

*Relatório de Actividades*

*Abril de 2011 – Março de 2014*

*da Investigadora Auxiliar*

*Elsa Maria Simões Branco Lopes*

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

A minha actividade foi desenvolvida como Investigadora Auxiliar na Unidade de Ciências Químicas e Radiofarmacêuticas do ITN e depois de Março de 2012 na área de Ciências e Engenharia dos Materiais do IST/CTN, no Grupo de Estado Sólido sob a direcção do Professor Manuel de Almeida.

No triénio de Abril de 2011 a Março de 2014 destaca-se o trabalho desenvolvido na procura de novos materiais termoeléctricos do qual resultaram várias publicações e comunicações e a execução do projecto FCT, “*Novos Sistemas Termoeléctricos*”, PTDC/CTM/102766/2008. O estudo de propriedades de transporte em sólidos condutores de base molecular também continuam a ser uma parte importante da minha actividade, bem como o das propriedades de transporte em novos sistemas intermetálicos com electrões fortemente correlacionados ou com propriedades eléctricas e magnéticas interessantes (baseados em elementos  $f$ ,  $p$ ,  $d$ ).

#### *Novos materiais Termoeléctricos*

E.B. Lopes<sup>1</sup>, A.P. Gonçalves<sup>1</sup>, C. Godart<sup>2</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>, M. Ribes, R. Escalier, C. Candolfi, 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. Este trabalho foi desenvolvido no âmbito do projecto da FCT “*Novos Sistemas Termoeléctricos*”, PTDC/CTM/102766/2008, bem como do projecto francês *ANR-PROGELEC-VTG*, do qual faço parte desde Novembro de 2011, em colaborações com os investigadores acima mencionados e respectivas instituições.

Na procura de novos materiais com ZT elevado temos focado a nossa atenção nos vidros condutores de calcogenetos. Completou-se o estudo da família  $\text{Cu}_x\text{As}_{45-x}\text{Te}_{55}$ ,  $20 < x < 35$  e apresentaram-se as comunicações C5, C6, C7, C11 e C20. Foram também estudados novos sistemas baseados na família  $\text{Cu}_{(x+y)}\text{A}_{(20-x)}\text{Te}_{(80-y)}$  ( $\text{A} = \text{Ga}$  e  $\text{Si}$ ) de vidros condutores em que o As foi substituído por Ga ou por Si. Pode concluir-se que em geral a adição de Cu diminui a resistividade e que o aumento da percentagem de Te faz aumentar o coeficiente de Seebeck, ver P5.

Numa tentativa de encontrar novos vidros condutores mais estáveis, cuja síntese seja mais económica e com elementos mais amigos do ambiente iniciou-se o estudo da famílias  $\text{Cu}_x\text{Ge}_y\text{Sb}_z\text{S}_{(100-x-y-z)}$  e  $\text{Cu}_x\text{Sb}_y\text{S}_{(100-x-y)}$ . No sistema  $\text{Cu}_x\text{Ge}_y\text{Sb}_z\text{S}_{(100-x-y-z)}$ , muitas das amostras preparadas infelizmente não eram condutoras e a melhor composição baseada nesta família  $\text{Cu}_{20}\text{Ge}_{10}\text{Sb}_{6.7}\text{S}_{60}$  possui um factor de potência de  $9.8 \mu\text{WK}^{-2}\text{m}^{-1}$ , que é um resultado aceitável, mas infelizmente muito mais baixo que os valores obtidos anteriormente para a família  $\text{Cu}_{(x+y)}\text{As}_{(20-x)}\text{Te}_{(80-y)}$ . Está ainda em curso o estudo da família  $\text{Cu}_x\text{Sb}_y\text{S}_{(100-x-y)}$  mas os resultados são encorajadores, já que alguns elementos desta família apresentam factores de potência muito mais elevados. Será importante conseguir medir a condutividade térmica destas amostras para poder calcular os valores de ZT.

A família CuAsTe anteriormente referida apresenta problemas de baixas temperaturas de transição vítrea e estabilidade térmica quando comparada com os materiais termoelétricos tradicionais maciços. A substituição de pequenas quantidades de Te por Se no sistema CuAsTe estabiliza o vidro sem afectar demasiado as propriedades termoelétricas. Tendo em vista esta estabilização do vidro condutor, algumas amostras da família  $\text{Cu}_x\text{As}_{(40-x)}\text{Te}_{(60-y)}\text{Se}_y$  foram preparadas por “melt-quenching”, numa mistura de água+gelo+sal. Por este processo é possível preparar amostras maciças, tipicamente cilindros de 8mm de diâmetro, que podem depois ser cortados em bolachas de espessura variável, que poderão ser usadas nas futuras aplicações destes materiais. O aumento do conteúdo em Cu faz aumentar o ZT, enquanto que a adição de Se tem o efeito oposto. A melhor amostra obtida nesta série tinha uma composição  $\text{Cu}_{30}\text{As}_{10}\text{Te}_{54}\text{Se}_6$  e apresentava uma condutibilidade térmica de  $0.29 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  a 375K, o ZT calculado era de apenas 0.06, o que infelizmente não é um valor muito alto, ver P16, C13, C24 e C25.

O método Spark Plasma Sintering, disponível em Thiais, foi usado para preparar vidros do sistema Cu-As-Te sob a forma de amostras cerâmicas densas, e estudar a microestrutura compósita vitro-cristalina e o seu impacto nas propriedades termoelétricas. O melhores resultados neste sistema foram obtidos para a amostra

$\text{Cu}_{15}\text{As}_{30}\text{Te}_{55}$  preparada por SPS, a preparação por SPS gera domínios dendríticos cristalinos de  $\beta\text{-As}_2\text{Te}_3$  (fase metastável) que estão rodeados pela matriz vítrea enriquecida em Cu. A presença dos domínios cristalinos da fase  $\beta\text{-As}_2\text{Te}_3$  diminui a resistividade elétrica em quatro ordens de grandeza, mas infelizmente simultaneamente também faz decrescer os valores do poder termoelétrico observado. Os valores de ZT mais elevados foram obtidos na amostra obtida por SPS  $\text{Cu}_{15}\text{As}_{30}\text{Te}_{55}$  foram de 0.14 a 365K. Estes resultados mostram que o método SPS pode de facto ser usado para preparar amostras cerâmicas densas em que o controle da microestrutura vitro-cristalina pode de facto contribuir para melhorar as propriedades termoelétricas dos vidros condutores ver P15, C23, C26 e C27.

O  $\text{CePd}_3$ , conhecido sistema de electrões fortemente correlacionados com efeito de Kondo, apresenta um poder termoelétrico à temperatura ambiente bastante elevado, devido a uma ressonância Abrikosov-Suhl, o que o impede de ter um ZT elevado é sua alta condutibilidade térmica. Tentou-se otimizar as propriedades de transporte em amostras de  $\text{CeP}_{3-\delta}$  nanoestruturadas, sintetizadas por “splat-cooling”. A melhor composição encontrada  $\text{CePd}_{2.7}$  apresenta valores para o factor de potência de  $4500 \mu\text{WK}^{-2}\text{m}^{-1}$  à temperatura ambiente. Infelizmente ainda não foi possível medir a condutibilidade térmica, neste caso pelo método 3 Omega, para confirmar a sua redução tal como se espera devido aos efeitos da nanoestrutura. Deste trabalho resultaram as comunicações C8 e C9.

#### *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>, R.T. Henriques<sup>1</sup>, M. Almeida<sup>1</sup>, C. Rovira<sup>2</sup>, J. Veciana<sup>2</sup>, M. Matos<sup>3</sup>

1- Grupo Estado Sólido, IST/CTN

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

3-Dep. Química, ISEL

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 termoelétrico de novos condutores moleculares de baixa dimensionalidade, os

principais laboratórios e investigadores com os quais colaboramos neste tema encontram-se acima referidos.

A química dos doadores de tiofeno-TTF, é muito rica, e conduziu, nos últimos anos, a uma grande variedade de sais de transferência de carga com propriedades de transporte eléctrico e magnéticas muito interessantes. Foram sintetizados e identificados por raios-X dois novos sais de transferência de carga com o dador  $(\alpha\text{-DT-TTF})_2$  e o anião  $\text{PF}_6$ , nomeadamente:  $(\alpha\text{-DT-TTF})_2(\text{PF}_6)$  e o  $(\alpha\text{-DT-TTF})_2(\text{PF}_6)_{0.6}$ . Foram encontrados cristais semelhantes mas com propriedades de transporte eléctrico diferentes, as condutibilidades eléctricas apresentam um comportamento semiconductor com valores desde 9 a 50 S/cm à temperatura ambiente, as energias de activação encontradas variam entre 38 e 128 meV. O mesmo comportamento foi observado no poder termoeléctrico, que é compatível com o regime semiconductor observado na condutibilidade eléctrica. A ausência de um regime metálico e as variações observadas nas propriedades de transporte podem ser atribuídas à desordem e variação do conteúdo de  $\text{PF}_6$  observado nas amostras, ver P11.

Um novo vidro de spin foi encontrado, o  $(\alpha\text{-DT-TTF})_2[\text{Au}(\text{mnt})_2]$ , embora haja alguma desordem introduzida pelo doador esta desordem não afecta a orbital molecular de mais alta energia preenchida e consequentemente o comportamento de vidro de spin observado é semelhante ao que já havia sido observado no sal semelhante sem desordem, o  $(\text{DT-TTF})_2[\text{Au}(\text{mnt})_2]$ . A condutibilidade eléctrica à temperatura ambiente é de 2 S/cm, bastante inferior à do  $(\text{DT-TTF})_2[\text{Au}(\text{mnt})_2]$  (10-50 S/cm), exibindo um comportamento semiconductor e uma energia de activação de 36 meV. Este comportamento é consistente com as menores interacções intermoleculares ( $t_1$ ) calculadas ao longo das cadeias. As medidas realizadas mostram um decréscimo do poder termoeléctrico com a temperatura e cruza mesmo o zero a 230K, estas medidas são consistentes com o comportamento semiconductor observado, ver P14, C17 e C21.

O  $(\text{DT-TTF})_2[\text{Pd}(\text{mnt})_2]$  é um sal iónico com comportamento diferente do que se esperava, porque o complexo de Pd é dianiónico e com tal o doador está completamente oxidado. As propriedades de transporte eléctrico confirmam este sal como um semiconductor quasi-unidimensional de energia de activação,  $E_a=172\text{meV}$ . O poder termoeléctrico é alto e negativo e quase constante (cerca de  $-430\mu\text{V/K}$ ), o que confirma o facto de ter energia de activação alta e um carácter 1D extremo e condução por electrões, ver P8.

Dois novos complexos neutros o  $[\text{Ni}(\alpha\text{-mtpdt})_2]$  e o  $[\text{Au}(\alpha\text{-mtpdt})_2]$  foram preparados sob a forma de pó e a condutibilidade eléctrica foi medida em pastilhas feitas a partir do pó

comprimido. Foi possível determinar a estrutura do  $[\text{Ni}(\alpha\text{-mtpdt})_2]$ . Estes complexos neutros são semicondutores com energias de activação elevadas 325meV(Ni) e 287meV(Au), o que é compatível com a estrutura observada, em que existem interacções fracas entre as moléculas do complexo.

### *Filmes de Condutores Moleculares Neutros*

E. Laukhina<sup>2</sup>, V. Lebedev<sup>2</sup>, V. Laukhin<sup>2</sup>, E.B. Lopes<sup>1</sup>, A. I. S. Neves<sup>1</sup>, D. Belo<sup>1</sup>,  
M. Almeida<sup>1</sup>, J. Veciana<sup>2</sup>, C. Rovira<sup>2</sup>

1- Grupo Estado Sólido, IST/CTN

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

No âmbito da colaboração regular do grupo de Estado Sólido com o grupo da Professora Concepció Rovira, merece destaque o trabalho realizado sobre os condutores moleculares neutros ou de um só componente de amostras de um só componente do metal molecular  $\text{Au}(\alpha\text{-tpdt})_2$ , sob a forma de filmes finos depositados em superfícies poliméricas. O estudo das propriedades de transporte destes materiais em forma de filmes flexíveis revela possíveis futuras aplicações deste tipo de materiais como sensores de tensão e deformação, ver P4, C2 e C15.

### *Seda de aranha funcionalizada para aplicações electrónicas*

E. Steven<sup>2</sup>, E. B. Lopes<sup>1</sup>, J.S. Brooks<sup>2</sup>

1- Grupo Estado Sólido, IST/CTN

2- National High Magnetic Field Lab. (NHMFL) de Tallahassee, EUA

Numa colaboração com professor James Brooks do Laboratório Nacional de campos Magnéticos Intensos (NHMFL) de Tallahassee dos EUA e o seu estudante Post Doc Eden Steven sobre as propriedades da seda de aranha funcionalizada, continuou-se o trabalho do estudo do efeito de Seebeck na seda de aranha funcionalizada do qual resultou a publicação P2 e a comunicação C1. Este estudo prossegue com novos tipos de funcionalização da seda de aranha.

## *Materials Intermetálicos*

A. P. Goncalves<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>, Y. Verbovytsky<sup>1</sup>, D. Berthebaud<sup>2</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>, A. Casaca<sup>4</sup>, D. I. Gorbunov<sup>5</sup>, A. V. Andreev<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

4- Dep. Física, ISEL

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 várias colaborações com investigadores de instituições que se encontram acima referidos de que resultaram várias publicações e comunicações abaixo descritas.

O  $U_9Fe_7Ge_{24}$  apresenta um comportamento metálico, embora apresente uma resistividade residual, acima dos  $100 \mu\Omega \text{ cm}$ , o que aponta para uma elevada presença de defeitos. O poder termoeléctrico decresce com a temperatura até 250K, nesta temperatura apresenta uma muito pequena anomalia, que provavelmente se deve à presença de uma pequena contaminação da fase de  $UFe_6Ge_6$ . O máximo alargado observado a 50 K pode ser devido a um efeito de “phonon-drag” e/ou Nielsene Taylor. As propriedades de transporte observadas são compatíveis com um típico sistema metálico de banda larga, ver P1.

Um novo composto  $U_3Fe_4Ge_4$  foi sintetizado e cristaliza numa estrutura do tipo  $Gd_3Cu_4Ge_4$ . As propriedades de transporte eléctrico revelam um comportamento semimetálico. O poder termoeléctrico varia desde valores positivos acima de 80 K para valores negativos a baixas temperaturas, sugerindo que ambos, electrões e buracos contribuem para a condução. A 17 K, o  $U_3Fe_4Ge_4$  sofre uma transição ferromagnética, o que coincide com o que se observa na resistividade. Entre 2–14 K, a resistividade e a magnetização seguem uma lei em  $T^2$ . A resistividade para  $T < 14K$  segue uma relação típica de líquido de Fermi,  $\rho(T) = \rho_0 + AT^2$ , em que  $\rho_0$  é a resistividade residual a baixas temperaturas, desta relação obtém-se  $\rho_0 = 0.464 \mu\Omega \text{ m}$ , e  $A = 0.00386 \mu\Omega \text{ m/K}^2$ , sugerindo que a resistividade é dominada por interacções electrão–electrão e electrão–magnão a baixas temperaturas, ver P12.

Estudou-se o já conhecido superconductor ferromagnético de Urânio  $UCoGe$  para tentar correlacionar a dificuldade em reproduzir as propriedades físicas e as variantes estruturais de uma amostra real, ver C18 e C19.

Estudaram-se as propriedades de transporte e magnetoresistência de um monocristal  $U_{34}Fe_{4-x}Ge_{33}$ . A resistividade do monocristal de  $U_{34}Fe_{4-x}Ge_{33}$  apresenta um comportamento metálico, passando a aumentar com a descida de temperatura, abaixo da temperatura de transição ferromagnética ( $T_c=28K$ ), apresentado assim um mínimo alargado a 26K. O poder termoelétrico é pequeno e positivo, em bom acordo com o comportamento metálico observado e indicando condução dominada por buracos. É possível observar um pequeno aumento do declive da curva do poder termoelétrico devido à transição ferromagnética. O mínimo observado na resistividade abaixo de  $T_c$  e a sua deslocação para temperaturas mais altas sob campo magnético crescente pode ser devido ao efeito da desordem na sub-rede Fe/Ge nas propriedades físicas, ver P18.

No seguimento de trabalho anterior na fase de Laves  $U_2Fe_3Ge$ , estudaram-se as propriedades de transporte e magnéticas de um monocristal de  $U_2Fe_3Ge$  sob pressão hidrostática, ver P17.

Foram estudadas as propriedades de transporte eléctrico das novas fases ternárias  $YbZn_xGa_{(4-x)}$  e  $Yb_3Zn_{(11-x)}Ga_x$ , estes compostos são diamagnéticos e tem uma resistividade metálica que segue uma lei de Bloch-Gruneisen o que confirma o carácter não magnético destas fases ternárias, ver P3.

Um monocristal de CuS (covelite) de boa qualidade foi sintetizado e foram estudadas em detalhe as propriedades de transporte eléctrico e magnetoresistência deste superconductor de tipo I. Já eram conhecidos estudos da supercondutividade do CuS em pedaços do mineral natural covelite. O monocristal de covelite estudado sofre uma transição estrutural de simetria hexagonal para ortorrômbica a 55K, que se observa na resistividade como uma pequena anomalia e abaixo deste temperatura a resistividade pode ser descrita por um modelo quasi-bidimensional consistente com confinção de carga a mais baixas temperaturas, antes da transição superconductor, que foi observada a 1.62K. A magnetoresistência transversa torna-se importante abaixo de 30K e atinge valores altos, como por exemplo 470% para um campo de 16T a 5K, este comportamento pode ser atribuído a um efeito de banda, com uma possível variação da densidade de estados junto ao nível de Fermi induzida pelo campo magnético. O campo crítico à temperatura zero é baixo e foi estimado  $\mu_0 H_{c\ perp}(0) \sim 25mT$ . O poder termoelétrico apresenta uma dependência com a temperatura pouco comum, o que resulta provavelmente de um sistema de bandas relativamente complexo, onde ambos electrões e buracos estão envolvidos nos processos de condução e sofrem uma complexa variação com a temperatura. Deste trabalho resultou a publicação P6.

### ***1.1- Coordenação de programas e de projectos de I& D***

- Coordenadora do projecto FCT- “*Novos Sistemas Termoeléctricos*”, PTDC/CTM/102766/2008. 1stFebruary 2010 – 31 July 2013

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

- Membro do projecto- “*Electrocristalização de sais de transferência de carga; da cristalogénese aos dispositivos electrónicos*”, PTDC/QUI-QUI/101788/2008, 2010-2012

- Membro do projecto- “*Efeitos de pressão e campo magnético em sistemas de duas cadeias(condutoras e magnéticas); alfa-(Per)<sub>2</sub>[M(mnt)<sub>2</sub>]*”, PTDC/FIS/113500/2009, 2011-2013.

- Membro do projecto- “*Verre Thermo-Generateur*”, ANR-PROGELEC-VTG , 2011-2015 , financiado pela *Agence Nationale de la Recherche (ANR) Francesa*.

- Membro do projecto- “*Processable Neutral based molecule conductors for electronic applications*”, PTDC/QEQ-SUP/1413/2012

### **1.3- Publicações**

#### **1.3.1- Revistas Internacionais**

P1- M.S. Henriques, D. Berthebaud, L.C.J. Pereira, E.B. Lopes, M.B.C. Branco, H. Noël, O. Tougait, E. Šantavá, L. Havela, P.A. Carvalho, A.P. Gonçalves, Structural and physical properties of the  $U_9Fe_7Ge_{24}$  uranium germanide, *Intermetallics* 19, 841-847 (2011). doi:10.1016/j.intermet.2010.12.004

P2 - E. Steven, J. G. Park, A. Paravastu, E. B. Lopes, J. S Brooks, O. Englander, T. Siegrist, P. Kaner, R. G. Alamo, Physical characterization of functionalized spider silk: electronic and sensing properties, *Sci. Technol. Adv. Mat.* 12, 055002 (2011). doi:10.1088/1468-6996/12/5/055002

P3- Y. Verbovytsky, L.C.J. Pereira, E.B. Lopes, A.P. Goncalves, Crystal structure and properties of the new ternary  $YbZn_xGa_{(4-x)}$  and  $Yb_3Zn_{(11-x)}Ga_x$  phases, *Intermetallics* 19, 1989-1995 (2011). doi: 10.1016/j.intermet.2011.06.019

P4- E. Laukhina, V. Lebedev, V. Laukhin, E.B. Lopes, A. I. S. Neves, D. Belo, M. Almeida, J. Veciana, C. Rovira, Towards Flexible Lightweight Conducting Materials: Polycarbonate Films “Self-Metallized” With a Single Component Molecular Conductor, *Organic Electronics* 13, 894-898 (2012). doi: 10.1016/j.orgel.2012.01.031

P5- A.P. Goncalves, E.B. Lopes, G. Delaizir, B. Lenoir, A. Piarristeguy, A. Pradel, J. Monnier, P. Ochin, C. Godart, Semiconducting glasses: A new class of thermoelectric materials?, *Journal of Solid State Chemistry* 193, 26-30 (2012). doi:10.1016/j.jssc.2012.03.031

P6- A. Casaca, E.B. Lopes, A.P. Gonçalves, M. Almeida, Electrical transport properties of CuS single crystals, *J. Phys. Condens. Matter* 24, 015701 (2012). doi: 10.1088/0953-8984/24/1/015701

P7- M. Afonso, R.A.L. Silva, M. Matos, E.B. Lopes, J.T. Coutinho, L.C.J. Pereira, R.T. Henriques, M. Almeida, Growth of (Perylene)<sub>2</sub> [Pd(mnt)<sub>2</sub>] crystals, *J. Crystal Growth*, 340, 56-60 (2012). doi:10.1016/j.jcrysgro.2011.11.083

P8- R.A.L. Silva, M.L. Afonso, I.C. Santos, D.Belo, R.R. Freitas, E.B. Lopes, J.T. Coutinho, L.C.J. Pereira, R.T. Henriques, M. Almeida, C. Rovira, (DT-TTF)<sub>2</sub>[Pd(mnt)<sub>2</sub>]: An unusual ionic salt, *Phys. Status Solidi C* 9, No. 5, 1134-1136 (2012). doi:10.1002/pssc.201100631

P9- M.L. Afonso, R.A. Silva, L.C.J. Pereira, J.T. Coutinho, R.R. Freitas, E.B. Lopes, M. Matos, R.T. Henriques, A.Viana, M. Almeida Electrocrystallisation of (Per)<sub>2</sub> [Pd(mnt)<sub>2</sub>], *Phys. Status Solidi C* 9, No. 5, 1131-1133 (2012). doi:10.1002/pssc.201100632

P10- A. Neves, E.B. Lopes, M. Almeida, D. Belo, New copper thiophenedithiolenes for single component molecular metals, *Physica Status Solidi C* 9, 1137-1139 (2012). doi:10.1002/pssc.201100635

P11- R.A.L. Silva, A.I.S. Neves, M.L. Afonso, I.C. Santos E.B. Lopes, F. del Pozo, R. Pfattner, M. Mas-Torrent, C. Rovira, M. Almeida, D. Belo,  $\alpha$ -DT-TTF; a detailed study of an electronic donor and its derivatives, *European Journal of Inorganic Chemistry* 13, 2440-2446 (2103). doi:10.1002.ejic.201201362

P12- D. Berthebaud, O. Tougait, M. Potel, E. B. Lopes, J. C. Waerenborgh, A. P. Gonçalves, H. Noel, Crystal structure and electronic properties of the new compound U<sub>3</sub>Fe<sub>4</sub>Ge<sub>4</sub>, *Journal of Alloys and Compounds*, 554, 408-413 (2013), doi:10.1016/j.jallcom.2012.11.162

P13- C. Brooks, I. Martin, P. Day, E. B. Lopes, M. Almeida, K. Kikuchi, W. Fujita, K. Sasamori, H. Aktusu, J. D. Wallis, Hydrogen bonded anion ribbons, networks and clusters and sulfur–anion interactions in novel radical cation salts of BEDT-TTF with sulfamate, pentaborate and bromide, *Dalton Transactions*, 42, 6645-6654 (2013), doi:10.1039/c3dt32430c

P14- R.A.L. Silva, A.I.S. Neves, J.T. Coutinho, L.C.J. Pereira, I.C. Santos, E.B. Lopes, C. Rovira, D. Belo, M. Almeida, (alpha-DT-TTF)<sub>2</sub>[Au(mnt)<sub>2</sub>]; a weakly disordered organic spin-ladder, *Inorganic Chemistry*, 52, 5300-5306 (2013), doi:10.1021/ic400246y

P15- J.B. Vaney, G. Delaizir, E. Alleno, O. Rouleau, A. Piarristeguy, J. Monnier, C. Godart, M. Ribes, R. Escalier, A. Pradel, A.P. Goncalves, E.B. Lopes, G.J. Cuello, P. Ziolkowski, E. Muller, C. Candolfi, A. Dauscher, B. Lenoir, "A comprehensive study of the crystallization of Cu-As-Te glasses: microstructure and thermoelectric properties", *Journal of Materials Chemistry*, 1, 8190-8200 (2013) ), doi:10.1039/c3ta11159h

P16- J.B. Vaney, A. Piarristeguy, A. Pradel, E. Alleno, B. Lenoir, C. Candolfi, A. Dauscher, A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, G. Delaizir, J. Monnier, M. Ribes, C. Godart, "Thermal stability and thermoelectric properties of Cu<sub>x</sub>As<sub>40-x</sub>Te<sub>60-y</sub>Se<sub>y</sub> semiconducting glasses", *Journal of Solid State Chemistry*, 203, 212-217 (2013), doi:10.1016/j.jssc.2013.04.015

P17- M.S. Henriques, D.I. Gorbunov, A.V. Andreev, Z. Arnold, S. Surble, S. Heathman, J.C. Griveau, E.B. Lopes, J. Prchal, L. Havela, A.P. Goncalves, Effects of high pressure on the structural, magnetic, and transport properties of the itinerant 5 f ferromagnet U<sub>2</sub>Fe<sub>3</sub>Ge, *Phys. Rev. B* 89, 054407 (2014). doi: 10.1103/PhysRevB.89.054407

P18- 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<sub>34</sub>Fe<sub>4-x</sub>Ge<sub>33</sub>: structure and physical properties, aceite para publicação no *Journal of Alloys and Compounds*.

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

C1- E. Steven, J.G. Park, A. Paravastu, E.B. Lopes, J.S. Brooks, O. Englander, T. Siegrist, "Physical Characterization of Functionalized Spider Silk for Electronic and Sensing Applications, 9th International Symposium on Crystalline Organic Metals; Superconductors and Ferromagnets - ISCOM'2011, Poznan, Poland, September 25-30, 2011, oral.

C2- E. Laukhina, V. Lebedev, V. Laukhin, R. Pfatner, M. Mas, L. Ferreras, E.B. Lopes, A. Neves, D. Belo, M. Almeida, J. Veciana, C. Rovira, Polymeric films, "self-metalized" with Organic Molecular Conductors, 9th International Symposium on Crystalline Organic Metals; Superconductors and Ferromagnets - ISCOM'2011, Poznan, Poland, September 25-30, 2011, oral.

C3- M.L. Afonso, R.A.L. Silva, L.C.J. Pereira, R.R. Freitas, E.B. Lopes, M. Matos, R.T. Henriques, A. Viana, M. Almeida, Electrocrystalization of (Perylene)<sub>n</sub>M(mnt)<sub>2</sub> Compounds; The M=Pd salts, 9th International Symposium on Crystalline Organic Metals; Superconductors and Ferromagnets - ISCOM'2011, Poznan, Poland, September 25-30, 2011, poster.

C4- R.A.L. Silva, M.L. Afonso, I.C. Santos, D. Belo, R.R. Freitas, E.B. Lopes, J. Coutinho, L.C.J. Pereira, R.T. Henriques, M. Almeida, C. Rovira, Electrocrystallisation of (DT-TTF)<sub>n</sub>[M(mnt)<sub>2</sub>]; The M=Pd salt, 9th International Symposium on Crystalline Organic Metals; Superconductors and Ferromagnets - ISCOM'2011, Poznan, Poland, September 25-30, 2011, poster.

C5- E.B. Lopes, A.P. Gonçalves, G. Delaizir, C. Godart, CuAsTe a New Family of Thermoelectric Glasses, 9th European Conference on Thermoelectrics- ECT2011, Thessaloniki, Greece, September 28-30, oral.

C6- A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, G. Delaizir, C. Godart, Semiconducting Glasses: A New Class of Thermoelectric Materials?, 9th European Conference on Thermoelectrics - ECT2011, Thessaloniki, Greece, September 28-30, oral.

C7- E.B. Lopes, A.P. Gonçalves, G. Delaizir, C. Godart, Chalcogenide Glasses as Promising Thermoelectric Materials, Workshop on Strongly Correlated Electron and Complex Systems, ITN-Sacavém, Portugal, November 10-11, 2011, oral.

C8- A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, A. Jacquot, C. Godart, Improving thermoelectrics in CePd<sub>3</sub>, E-MRS 2012 Spring Meeting, Strasbourg, France, May 14-18( 2012), oral

C9- A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, A. Jacquot, C. Godart, CePd<sub>3</sub>: a strongly correlated system for low temperature thermoelectric applications, 10th Prague Colloquium on f-Electron Systems, Prague, Czech Republic, 21st – 24th August (2012), oral

C10- 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, A.P. Gonçalves, Uranium-iron-germanium intermetallic compounds, 10th Prague Colloquium on f-Electron Systems, Prague, Czech Republic, 21st – 24th August (2012), oral

C11- E.B. Lopes, A.P. Gonçalves, G. Delaizir, C. Godart, CuAsTe a Family of Thermoelectric Glasses, 18th International Conference on Solid Compounds of Transition Elements, Lisboa, Portugal, 31st March -5th April (2012), poster

C12- 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, 18th International Conference on Solid Compounds of Transition Elements, Lisboa, Portugal, 31st March - 5th April (2012), poster

C13- J. B. Vaney, A. Piarristeguy, A. Pradel, E. Alleno, B. Lenoir, C. Candolfi, A. Dauscher, A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, G. Delaizir, J. Monnier, C. Godart, Thermal stability and thermoelectric properties of Cu<sub>x</sub>As<sub>40-x</sub>Te<sub>60-y</sub>Se<sub>y</sub> semiconducting glasses, 31st International & 10th European Conference on Thermoelectrics, July 9th -12th (2012), Aalborg, Denmark, poster

C14- R.A.L. Silva, A.I.S. Neves, M.L. Afonso, I.C. Santos, E.B. Lopes, M. Mas-Torrent, C. Rovira, M. Almeida, D. Belo,  $\alpha$ -DT-TTF ; a new electronic donor, Workshop on Molecular Materials with Strong Electronic Correlations, at the, Institut des Sciences Chimiques de Rennes, Rennes, France, 23th -24th October (2012), oral convidada.

C15- E. Laukhina, V. Lebedev, V. Laukhin, A.P. del Pino, E.B. Lopes, A.I.S. Neves, M.Almeida, J. Veciana, C. Rovira, D. Belo, Single Component molecular metals in plastic electronics, in the scope of subject Sistemas Químicos e Reactividade do 2º Ciclo em Química, Lisboa, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, 12nd April (2012). aula convidada.

- C16- A. I. S. Neves, I. C. Santos, J. T. Coutinho, L. C. J. Pereira, E. B. Lopes, R. T. Henriques, H. Alves, M. Almeida, D. Belo, New bisditholene complexes based on substituted thiophenic ligands for magnetic and conducting materials, Workshop on Molecular Materials with Strong Electronic Correlations, at the, Institut des Sciences Chimiques de Rennes, Rennes, France, 23th -24th October (2012), oral convidada.
- C17- M. Almeida, R.A.L. Silva, D. Belo, E.B. Lopes, J.T. Coutinho, L.C.J. Pereira, I.C. Santos, C. Rovira, Molecular Spin Ladders; Strong and Weak Disorder Effects, The 10th International Symposium on Crystalline Organic Metals Superconductors and Magnets (ISCOM2013), Delta Centre-Ville Montreal, Canada, July 14-19, 2013, oral.
- C18- A.P. Gonçalves, M.S. Henriques, E.B. Lopes, L.C.J. Pereira, T. Wiss, L. Havela, HRTEM studies on the UCoGe ferromagnetic superconductor, 43èmes Journées des Actinides, Sestri Levante, Italy, April 6-9, 2013, oral
- C19- A.P. Gonçalves, M.S. Henriques, E.B. Lopes, L.C.J. Pereira, T. Wiss, L. Havela, The UCoGe ferromagnetic superconductor: results from HRTEM studies, Actinides 2013, Karlsruhe, Germany, July 21-26, 2013, oral
- C20- A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, G. Delaizir, J.B. Vaney, B. Lenoir, A. Piarristeguy, A. Pradel, J. Monnier, E. Alleno, C. Godart, New thermoelectric materials: the disorder paradigm, 1st CLUSTER Workshop in Materials and Nanotechnology, IST, Lisbon, December4-6, 2013, oral
- C21- R.A.L. Silva, D. Belo, E.B. Lopes, J.T. Coutinho, L.C.J. Pereira, I. C. Santos, C. Rovira, M. Almeida, Molecular Spin Ladders; Strong and Weak Disorder Effects, ISCOM 2013, Montreal, Canada, July 14-19, 2013, oral.
- C22- 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  $\alpha$ -DT-TTF, 2nd Workshop on Strongly Correlated Electron and Complex Systems: From Intermetallics to Molecular Materials, ITN, Sacavém, November 11 12, 2013, oral
- C23- J.B. Vaney, G. Delaizir, E. Alleno, A. Piarristeguy, J. Monnier, C. Godart, E.B. Lopes, A.P. Gonçalves, A. Pradel, B. Lenoir, Chalcogenide Glasses and Glass-ceramics in the Cu-As-Te System: Toward New Thermoelectric Materials?, 2013 MRS Spring Meeting & Exhibit, San Francisco, California April 1-5, 2013, oral

C24- J.B. Vaney, J. Monnier, G. Delaizir, E. Alleno, A. Piarristaguy, M. Ribes, A. Pradel, A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, C. Godart, B. Lenoir, Glass-ceramization in the  $\text{Cu}_{30}\text{As}_{10}\text{Te}_{60-x}\text{Se}_x$  system: a route for improving the thermoelectric properties of amorphous materials, 32th International Conference on Thermoelectrics-ICT2013, Kobe, Japan June30 -July 4, 2013, oral

C25- J.B. Vaney, A. Piarristeguy, A. Pradel, E. Alleno, B. Lenoir, C. Candolfi, A. Dauscher, A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, G. Delaizir, J. Monnier, M. Ribes, C. Godart, Cu-As-Te glassy systems: challenges and prospects for thermoelectric applications, Symposium C – Advanced Thermoelectrics: from Materials to Devices, E-MRS Spring Meeting, Strasbourg, France, May 27-31, 2013, oral

C26- A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, G. Delaizir, J.B. Vaney, B. Lenoir<sup>3</sup>, C. Candolfi, A. Dauscher, A. Piarristeguy, M. Ribes, R. Escalier, A. Pradel, J. Monnier, E. Alleno, O. Rouleau, C. Godart, Recent Advances on Thermoelectric Glasses, Symposium C – Advanced Thermoelectrics: from Materials to Devices, E-MRS Spring Meeting, Strasbourg, France, May 27-31, 2013, poster

C27- J.B. Vaney, J. Monnier, G. Delaizir, E. Alleno, A. Piarristaguy, M. Ribes, A. Pradel, A.P. Gonçalves, E.B. Lopes, C. Godart, B. Lenoir, The use of Spark Plasma Sintering (SPS) to prepare glass-ceramics in the Cu-As-Te system for thermoelectric applications, EUROMAT2013, Sevilla, Spain, September 8-13, 2013, poster

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

#### **3.1- Orientação de Teses de Mestrado e Doutoramento**

- Formação do Bolseiro Licenciado Timóteo Mendes no âmbito do trabalho desenvolvido no projecto “*Novos Sistemas Termoeléctricos*”

-Formação do Bolseiro Licenciado Rui Freitas no âmbito do trabalho desenvolvido no projecto “*Electrocristalização de sais de transferência de carga; da cristalogénese aos dispositivos electrónicos*”

- Formação da estudante de Doutoramento do Instituto Superior Técnico, Margarida de Sousa Henriques que está a fazer sua tese de doutoramento na síntese e estudo das propriedades de novos compostos intermetálicos baseados no Urânio.

### **4- Serviços à Comunidade**

#### **4.1- Organização de Conferências**

Member of the Organizing Committee, 18th International Conference on Solid Compounds of Transition Elements, Lisboa, Portugal, 31st March -5th April (2012)

#### **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 10500 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, 31 de Março de 2014.

Elsa Branco Lopes