deste relatório) e, porque o ISOLDE e as suas tecnologias são o garante da existência do projeto MEDICIS-promed - do qual o IST é parceiro através do Grupo de Ciências Radio farmacêuticas (RFG-C2TN).

Para este facto tive alguma responsabilidade pois em 2013, conhecendo as competências e sinergias do CTN, alertei os colegas coordenadores do grupo para o projeto cujo entusiasmo posterior motivou a adesão formal da colaboração Medicis – promed. De notar que o arranque do MEDICIS não tem sido isento de dificuldades como em todos os projetos inovadores. Somente desde 2019 tem havido produção regular de isótopos por separação de massa de alvos produzidos externamente ao CERN (os aceleradores não funcionaram de 2019-2020).

Portugal não é hoje um País marginal dentro da Europa. Existem múltiplas colaborações internacionais de justa paridade e vários mecanismos mais ou menos oficiais de divulgação e apresentação internacional. Há, no entanto, muitas oportunidades concretas de parcerias desconhecidas que só podem germinar através do conhecimento local individual. Em lugares onde participamos, onde de facto a criatividade e originalidade abundam, seja qual for a nossa especialidade é importante estar alerta para temas de intervenção potencialmente interessantes para colegas de outras áreas, permitindo identificar nichos possíveis de realização com autonomia e preponderância por quem é competente.

2. TRABALHOS PUBLICADOS & TRABALHO EM CURSO

NOTA: Os trabalhos aqui referenciados são resultantes dos projetos científicos aprovados no INTC (proposals) funcionando na nossa infraestrutura experimental no ISOLDE, das colaborações definidas nos “proposals” e nos projetos de financiamento que coordeno.

2. A PUBLICAÇÕES EFETUADAS / APROVADAS NO TRIÉNIO, COMENTADAS

Legenda: c.e.: Conversion electron ; DFT= Density Functional Theory ; EC = Emission Channeling ; EFG= Electric Field Gradient ; PAC = Time Differential Perturbed Angular Correlations

Free molecule studies by perturbed γ - γ angular correlation: A new path to accurate nuclear quadrupole moments

H. Haas, J. Röder, J.G. Correia, J. Schell, A.S. Fenta, R.Vianden, E.M.H. Larsen, Patrick A. Aggelund, R.Fromsejer, L.B.S. Hemmingsen, S.P.A. Sauer, D.C. Lupascu, V.S. Amaral and the ISOLDE Collaboration, Physical Review Letters (2021)

<https://doi.org/> (não atribuído ainda)

NOTA: Primeiro trabalho de medidas hiperfinas nucleares efetuado em moléculas no estado gasoso com a técnica de correlações angulares perturbadas. No presente caso de moléculas de di-halogéneos HgX_2 e CdX_2 $X= Cl, Br, I$. A relevância resulta do facto destas moléculas serem sistemas lineares simples onde é possível definir padrões de calibração e efetuar cálculos exatos dos parâmetros hiperfinos e, dessa forma, medir os momentos quadrupolares nucleares de estados excitados com grande precisão. O presente trabalho, que é extensível a muitos outros elementos/isótopos, mediu os momentos quadrupolares dos estados excitados de 158keV do ^{199}Hg e 245keV do ^{111}Cd com precisão de 3% e 1%, respetivamente. Estes dois estados são usados para calibração de momentos quadrupolares nas cadeias isotópica do Hg e Cd e, como estados nucleares sondas predominantes em estudo de materiais e biofísica com a técnica radioativas nuclear PAC.

A MINHA CONTRIBUIÇÃO: experiências, discussão, manuscrito.

A reference compound for ^{199m}Hg PAC spectroscopy

A. Jancsó, J.G. Correia, L. Hemmingsen

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A (2021)

<https://doi.org/> (não atribuído ainda)

NOTA: Um pequeno trabalho de conceção de um standard de calibração da anisotropia angular em experiências de medidas de parâmetros hiperfinos com a técnica de PAC em biofísica, em ambientes líquidos. Uma vez que as amostras podem ter um volume até 1 ml, não sendo fontes pontuais, propomos um standard de calibração com uma preparação química, de forma a que conhecendo a amplitude do observável gerado se possam calibrar as medidas obtidas com amostras reais. Este é um parâmetro fundamental para a quantificação das frações de átomos sondas ligadas em diferentes sítios nas bio-moléculas em estudo.

A MINHA CONTRIBUIÇÃO: experiências, discussão, manuscrito.

Hg adatoms on graphene: A first-principles study

A.S. Fenta, C.O. Amorim, J.N. Gonçalves, N. Fortunato, M.B. Barbosa, J.P. Araujo, M. Houssa, S. Cottenier, M.J. Van Bael, J.G. Correia, V.S. Amaral and L.M.C. Pereira

Journal of Physics: Materials 4, 015002 (2021)

<https://doi.org/10.1088/2515-7639/abc31c>

NOTA: A possibilidade de alterar propriedades do grafeno por dopagem com elementos metálicos é aqui simulada com vista à realização de experiências que possam medir os observáveis / parâmetros hiperfinos obtidos.

A MINHA CONTRIBUIÇÃO: discussão, manuscrito.

Ca₂MnO₄ Structural Path: Following the Negative Thermal Expansion at the Local Scale

P. Rocha-Rodrigues, S.S.M. Santos, G.N.P. Oliveira, T. Leal, I.P. Miranda, A.M. dos Santos, J.G. Correia, L.V.C. Assali, H.M. Petrilli, J.P. Araújo and A.M.L. Lopes
Physical Review B 102 (10):104115, 2020
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.104115>

NOTA: A maior parte dos materiais têm expansão positiva com a temperatura (PTE). Existem poucos materiais que apresentam expansão térmica negativa (NTE), exibindo uma contração de volume com o aumento da temperatura. De entre a família de manganitas denominadas de Ruddlesden-Popper, o caso protótipo Ca₂MnO₄ apresenta a maior expansão térmica negativa uniaxial e neste trabalho detalha-se, e esclarece-se à escala nanoscópica, a evolução e fases envolvidas, em particular na transição NTE-PTE.

A MINHA CONTRIBUIÇÃO: experiências, discussão, manuscrito.

A generalized fitting tool for analysis of two-dimensional channeling patterns

E. David-Bosne, U. Wahl, J.G. Correia, T.A.L. Lima, A. Vantomme and L.M.C. Pereira
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 462, 102 (2020)
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2019.10.029>

NOTA: Este trabalho apresenta uma discussão crítica e detalhada dos métodos de análise em experiências de “emission channeling” e o desenvolvimento de novos programas de análise particularmente adaptados a gerir novos detetores de eletrões altamente pixelados. É um dos trabalhos fundamentais da tese de doutoramento do Eric Bosne, defendida no IST em Outubro de 2020.

A MINHA CONTRIBUIÇÃO: discussão, manuscrito.

Estimating the uncertainties of strain and damage analysis by X-ray diffraction in ion implanted MoO₃

T. D.R. Pereira, S. Magalhães, C. Díaz-Guerra, M. Peres, J.G. Correia, J.G. Marques, A.G. Silva, E. Alves, S. Cardoso, P.P. Freitas and K. Lorenz
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 478, 290 (2020)
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2020.07.016>

NOTA: Trabalho em física de materiais onde as propriedades elétricas são modificadas por defeitos induzidos por feixes de iões no CTN. O MoO₃ é um semicondutor 2D transparente, de gap largo onde se podem ajustar as propriedades elétricas com lacunas/defeitos de oxigénio. Por exemplo, dependendo da estequiometria MoO_x, as amostras mostram comportamento semicondutor para MoO_{3-x} (2 < x ≤ 3) e comportamento metálico para MoO₂. Este estudo é complementar dos que se efetuam no ISOLDE com sondas radioativas.

A MINHA CONTRIBUIÇÃO: discussão, manuscrito.

Local inhomogeneous state in multiferroic SmCrO₃

G.N.P. Oliveira, R.C. Teixeira, R.P. Moreira, J.G. Correia, J.P. Araújo and A.M.L. Lopes
Nature Scientific Reports 10, 4686 (2020)
<https://doi.org/10.1038/s41598-020-61384-6>

NOTA: Orto-cromites de terras raras com estrutura perovskita distorcida (RCrO₃, R = Sm, Gd) têm estado sob forte atenção e debate no que diz respeito à génese da ordem ferroelétrica. Neste nosso trabalho, medidas de EFG (campos hiperfinos), combinadas com cálculos DFT por primeiros princípios mostram a existência de fases emergentes devidas a locais não homogéneos, onde coexistem ambientes regulares não polares e ambientes regulares polares distorcidos, que se começam a desenvolver já a baixas temperaturas.

A MINHA CONTRIBUIÇÃO: experiências, discussão, manuscrito.

Ca₃Mn₂O₇ structural path unraveled by atomic-scale properties: A combined experimental and ab-initio study

P. Rocha-Rodrigues, S.S.M. Santos, I.P. Miranda, G.N.P. Oliveira, J.G. Correia, L.V.C. Assali, H.M. Petrilli, J.P. Araújo and A.M.L. Lopes
Physical Review B 101, 064103 (2020)
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.064103>

NOTA: O caminho de transição de fase estrutural da estrutura polar de baixa temperatura até à fase simétrica mais alta no composto de $\text{Ca}_3\text{Mn}_2\text{O}_7$ (ferroelétrico híbrido impróprio) é investigado aqui à escala nanoscópica. Experiências de medidas hiperfinas são combinadas com cálculos DFT a fim de caracterizar o EFG no local do Ca dentro da faixa de temperatura de 10-1200 K. Os resultados mostram que clusters na fase polar persistem até alta temperatura (500 K). Além disso, mostramos evidência para uma nova transição de fase estrutural ocorrendo acima de 1150 K.
A MINHA CONTRIBUIÇÃO: experiências, discussão, manuscrito.

Direct Structural Identification and Quantification of the Split-Vacancy Configuration for Implanted Sn in Diamond

U. Wahl, J. G. Correia, R. Villarreal, E. Bourgeois, M. Gulka, M. Nesládek, A. Vantomme and L. M. C. Pereira
Physical Review Letters 125, 045301 (2020)
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.045301>

NOTA: na procura de centros de spin quânticos para qubits, a dupla lacuna de átomos de carbono associada a um átomo intersticial de estanho na rede do diamante apresenta condições favoráveis, por ser muito estável, insensível a ruído elétrico devido à simetria de inversão D_{3d} , e proporcionar um centro luminescente de cor na região do vermelho. Neste trabalho mostramos que é possível criar este defeito com grande eficiência por implantação iónica, com grande rendimento luminoso, e ressonância bem definida a 621 nm à temperatura ambiente, sem interferência de defeitos.
A MINHA CONTRIBUIÇÃO: experiências, discussão, manuscrito.

Alternative approach to populate and study the ^{229}Th nuclear clock isomer

M. Verlinde et al.
Physical Review C 100, 024315 (2019)
<https://doi.org/10.1103/PhysRevC.100.024315>

NOTA: o ponto fulcral deste trabalho é a tentativa de caracterização de um estado excitado de muito baixa energia, inferior a 20 eV no ^{229}Th que apresenta condições ideais para aplicação na cronometria de muito alta precisão. De forma a reduzir o decaimento por emissão de eletrões de conversão o Th deve estar num material isolador, tal como o CaF_2 . A nossa contribuição para este trabalho foi o estudo de um aspeto fundamental, que é o lugar que ocupa na rede cristalina o ^{229}Ac (que decai para ^{229}Th) implantado em CaF_2 , com a técnica de “emission channeling”.
A MINHA CONTRIBUIÇÃO: experiências, discussão.

Studying electronic properties in GaN without electrical contacts using γ - γ vs e^- - γ Perturbed Angular Correlations

M.B. Barbosa, J.G. correia, K. Lorenz, R. Vianden and J.P. Araújo
Nature Scientific Reports 9, 15734 (2019)
<https://doi.org/10.1038/s41598-019-52098-5>

NOTA: sugerido nos anos 50 como um método controlado para induzir excitações eletrónicas em átomos sonda e observar a recombinação, após emissão do eletrão de conversão, este trabalho é o primeiro caso publicado onde são efetuadas experiências de medidas hiperfinas usando a técnica de PAC $e^- - \gamma$ e $\gamma - \gamma$ na mesma amostra, sonda radioativa e tratamentos térmicos. Com o objetivo de comparar os observáveis quando se usa o primeiro c.e. da cascata radiativa em vez do raio γ correspondente, nunca antes foi possível efetuar as experiências por razões de ordem experimental de falta de equipamento com a necessária resolução em energia e tempo ($< 1\text{ns}$), apto a adquirir suficiente estatística e, sobretudo, pela falta de capacidade de análise de dados de interações hiperfinas dinâmicas com modelos corretos. Para o sucesso deste trabalho contou o nosso desenvolvimento de um novo programa de primeiros princípios que incorporam hamiltoneanos com todos os estados possíveis e as respetivas probabilidades de transição. Isto dá origem a matrizes para diagonalização gigantescas que hoje podem ser resolvidas em reduzido tempo de cálculo, abrindo a porta a uma série de estudos novos, em particular à possibilidade de medir a variação da mobilidade eletrónica em função da temperatura sem recorrer a contactos elétricos, possibilitando ainda a observação direta de estados excitados do átomo sonda / dopante e o seu tempo de semivida.
A MINHA CONTRIBUIÇÃO: experiências, teoria, discussão, manuscrito.

β decay of ^{133}In : γ emission from neutron-unbound states in ^{133}Sn

M. Piersa et al.

Physical Review C 99, 024304 (2019)

<https://doi.org/10.1103/PhysRevC.99.024304>

NOTA: Medida de estados excitados em ^{133}Sn investigados por meio do decaimento beta de ^{133}In no ISOLDE.

A MINHA CONTRIBUIÇÃO: experiências, manuscrito (no âmbito de “me/nos” preparar para novas experiências com núcleos sonda de Sn dedicados a estudos de interações hiperfinas nucleares em materiais)

Lattice location study of low-fluence ion-implanted ^{124}In in 3C-SiC

A.R.G. Costa, U. Wahl, J. G. Correia, E. David-Bosne, V. Augustyns, T.A.L. Lima Silva, K. Bharuth-Ram, and L. M. C. Pereira

Journal of Applied Physics 125, 215706 (2019)

<https://doi.org/10.1063/1.5097032>

NOTA: O carboneto de silício é um semicondutor de banda larga que, devido à sua estabilidade elétrica e térmica, é adequado para aplicações de alta potência, alta tensão, alta frequência e alta temperatura. Neste trabalho usamos a técnica de EC para mostrar que cerca de 72% de In implantado em 3C-SiC cristalino está em lugares substitucionais do Si, um possível candidato a dopante tipo p.

A MINHA CONTRIBUIÇÃO: experiências, manuscrito.

Engineering strain and conductivity of MoO_3 by ion implantation

D.R. Pereira, C. Díaz-Guerra, M. Peres, S. Magalhães, J.G. Correia, J.G. Marques, A.G. Silva, E. Alves, K. Lorenz

Acta Materialia 169 (2019) 15

<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.02.029>

NOTA: Trabalho em física de materiais onde as propriedades elétricas são modificadas por defeitos induzidos por feixes de íões no CTN.

A MINHA CONTRIBUIÇÃO: discussão, manuscrito.

2.B TRABALHOS CIENTÍFICOS EM CURSO E FINALIZAÇÃO, COMENTADOS

Theoretical study of the phase transformations of $\text{Sr}_3\text{Hf}_2\text{O}_7$

E.L. da Silva, A.M. Gerami, P.N. Lekshmi, J.G.M. Correia, J.P. Araujo, A.M.L Lopes

Submitted to: APL Materials, Special Topic "100 Years of Ferroelectricity - a Celebration

NOTA: Ferroeletricidade híbrida imprópria (HIF) é um fenómeno recentemente descoberto de polarização elétrica espontânea decorrente de deslocamentos antiferrodistortivos ligados a rotações e inclinações do octaedro nestas perovskitas. A partir dos estudos teóricos presentes, pela análise do modo de simetria e da estabilidade energética inferimos que a sucessão de transições mais provável em direção ao sistema no estado fundamental polar deve seguir a sucessão de fases: $I4 / mmm > Cmc m > Cmc a > Cmc 21$. De notar que este material é um paradigma de outras estruturas que ainda não foram sintetizadas com real interesse científico e possibilidade de análise com técnicas nucleares hiperfinas.

A MINHA CONTRIBUIÇÃO: discussão, manuscrito.

Local probing CaMnO_3 perovskite at high temperatures: discussion on the hyperfine field fluctuations for a dynamical average cubic phase

P. Rocha-Rodrigues, G.N.P. Oliveira, J.G. Correia, M.B. Barbosa, S.S.M. Santos, J.P. Araújo and A.M.L. Lopes

Submitted to: Physical Review B

NOTA: Simulações ab-initio recentes de dinâmica molecular em CaMnO_3 sugerem que a fase cúbica de alta temperatura $Pm3m$ pode derivar de uma média dinâmica de estados, à medida que a estrutura cristalina permuta entre configurações ortorrômbicas equivalentes ($Pbnm$). A transição estrutural progride assim a partir do tipo de ordem/desordem dinâmica e não do tipo de deslocamento designado por "soft mode". Experiências de medidas hiperfinas com a técnica de PAC foram efetuadas e analisadas com um modelo de campo hiperfino flutuante estocástico usando o nosso programa de análise de interações hiperfinas dinâmicas. Da análise resulta a proposta de um modelo de ordem-desordem, admitindo o CaMnO_3 estequiométrico, onde discutimos como a evolução do EFG observável pode fornecer evidência experimental para a dinâmica de ordem/desordem a nível atômico local. Mostramos ainda que estes métodos providenciam uma ferramenta para medir as frequências de transição térmicas características, exibidas tanto pelo CaMnO_3 como por outros sistemas analógicos.

A MINHA CONTRIBUIÇÃO: experiências, discussão, manuscrito.

Lattice site and charge states of Cd acceptors in Ga_2O_3

M.B. Barbosa, J.G. Correia, K. Lorenz, A.S. Fenta, J. Schell, R. Teixeira, G.N.P. Oliveira, A.M.L. Lopes, E.

Nogales, B. Méndez, A. Stroppa and J. P. Araújo

Submitted to: Applied Physics Letters

NOTA: Ga_2O_3 é um semiconductor de gap largo de crescente interesse devido à sua aplicação potencial em dispositivos eletrónicos de energia e alta tensão. Encontrar dopantes do tipo p adequados, bem como métodos confiáveis de dopagem pode influenciar e contribuir para o desenvolvimento da próxima geração de eletrónica de potência. Neste trabalho, combinamos métodos de implantação iônica, difusão e, de transmutação nuclear de fácil acesso, para incorporar adequadamente o dopante Cd na rede β - Ga_2O_3 , sendo posteriormente caracterizado à escala atômica com a técnica de PAC e com simulações com a teoria DFT. O carácter aceitador do Cd em β - Ga_2O_3 é demonstrado, com o Cd no sítio do Ga octaédrico no estado de carga negativa, não mostrando nenhuma evidência de deformações polarónicas. Além disso, elétrons livres termicamente ativados foram observados para temperaturas acima de ~ 648 K com uma energia de ativação de 0,54 (1) eV. A temperaturas mais baixas, o transporte local de elétrons é dominado por efeito de túnel entre os níveis do defeito e a sonda de Cd.

A MINHA CONTRIBUIÇÃO: experiências, discussão, manuscrito.

The electric field gradient as a signature of the binding and the local structure of adatoms on graphene

A. Fenta, C. Amorim, J.N. Gonçalves, N. Fortunato, M.B. Barbosa, S. Cottenier, J.G. Correia, L.M.C. Pereira, V. Amaral

Submitted to: The Journal of Chemical Physics (AIP)

NOTA: A estabilidade de adsorção de metais pesados (Ag, Cd, In e Hg) em grafeno foi estudada com base em cálculos da teoria do funcional da densidade. A energia de ligação e o gradiente do campo elétrico foram calculados para cada adatom, para várias configurações atômicas de alta simetria. Dois regimes de densidade foram considerados: uma proporção de átomos de metal para carbono de 1:18, correspondendo a adátomos quase isolados, e uma proporção de 3:8 correspondendo a uma monocamada de metal contínua. Todos os elementos estudados são mais estáveis enquanto adatoms isolados. Este estudo também estabelece uma relação entre a energia de ligação e o tensor EFG para cada adatom, sugerindo que o EFG pode ser usado para testar a estabilidade de ligação de adátomos no grafeno. Além disso, o EFG é sensível à estrutura atômica local distinguindo as configurações isoladas das de monocamada e, para alguns casos, variando significativamente com pequenas variações na posição do adatom (à escala sub-Å). Com base nesses cálculos, propomos que técnicas hiperfinas que podem medir o EFG e, para as quais existem isótopos adequados, podem ser usadas para estudar experimentalmente detalhes de adsorção atômica no grafeno e, por extensão, em materiais bi-dimensionais em geral.

A MINHA CONTRIBUIÇÃO: experiências, discussão, manuscrito.

Hg sorption by Dithiocarbamate- functionalized nanoparticles: Determining Hg coordination with a combined experimental and ab-initio aproach

C.O. Amorim, N.M. Fortunato, J.N. Gonçalves, A.S. Fenta, D.S. Tavares, C.B. Lopes, E. Pereira, T. Trindade, J. G. Correia and V.S. Amaral

Submitted to: The Journal of Physical Chemistry

NOTA: Nanopartículas funcionalizadas com grupos ditiocarbamato são bem conhecidas pela alta eficiência de absorção de Hg (II) da água, mas onde e como é efetuada a coordenação do Hg ainda é uma questão em aberto. No presente trabalho, experiências de correlações angulares perturbadas foram efetuadas e combinadas com simulações de DFT em múltiplas configurações do Hg em grupos ditiocarbamato, afim dedeterminar o ambiente local mais provável para o Hg e sua coordenação. Este estudo foi efetuado em nanopartículas funcionalizadas com ditiocarbamato e para nanopartículas de magnetita revestida com sílica, mostrando-se que a energia de ligação favorece o grande rendimento de captura de Hg pelo ditiocarbamato.

A MINHA CONTRIBUIÇÃO: experiências, discussão, manuscrito.

2.C TRABALHOS R&D EM CURSO E FINALIZAÇÃO, COMENTADOS

> RECOLHA DE ISÓTOPOS RADIOACTIVOS EM GELO

Continuação da otimização do novo sistema de recolha de isótopos radioativos em gelo para estudos em nano partículas, química ou biofísica. Abaixo mostramos a nova câmara, que foi desenhada e manufaturada por nós com fundos do C2TN e dos projetos CERN de que sou PI, montada na linha de feixe do ISOLDE.

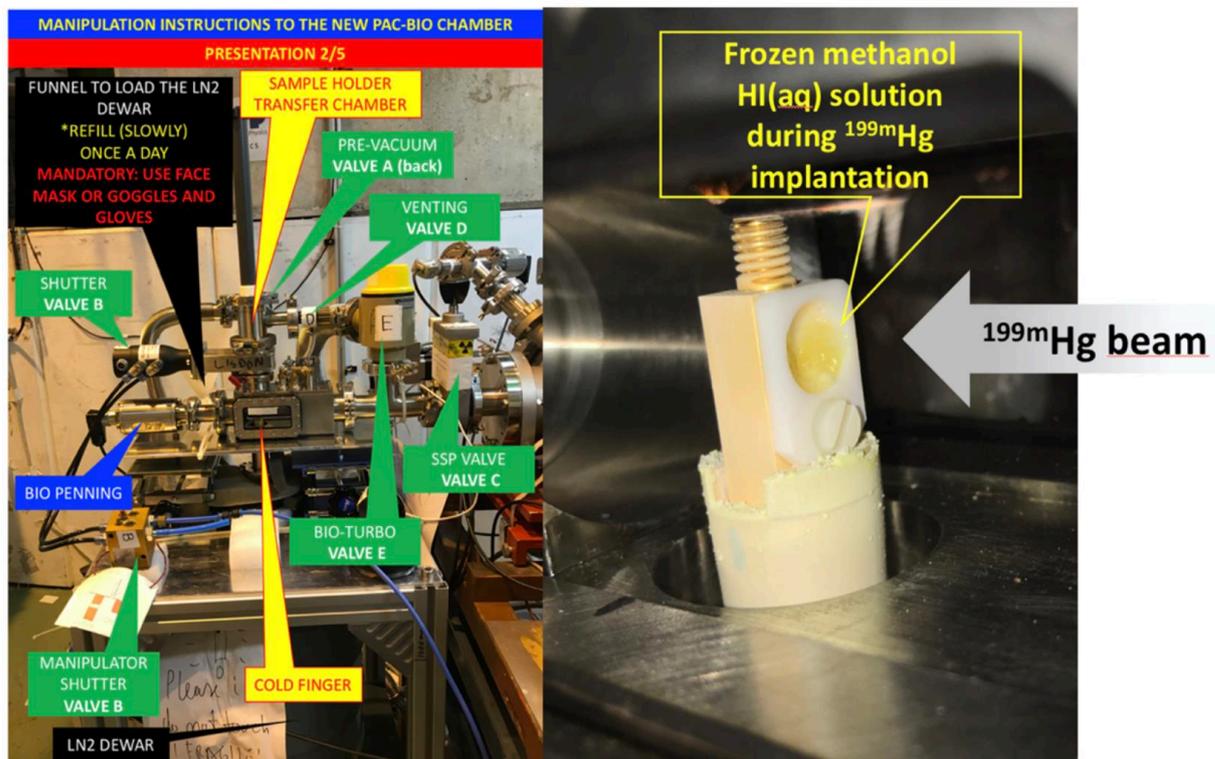


Fig da esquerda: Descrição fotográfica da NOVA câmara PAC-BIO montada on-line na linha de feixe ISOLDE.

Fig da direita: uma fotografia de um caso experimental “difícil”, durante a implantação em vácuo de ^{199m}Hg numa solução ácido iodídrico (aq) em metanol congelado. O metanol funde a $-97,6^\circ\text{C}$, exigindo assim um acoplamento térmico para transferência de calor muito bom entre o suporte da amostra em teflon (em branco), o quadro de suporte em cobre dourado electroquimicamente a ouro (a amarelo) e o dedo frio, que é feito de uma haste de cobre dourado que passa numa soldadura aço / cobre para vazio a qual, finalmente, mergulha num banho de azoto líquido.

> PAC-SLI ESTAÇÃO PARA EXPERIÊNCIAS DE INTERACÇÕES HIPERFINAS ON-LINE

Desenvolvimento de uma estação de medida on-line para isótopos de vidas curtas ($^{68m}\text{Cu}/^{68}\text{Cu}$) em experiências de PAC. Inicialmente com testes previstos para 2018 e 2019, a implementação dos mesmos atrasou para que fosse desenvolvido o sistema de automatização do sistema de forno e sincronização com o feixe do ISOLDE, terminado em 2019. Esta câmara de medida permitirá a troca fácil de amostras, o recozimento térmico in situ e as medidas a alta temperatura. A primeira experiência de física de materiais prevista será o estudo de transições de fase no semicondutor anti-ferromagnético de composição $\text{CuMnAs}_{1-x}\text{Sb}_x$. Usando a nova sonda de PAC ^{68m}Cu , podemos estudar a temperatura de Néel da transição de fase, onde técnicas tradicionais de magnetometria e de difração de neutrões falham. Esta câmara será usada a partir de 2021, no âmbito de uma nova proposta de feixe para estudar momento quadrupolares de isótopos de Sn com vista à caracterização de novas sondas para medidas de campos hiperfinos.

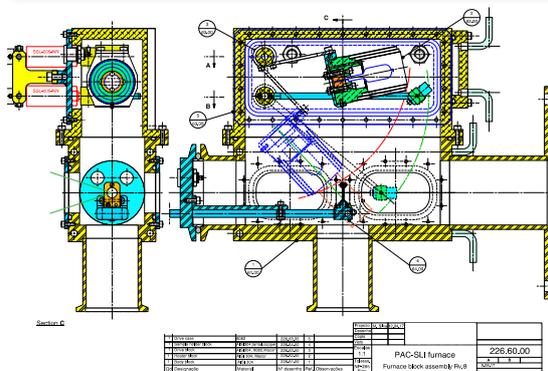
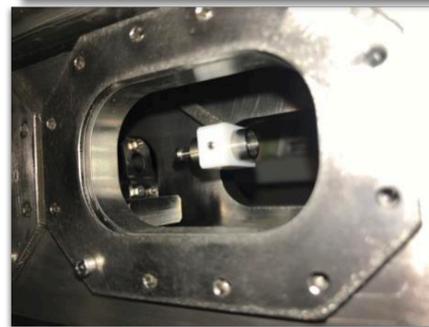
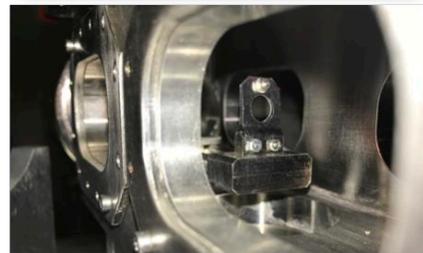


Fig da esquerda topo: foto da montagem experimental
 Fig da esquerda inferior: esquema da assemblagem
 Fig da direita topo: forno radiativo
 Fig da direita meio: porta-amostras
 Fig da direita inferior: faraday cup para focagem do feixe.

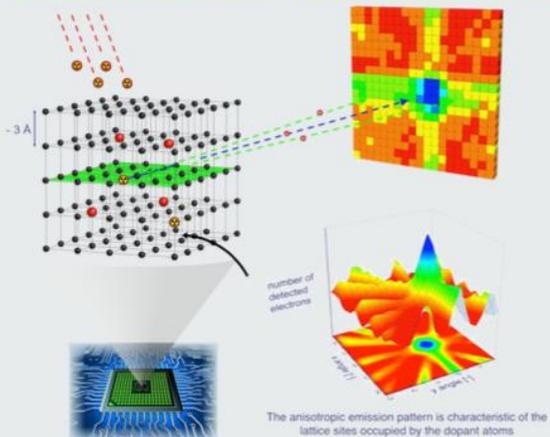
> PAC-SLI ESTAÇÃO PARA EXPERIÊNCIAS DE EMISSION CHANNELING ON-LINE



ON-line  **@ISOLDE**



EMISSION CHANNELING EXPERIMENTS WITH SHORT-LIVED ISOTOPES : EC-SLI



The anisotropic emission pattern is characteristic of the lattice sites occupied by the dopant atoms.

⁵⁹Fe implanted Silicon

As implanted



<110>

Displaced Substitutional

300°C



Tetrahedral Interstitial

800°C



Perfect Substitutional

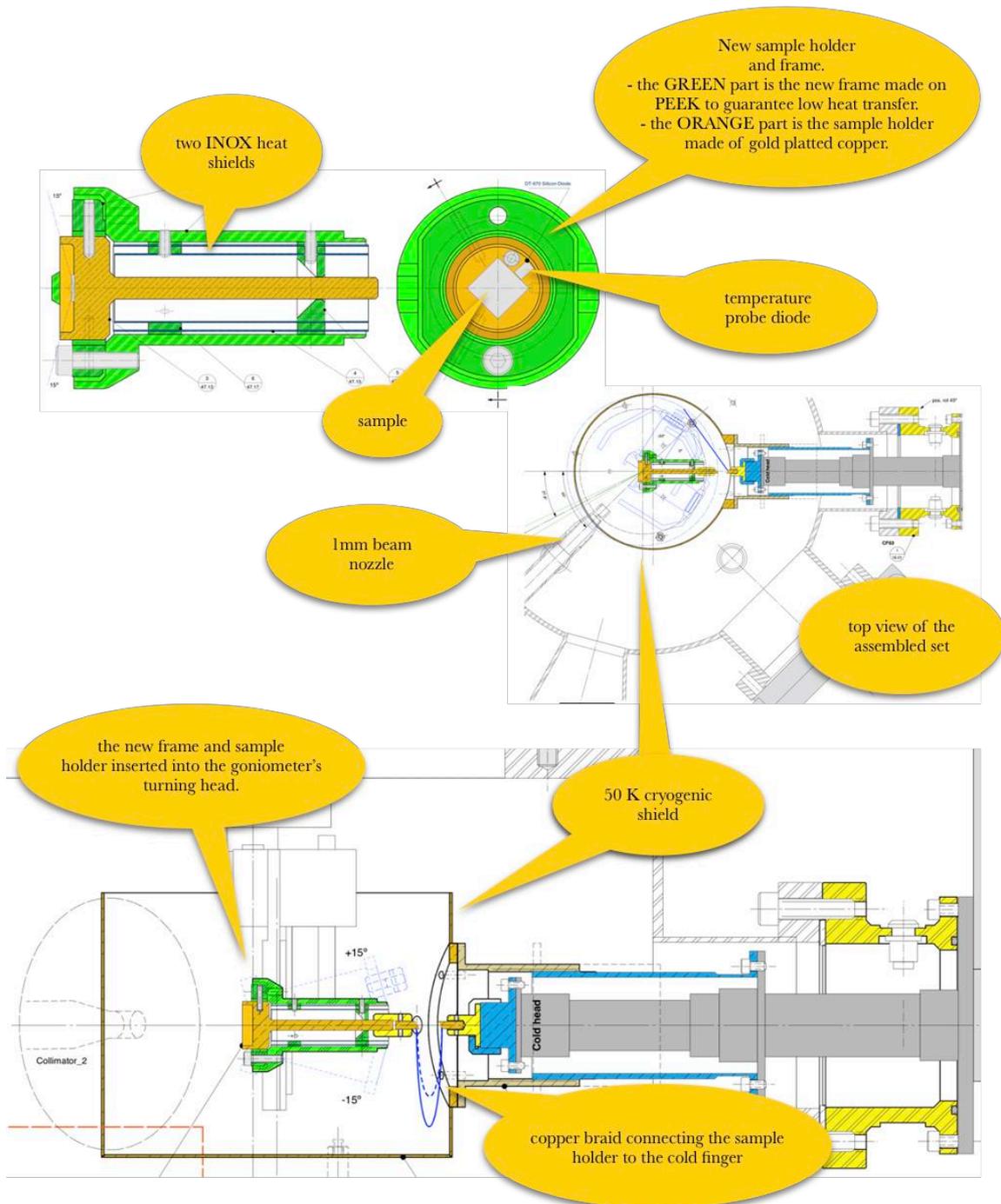
World exclusivity!



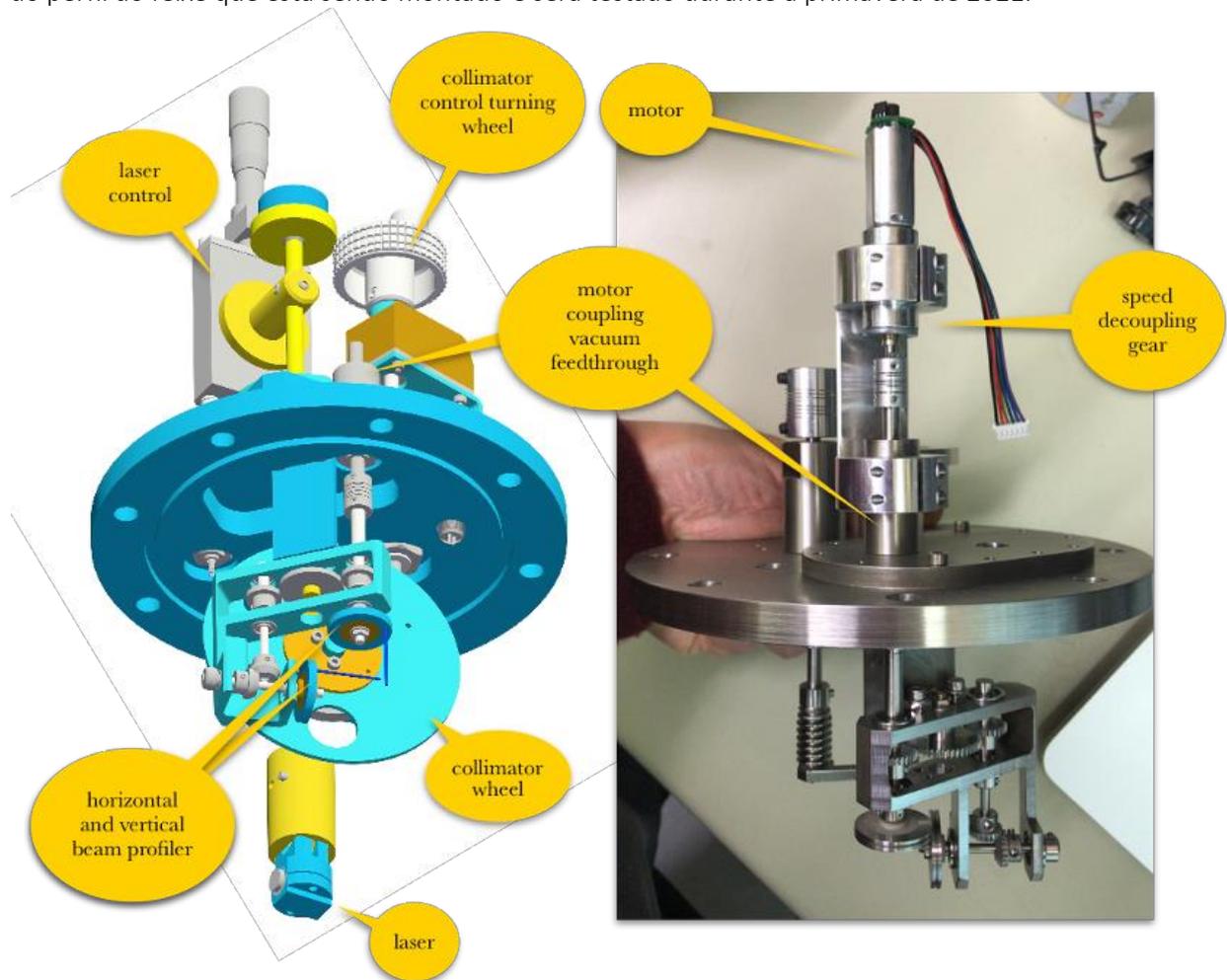
1st Workshop C2TN RADIATION FOR SCIENCE AND SOCIETY
12/11/17

Apoio ao desenvolvimento, otimização e implementação de novos detetores de eletrões sensíveis à energia e posição. É necessário renovar os atuais detetores usados em experiências de “emission channeling” por razões de envelhecimento. Aproveitando a presença e contactos estabelecidos no CERN temos dedicado particular atenção aos detetores altamente pixelados de Si, 512x512 pixéis de 55µm (3x3cm²) e 256x256 pixéis (1.5x1.5cm²) - [MEDIPIX/TIMEPIX](#) de nova geração. O nosso grupo está inserido na colaboração MEDIPIX que nos facilita o acesso aos detetores. Estes detetores permitem-nos efetuar experiências com isótopos emissores de partículas beta de alta energia onde o efeito de “channeling” é confinado a um pequeno ângulo sólido, razão de ser da necessidade de possuir maior resolução por pixel que a que temos nos detetores atuais com 22x22 pads de 1.4 mm (3x3cm²).

> Desenvolvimento de um porta-amostras refrigerado para adaptar ao goniómetro (Panmure) de grande precisão da experiência EC-SLI. Pretendemos atingir temperaturas de 30K, o que nada tem de trivial por razões várias de geometria e liberdade de orientação do porta-amostras dentro da câmara de medida. O esquema abaixo é ilustrativo e auto-explicativo das peças que foram construídas, mas ainda não foram montadas por conta das restrições devidas à pandemia.



> Desenvolvimento de uma nova pré-câmara de colimação, medida de perfil e alinhamento do feixe no setup experimental EC-SLI. No final de 2018, durante os exercícios de feixe estável para as experiências de EC visando caracterizar o núcleo ^{229}Th / ^{229}Ac em CaF_2 , no âmbito da pesquisa de relógios nucleares, enfrentámos problemas bastante sérios na focagem do feixe através do último colimador, de 1 mm de diâmetro, a 10 cm da amostra, problema esse devido a um elemento, quadrupolo de focagem inoperante e inacessível, na área altamente radioativa da zona do alvo do ISOLDE. Por esse motivo perdemos vários dias de feixe sem conseguir focar, e foi necessário usar um feixe intenso disponível de ^{227}Ac (21.8y) que é um dos radioisótopos mais perigosos biologicamente devido à sua meia-vida comparável com a longevidade humana e, devido à emissão de partículas alfa e química compatível dos seus produtos de decaimento com o corpo humano. A consequência foi que todos os sistemas mecânicos dentro da primeira câmara de colimação do setup EC-SLI precisaram de ser removidos e substituídos por novos sistemas não contaminados. Aproveitamos a oportunidade para redesenhar completamente os componentes internos, o sistema de alinhamento de laser, a roda do colimador e ainda para instalar pela primeira vez um novo sistema compacto de scan do perfil do feixe que está sendo montado e será testado durante a primavera de 2021.



> SIMULAÇÃO DE EFEITOS DE DISPERSÃO DE ELETRÕES EM EXPERIÊNCIAS DE CORRELAÇÕES ANGULARES e⁻ - γ PAC

Correlações angulares perturbadas diferenciais (em tempo), PAC, também podem ser realizadas usando eletrões de conversão como partículas detetadas que, após a emissão, criam um primeiro buraco nas camadas de eletrões do átomo sonda. Durante a recombinação há emissão de raios-x e de eletrões Auger aumentando ainda mais a carga do estado iónico. Se o processo de recombinação com a recarga dos eletrões perdidos for da ordem do ns ou superior, PAC pode revelar a formação de estados metastáveis e/ou ionizados localizados, tempos de recombinação e mobilidade de eletrões em (qualquer) material. Para e⁻-γ ou γ-γ PAC o observável experimental é denominado razão de anisotropia R(t) e construído com espectros obtidos por detetores com ângulos de 180° e 90°, eliminando o fator exponencial do estado intermediário da cascata onde os campos hiperfinos são observáveis. R(t) é proporcional a A₂₂G₂₂(t) onde A₂₂ define a amplitude máxima observável para a função de perturbação, G₂₂(t), contendo toda a informação sobre o gradiente de campo elétrico hiperfino e / ou campos magnéticos locais de interesse. De facto, um A₂₂* efetivo é medido, o qual é atenuado em relação a A₂₂, pelo ângulo sólido, eficiência do detetor, tamanho e eventual desalinhamento da fonte. O valor de A₂₂* tem assim de ser bem conhecido para fins de ajuste da função G₂₂(t), particularmente no que diz respeito à normalização das frações dos átomos sonda interagindo com diferentes ambientes locais no material hospedeiro. Ao usar radiação gama, principalmente a geometria e a composição dos detetores cintiladores, levando à criação do pico fotoelétrico é relevante para calcular os parâmetros de atenuação da anisotropia Q_k (um fator por electrão ou quanta detetado). Ao fazer experiências com eletrões, um espectrómetro magnético é usado com um ângulo sólido definido pelo cone de aceitação das trajetórias dos eletrões. Uma vez que o ângulo inicial de emissão dos

eletrões pode ser alterado pela dispersão no material, este efeito reduzirá ainda mais os coeficientes Q_k, quando eletrões indesejados, principalmente devido à dispersão quase elástica, acabarão entrando pelo cone de abertura de aceitação do espectrómetro. Para compreender este efeito, implementei simulações realistas de amostras implantadas usando o programa MC Penelope (J. Sempau et al., [https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(03\)00453-1](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(03)00453-1)). Abaixo, um resumo desse trabalho é ilustrado, onde saliento em particular a ajuda essencial providenciada pelo Jorge Borbinha do Grupo do Pedro Vaz e as interações diretas com Josep Sempau. Estamos agora preparados para implementar fatores de atenuação Q_{kk'} para radiação γ em cintiladores que serão estudados futuramente no âmbito de novos *proposals* submetidos ao INTC e aplicações dos projetos CERN da FCT. Neste caso, para obter parâmetros realistas, é fundamental a compreensão adequada da absorção de raios gama no cintilador, a geração do fundo

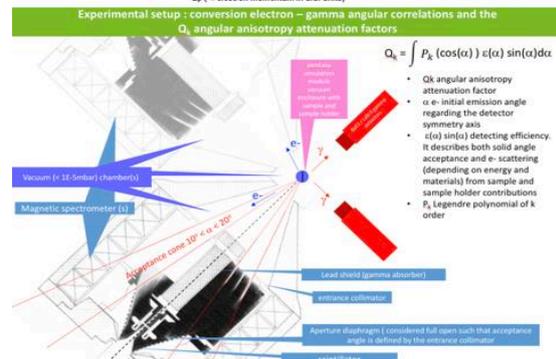
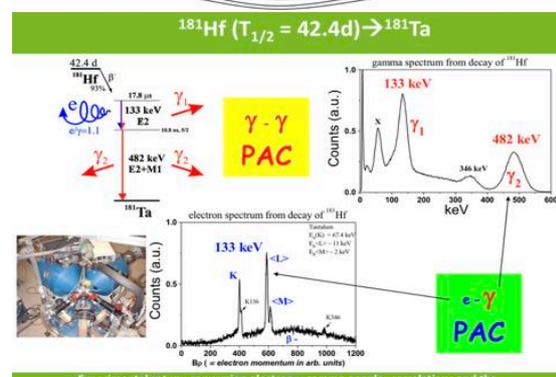
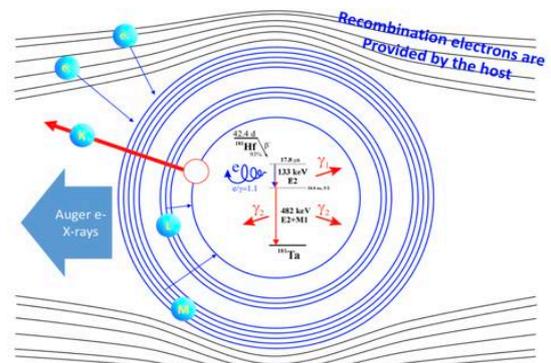
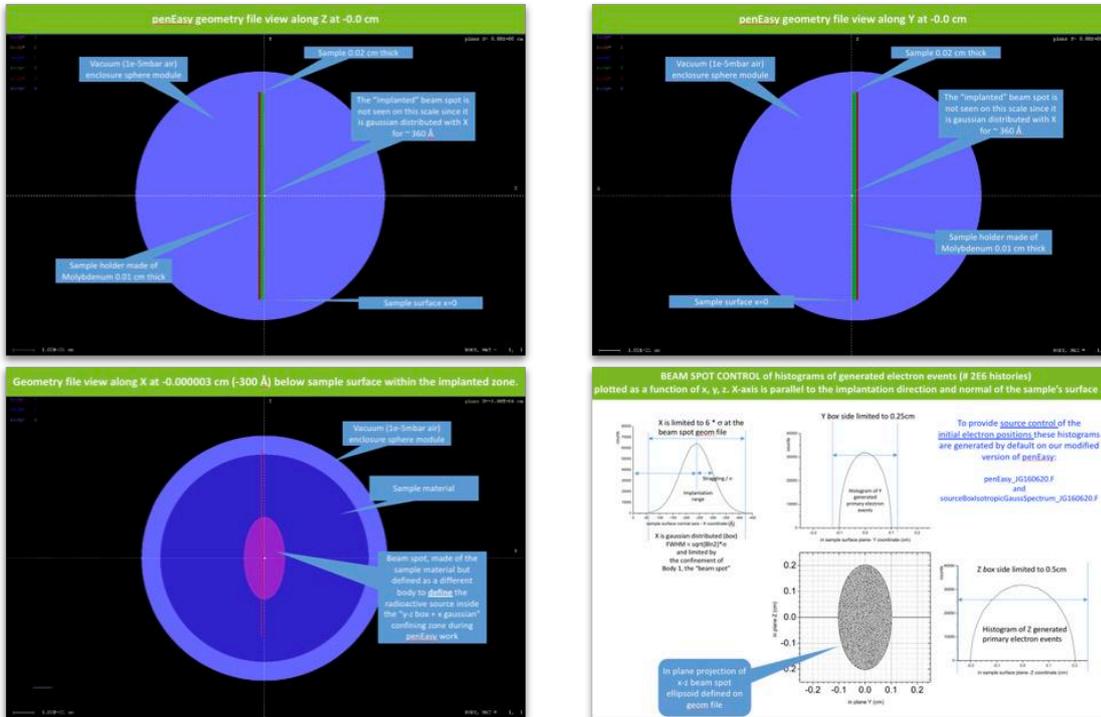


Fig superior: esquema de emissão do eletrão de conversão, emissão Auger e de raios-X e recombinação com eletrões fornecidos pelo hospedeiro.
Fig do meio: exemplo uma cascata de decaimento em que tanto e⁻ -γ ou γ - γ TDPAC podem ser usados
Fig inferior: esquema do espectrómetro + montagem da amostra que foi usado para as simulações Penelope MC.

de Compton, do pico fotoelétrico e, particularmente, as considerações sobre a absorção e dispersão dos fótons UV resultantes da absorção de eletrões do pico fotoelétrico, as quais dependem do material cintilador o que exigirá simulações de alcance de muito baixa energia na ordem do eV até que os fótons cheguem ao fotocátodo do fotomultiplicador.



Figs de topo e Fig inferior esquerda: construção geométrica da amostra, gerador de electrões
Fig inferior direita: detalhes da distribuição do gerador de electrões iniciais dentro da amostra “implantada”.

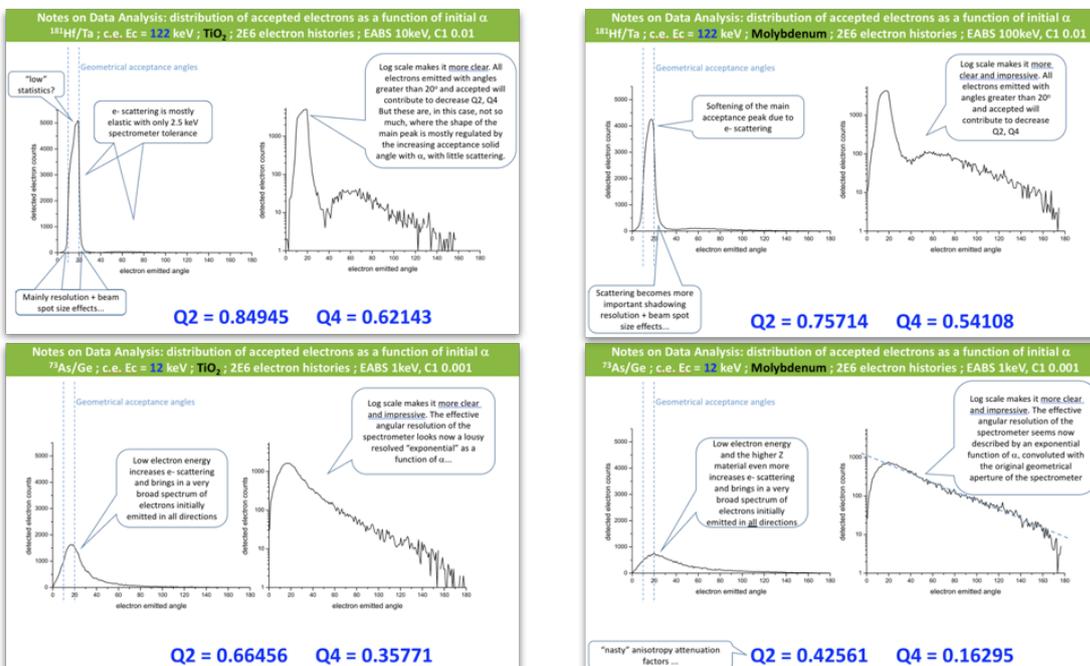


Fig de topo: Número de electrões de 122keV aceites em função do ângulo inicial gerado; esquerda - TiO₂, direita - Mo
Fig inferior: Número de electrões de 12keV aceites em função do ângulo inicial gerado; esquerda - TiO₂, direita - Mo
Os coeficientes de atenuação Q₂, Q₄ calculados correspondentes são anotados abaixo de cada conjunto de figuras.

> PACME – UM PROGRAMA DE ANÁLISE DE INTERAÇÕES HIPERFINAS DINAMICAS

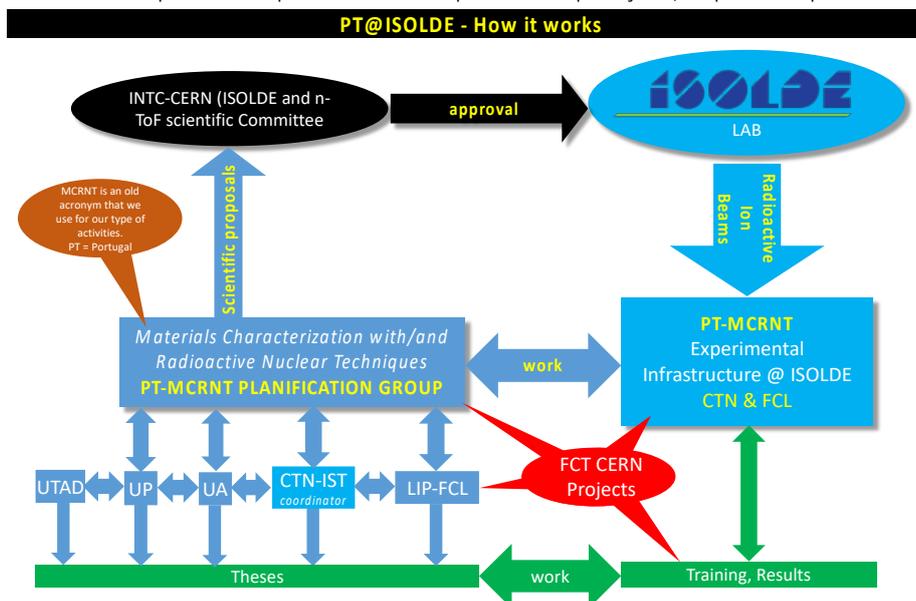
Finalização e divulgação do programa de análise de PAC para interações hiperfinas dinâmicas – a formalização do GUI deste novo programa de análise por nós desenvolvido foi adiado em anos anteriores para evitar dispersão da conclusão da tese do estudante responsável, Marcelo Barbosa. PACme, um programa C++ que calcula por técnicas de “primeiros princípios” o observável de PAC e fita dados experimentais para casos de interações hiperfinas dinâmicas (em adição aos casos estáticos), considerando um conjunto estocástico de diferentes estados possíveis e as transições entre eles. É completamente generalizado em termos do tipo de interação, quadrupolar e ou magnética, do número de diferentes frações e diferentes estados de cada fração, rotação nuclear das sondas e estrutura cristalina (monocristal ou policristalino) do material em estudo. Além disso, é o primeiro, a nosso conhecimento, a incorporar de forma analítica distribuições estáticas em cada estado, mesmo para casos dinâmicos. As distribuições estáticas são cruciais na análise dos espectros de PAC, uma vez que pequenos desvios no gradiente de campo elétrico e / ou campo magnético ao redor das sondas (por exemplo, devido a defeitos distantes das sondas) são muito frequentes e alteram os espectros de forma característica. Este trabalho ainda não foi publicado porque estamos a transformar o core de diagonalização dos super-hamiltoneanos para qualquer valor de spin do estado intermédio. As rotinas que utilizamos atualmente só permitem até spins de $I=5$.

2. D Projectos científicos e de financiamento – enquadramento

Iniciada em 1986, com a promoção e apoio do ex-ITN (hoje C2TN-IST) e ex-CFNUL, a equipa de investigadores Portugueses é hoje uma das maiores e mais presentes comunidades de estudos em materiais no ISOLDE, dedicadas à investigação de propriedades locais à escala subatómica / nanoscópica. O trabalho produzido no ISOLDE dá regularmente origem a publicações de excelência em revistas de alto fator de impacto e a teses de mestrado e doutoramento. A natureza e resultados da colaboração foram aqui resumidos, estão expressos no CV e, em particular pela observação de relatórios finais de projetos mais recentes, [CERN/FIS-NUC/0005/2017](#) e [CERN/FIS-NUC/0004/2015](#) darem uma visão completa e atualizada do trabalho em curso nos projetos dos quais sou diretamente responsável e coordenador.

Desde 2010 que a nossa estratégia de aplicação a projetos de financiamento reúne os diferentes institutos e universidades Portugueses participantes unificando a aplicação num só projeto destinado a suportar financeiramente a globalidade e variedade das atividades executadas nesta infraestrutura. Neste conceito, a liderança do ex-ITN / CTN-C2TN tem sido o garante da coordenação entre instituições, permitindo manter a infraestrutura, o desenvolvimento tecnológico, o apoio aos estudantes e colaboradores e a evolução das atividades científicas da colaboração Portuguesa no ISOLDE.

A figura abaixo representa o organigrama funcional da organização do nosso trabalho científico gerido com o apoio dos projetos de financiamento que têm sido sucessivamente avaliados com a nota de “Excelente”. Recebemos no dia 10 de Fevereiro de 2021 a avaliação do projecto [CERN/FIS-NUC/0004/2015](#) que pode ser lida [aqui](#). O projeto CERN/FIS-PAR/0005/2017 (170k€) “PORTUGAL AT ISOLDE: Materials and Nuclear Physics Research with Radioactive Isotopes and Techniques” esteve ativo de 1 de Julho de 2018 a 31 de Dezembro de 2020. Temos agora um novo projecto [CERN/FIS-PAR/0003/2019](#) “Material’s Research with Radioactive Isotopes and Nuclear Techniques at ISOLDE-CERN” aprovado com o mesmo financiamento global de 170k€ pelo período de 2 anos que começou a 1 de Janeiro de 2021. Sou ainda responsável pelo parceiro IST num outro projecto [POCI-01-0145-FEDER-029454](#), “Functional lattice instabilities in naturally layered perovskites” com 30k€. Embora as tentativas sejam várias em particular para participar / co-organizar projectos europeus dedicados a networks de treino e participação em experiências, as várias tentativas têm falhado sobretudo por uma fraca componente de parceria industrial. Ao longo de todos estes anos tivemos dois casos de interesse de formalização de contrato com a Indústria que falharam redondamente pelas reticências do parceiro em divulgar os parâmetros cristalográficos dos materiais necessários às simulações e, pela inadequação do processo experimental onde apenas temos o feixe desejado uma ou duas vezes por ano, depois de um processo de aprovação pelo comité científico INTC. O processo de formalização do contrato demorou mais de um ano tornando todo o processo completamente ineficiente. Desde então a nossa colaboração com parceiros industriais, é efetuada exclusivamente a nível de contacto individual para questões pontuais onde se possa trabalhar eficientemente tendo em conta que a produção de isótopos radioativos é orientada para interesses de física fundamental ou questões específicas com impacto em aplicações, depois de aprovadas pelo INTC.



Abaixo apresento a lista das propostas científicas ativas, aprovadas pelo comité científico do CERN – ISOLDE (INTC) e, o histórico das que foram sendo aprovadas e concluídas desde sempre. Faço notar que pelo facto de Portugal não ser membro da colaboração ISOLDE não podemos ser “spokesperson/co-spokesperson” sem que um destes não seja afiliado a uma instituição de um país membro da colaboração ISOLDE. Estas propostas são ou de nossa iniciativa ou nós temos uma responsabilidade preponderante para a sua execução e sucesso. O termo “nós” refere-se primeiro, a um elemento de uma instituição portuguesa das instituições que incorporam os projetos CERN que lideramos e, segundo, ao facto de que os projetos são executados total ou parcialmente na nossa infraestrutura experimental. Mais fazemos notar que tem havido por parte dos colaboradores estrangeiros um verdadeiro apoio financeiro em termos de manufatura, manutenção e de reparação de equipamento em complemento ao nosso investimento, que nos tem garantido o funcionamento da infraestrutura pois os nossos projetos não conseguem suportar tudo, em particular no que diz respeito à utilização de fundos relacionados com equipamento e reparações. A minha contribuição pessoal tem sido relevante para a sua conceção / execução, mas eu não tenho querido ter um papel formal de destaque, que não mais se justifica, e que me obrigaria, em particular, a ter de organizar os relatórios individuais para o INTC, o que não é suportável para tantos projetos diferentes.

INTC propostas aprovadas: Presente & Futuro

Perturbed Angular Correlations, γ - γ , e- γ PAC and Electron Emission Channeling, EC OPEN SCIENTIFIC PROPOSALS & COOPERATION					
start	Experiment	technique	Title	PI(s)	Leading Institution
NEW 2020 12 / 27 shifts (*) approved	IS6xx	NP, PAC	Nuclear moments of excited states in neutron rich Sn isotopes studied by on-line PAC https://cds.cern.ch/record/2717823/files/INTC-P-550.pdf	H. Haas G. Georgiev (J.G. Correia)	CICECO-UA IJC-CNRS- IN2P3 (C2TN-IST)
NEW 2020 34 / 34 shifts approved	IS6xx	PAC	Probing Energy Efficient Perovskites https://cds.cern.ch/record/2731956/files/INTC-P-575.pdf	A.M.L. Lopes J. Schell A.W. Carbonari J.G. Correia	IFIMUP-UP CENIDE-Essen IPEN-São Paulo C2TN-IST
NEW 2020 20 / 20 shifts approved	IS668	EC, PL	Quantum colour centers in diamond studied by emission channeling with short-lived isotopes (EC-SLI) and radiotracer photoluminescence https://cds.cern.ch/record/2717973/files/INTC-P-562.pdf	U. Wahl L.M.C. Pereira	C2TN-IST IKS-KUL
NEW 2020 11 / 11 shifts approved	IS658	NP, EC	Study of the radiative decay of the low-energy isomer in ^{228}Th https://cds.cern.ch/record/2717784/files/INTC-P-548.pdf	P. Van Duppen L.M.C. Pereira U. Wahl	IKS-KUL IKS-KUL C2TN-IST
NEW 2020 6 / 6 shifts approved	IS652	PAC	Influence of valence of doping element on local electronic and crystal structure in vanadium oxides: Time-Differential Perturbed Angular Correlations spectroscopy at ISOLDE https://cds.cern.ch/record/2299524/files/INTC-P-532.pdf	A.W. Carbonari J. Schell J.G. Correia	IPEN-São Paulo CENIDE-Essen C2TN-IST
2017 4 shifts left	IS647	PAC	Local Probing of Ferroic and Multiferroic Compounds https://cds.cern.ch/record/2241297/files/INTC-P-502.pdf	A.L. Lopes J. Schell J.G. Correia	IFIMUP-UP C2TN-IST CENIDE-Essen
2008	- R&D COOPERATION	EC	New electron emission channeling detector with TIMEPIX 512 x 512 (55mm) pixel QUAD chip: C2TN-CTN-IST and MEDIPIX collaboration	U.Wahl J.G. Correia Michael Campbell	C2TN-IST CERN

(*) 1 shift = 8 h dedicated beam time

ACRONYMS: NP= nuclear physics; PL= radiotracer photoluminescence; EC= Emission Channeling; PAC= Perturbed Angular Correlations

INTC propostas aprovadas e concluídas 1/2

Perturbed Angular Correlations, γ - γ , e- γ PAC and Electron Emission Channeling, EC CLOSED SCIENTIFIC PROPOSALS & COOPERATION					
time period	Experiment	technique	Title	PI(s)	Leading Institution
2018 /2018(*)	INTC-I-198	NP + EC	Characterization of the low-energy ^{229m} Th isomer https://cds.cern.ch/record/2266840/files/INTC-I-198.pdf	P. Van Duppen	IKS-KUL C2TN-IST
2017 /2018(*)	IS648	EC	Emission Channeling with Short-Lived Isotopes: sublattice displacement in multiferroic Rashba semiconductors https://cds.cern.ch/record/2288142/files/INTC-P-526.pdf	L.M.C. Pereira	IKS-KUL C2TN-IST
2017 /2018(*)	IS640	PAC	PAC studies of isolated small Cd and Hg molecules: The nuclear quadrupole moments https://cds.cern.ch/record/2241888/files/INTC-P-505.pdf	H. Haas	CICECO-UA CENIDE-Essen C2TN-IST
2017 /2018(*)	IS634	EC	Emission channeling with short-lived isotopes (EC-SLI) of acceptor dopants in nitride semiconductors https://cds.cern.ch/record/2241166/files/INTC-P-489.pdf	U. Wahl	C2TN-IST IKS-UKL
2016 /2018(*)	IS612	eMs PAC EC	Unraveling the local structure of topological crystalline insulators using hyperfine interactions https://cds.cern.ch/record/2119989/files/INTC-P-455.pdf	L.M.C. Pereira	IKS-KUL C2TN-IST
2013 /2018	IS585	PAC	Interaction and Dynamics of add-atoms with 2-Dimensional Structures, PAC studies of mono- and low-number of stacking layers). https://cds.cern.ch/record/1603085/files/INTC-P-395.pdf	V. Amaral	CICECO-UA
2013 /2018	IS580	EC	Emission Channelling with Short-Lived Isotopes: lattice location of impurities in semiconductors and oxides. https://cds.cern.ch/record/1603065/files/INTC-P-391.pdf	L.M.C. Pereira	IKS-KUL C2TN-IST
2011 /2018	IS515	PAC	Radioactive probe studies of coordination modes of heavy metal ions from natural waters to functionalized magnetic nanoparticles https://cds.cern.ch/record/1319048/files/INTC-P-295.pdf	V. Amaral	CICECO-UA
(*) experiment running until 31/12/2018					

INTC propostas aprovadas e concluídas 2/2

Perturbed Angular Correlations, γ - γ , e- γ PAC and Electron Emission Channeling, EC CLOSED SCIENTIFIC PROPOSALS & COOPERATION					
time period	Experiment	technique	Title	PI(s)	Leading Institution
2009 /2017	IS487 + 1 add	PAC	Study of local correlations in magnetic and multiferroic materials https://cds.cern.ch/record/1156118/files/INTC-P-258.pdf https://cds.cern.ch/record/1411582/files/INTC-P-258-ADD-1.pdf	V. A. Amaral	CICECO-UA IFIMUP-UP
2006 /2016	IS453 + 2 add	EC	Emission channeling lattice location experiments with short-lived isotopes (EC-SLI) https://cds.cern.ch/record/986442/files/intc-2006-035.pdf https://cds.cern.ch/record/1232263/files/INTC-P-218-ADD-1.pdf https://cds.cern.ch/record/1642551/files/INTC-P-218-ADD-2.pdf	U.Wahl	C2TN-IST (former ITN) IKS-UKL
2008 /2016	IS481 + 1add	PAC	The role of In in III-nitride ternary semiconductors https://cds.cern.ch/record/986442/files/intc-2006-035.pdf https://cds.cern.ch/record/1232263/files/INTC-P-218-ADD-1.pdf	K. Lorenz	ITN CFNUL-UL
2004 /2014	R&D COOPERATION	EC	New FAST electron emission channeling pad detectors with self-triggering electronics: ITN-CFNUL and ATT-EP CERN group	U.Wahl, J.G.Correia, P. Weilhammer	ITN CFNUL-UL CERN
2010 /2013	LOI87	PAC	New insights in Metal-Oxide junctions for nano-electronic applications https://cds.cern.ch/record/1232577/files/INTC-I-087.pdf	A.L. Lopes	CFNUL-UL
2011 /2013	LOI132	PAC	Radioactive Local Probing and Doping on Graphene https://cds.cern.ch/record/1319112/files/INTC-I-132.pdf	V.A. Amaral	CICECO-UA
2009 /2010	LOI81	PAC	Radioactive probe studies of coordination mechanisms of heavy metal ions from natural waters to functionalized magnetic nanoparticles https://cds.cern.ch/record/1156109/files/INTC-I-081.pdf	V.A. Amaral	CICECO-UA
2000 /2008	IS390 + 1 add	PAC	Studies of colossal magnetoresistive oxides with radioactive isotopes https://cds.cern.ch/record/476388/files/sc00001223.pdf https://cds.cern.ch/record/816879/files/intc-2005-016.pdf	V.A. Amaral	CICECO-UA IFIMUP-UP
1997 /2007	IS360 + 2 add	PAC + EC	Studies of High-Tc superconductors with radioactive isotopes https://cds.cern.ch/record/315437/files/SC00000704.pdf https://cds.cern.ch/record/476389/files/sc00001224.pdf https://cds.cern.ch/record/707790/files/intc-2004-006.pdf	J.G. Correia	ITN CFNUL-UL IFIMUP-UP
1998 /2006	IS368 + 2 add	EC	Lattice site location of transition metals & rare earths in semiconductors https://cds.cern.ch/record/354808/files/cern-isc-98-9.pdf https://cds.cern.ch/record/488436/files/cm-p00043652.pdf https://cds.cern.ch/record/678581/files/intc-2003-037.pdf	U. Wahl	ITN CFNUL-UL
1994 /1997	IS P66	PAC	Test of new PAC probes for Hyperfine Studies at ISOLDE https://cds.cern.ch/record/294857/files/SC00000196.pdf	J.G. Correia	CFNUL-UL , ITN
1986 /1993	IS01/13	PAC	e- PAC at ISOLDE https://cds.cern.ch/record/639828/files/cm-p00046359.pdf	J.C. Soares	CFNUL-UL, ITN