

6.º Encontro Nacional de Química-Física Call for Papers

Sociedade Portuguesa de Química
Divisão de Química-Física

Local: Departamento de Química e Bioquímica Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa

Data: 31 de Agosto a 3 de Setembro, 2003

Web site: <http://6eqf-spq.fc.ul.pt>

E-mail: 6eqf-spq@fc.ul.pt

Objectivos: Promover o contacto entre químicos-físicos, professores e alunos, estimulando a sua participação em lições plenárias, comunicações orais,

painéis e mesas-redondas que transmitam à comunidade os avanços mais recentes nas diferentes áreas da Química-Física.

Tema Unificador: A Química-Física no seio da Complexidade

Lições Plenárias

Neural Networks in Drug Design

Johann Gasteiger, Universitat Erlangen-Nurnberg, Germany

Redes Neurais para a Previsão de Desvios Químicos em Ressonância Magnética Nuclear

João Aires de Sousa, Universidade Nova de Lisboa, Portugal

O Papel da Química-Física na Abordagem de Problemas Ambientais

Sebastião J. Formosinho, Universidade de Coimbra, Portugal

Solvent Effects on Homolytic Bond Dissociation Energies. Microsolvation Modeling and Statistical Mechanics Simulations

Benedito Costa Cabral, Universidade de Lisboa, Portugal

A Vida e a Electroquímica das Interfaces

António Fernando Silva, Universidade do Porto, Portugal

Relaxações Lentas em Sistemas Complexos

Joaquim J. Moura Ramos, Universidade Técnica de Lisboa, Portugal

Participação da SPQ e dos Químicos Portugueses nas revistas Europeias de Química

1. Resenha histórica

No início dos anos 90, as Sociedades Europeias de Química iniciaram a discussão da substituição das revistas nacionais por Revistas Europeias de elevada qualidade, de modo a dar maior visibilidade à Química Europeia. Em 1995, de um acordo entre a Sociedade Alemã de Química (GDCh) e a Wiley-VCH, surge uma nova revista: "*Chemistry – A European Journal*". Em 1997 a GDCh convidou outras Sociedades Europeias de Química a juntarem-se ao projecto abdicando para tal das suas próprias revistas e comprometendo-se a divulgar as novas revistas junto dos seus associados. O primeiro factor de impacto (ver caixa I) do "*Chemistry – A European Journal*" (F.I.=8.184), publicado em 1997 colocou esta revista no topo das revistas de química. Este sucesso, que foi sendo sucessivamente confirmado, levou a que a iniciativa fosse alargada a outras Sociedades Europeias de Química. Este alargamento coincidiu com a publicação de duas novas revistas especializadas em 1999: o "*Euro-*

pean Journal of Organic Chemistry" (EurJOC) e o "*European Journal of Inorganic Chemistry*" (EurJIC). Os primeiros factores de impacto publicados em 2001 (2.222 para o EurJIC e 2.150 para

o EurJOC) foram uma boa surpresa, posicionando estas revistas entre as melhores da sua área científica. O crescimento do número de artigos e páginas tem sido uma constante sem que tal

Química Inorgânica

Revista	Artigos Nacionais (2000-2002)	F. I. (2001)	Total artigos (2001)
Organometallics	16	3.182	840
Inorg. Chem.	24	2.946	1107
Dalton Trans.	40	2.820	558
Eur. J. Inorg. Chem.	32	2.475	377
J. Organomet. Chem.	47	1.803	783

Química-Física

Revista	Artigos Nacionais (2000-2002)	F. I. (2001)	Total artigos (2001)
ChemPhysChem	4	4.217	100
J. Phys. Chem. B	35	3.379	1625
J. Chem. Phys.	34	3.147	2488
Langmuir	34	2.963	1165
J. Phys. Chem. A	53	2.630	1439
Chem. Phys. Lett.	29	2.364	1429
Chem. Phys.	18	1.957	350
PhysChemChemPhys	55	1.787	823

tenha sacrificado a qualidade (os factores de impacto destas revistas aumentaram em 2002: 2.475 para o EurJIC e 2.193 para o EurJOC). A Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) aderiu ao projecto em 1999, tendo assinado um acordo que incluiu as 3 revistas e que posteriormente se consubstanciou na "Editorial Union of Chemistry Societies" (EUChemSoc). As discussões no seio da EUChemSoc levaram ao reconhecimento de que havia espaço para o aparecimento de outras revistas, que cobrissem áreas interdisciplinares de grande actualidade. Assim surgem duas novas re-

vistas em 2000: o "ChemPhysChem" para a área da Química-Física, e o "ChemBioChem" para a área de interface com a biologia. O primeiros factores de impacto publicados em Julho de 2002 (4.217 para o ChemPhysChem e 2.920 para o ChemBioChem) mostraram a elevada qualidade média dos artigos aí publicados. O crescimento sustentado que se tem verificado em termos do número de artigos e páginas mostra que existe espaço para que estas revistas continuem a crescer.

A Sociedade Portuguesa de Química tornou-se deste modo co-proprietária de

cinco revistas científicas europeias: *Chemistry – A European Journal*, *European Journal of Inorganic Chemistry* (EurJOC), *European Journal of Organic Chemistry* (EurJIC), *ChemPhysChem* e *ChemBioChem* (ver informação sobre estas revistas em www.spq.pt).

Os Químicos Portugueses ao publicarem nas revistas Europeias garantem a divulgação e internacionalização do seu trabalho em revistas de elevada qualidade e contribuem ao mesmo tempo para o financiamento da sua Sociedade. Com estes meios adicionais a SPQ pode servir melhor a Comunidade Científica, podendo tomar iniciativas que lhe estariam de outro modo vedadas por condicionamentos financeiros. É já no próximo ano que se celebra o 10.º aniversário do lançamento do *Chemistry : A European Journal*, pelo que a SPQ decidiu divulgar alguns dados estatísticos e publicitar a lista de artigos publicados por "autores a trabalhar em Portugal" (como se compreende, o conceito de "autores portugueses" é muito dúbio).

2. Dados estatísticos

Os dados estatísticos foram obtidos por pesquisa bibliográfica na base de dados ISI Web of Science, com as condições "Journal=nomes_das_revistas, Address=Portugal", o que identifica os trabalhos com pelo menos um autor com endereço em Portugal. Qualquer erro detectado deverá ser comunicado à Direcção da SPQ (preferencialmente para spq@spq.pt ou jgmartinho@ist.utl.pt). Estes dados incluem a análise comparativa por domínio científico dos trabalhos publicados por "Portugueses" na revista Europeia e nas revistas concorrentes da área científica. A escolha das revistas é da exclusiva responsabilidade dos autores.

A breve análise destes dados permite concluir que as revistas Europeias se posicionam, em termos de qualidade, entre as melhores revistas da especialidade. O tempo de publicação está dentro da média das revistas concorrentes e constitui preocupação constante da Sociedade Editorial. Os artigos podem ser submetidos por via electrónica. As revis-

Química Orgânica

Revista	Artigos Nacionais (2000-2002)	F. I. (2001)	Total artigos (2001)
J. Org. Chem	6	3.280	1370
Tetrahedron Lett.	30	2.280	2283
Tetrahedron	20	2.276	1109
J. Chem. Soc. Perk T 119		2.208	450
Helv. Chim. Acta	7	2.2027	287
Eur J. Org. Chem.	11	2.193	510
J. Chem Soc Perk T 2	19	1.837	359
Polyhedron	10	1.200	440

Bioquímica

Revista	Artigos Nacionais (2000-2002)	F. I. (2001)	Total artigos (2001)
J. Biol. Chem.	32	7.258	6341
Biophys. J.	33	4.636	578
Biochemistry-US	17	4.114	1755
ChemBioChem.	4	2.920	104

Geral

Revista	Artigos Nacionais (2000-2002)	F. I. (2001)	Total artigos (2001)
Angew. Chem. Int. Edit.	3	8.255	1007
J. Am. Chem. Soc.	18	6.079	2327
Chem. Eur. J.	16	4.614	548
Chem. Commun.	12	3.902	1265
New J. Chem.	13	2.440	283

tas Europeias têm ainda um potencial de crescimento desde que as publicações em química aumentem e as revistas consigam dilatar o seu "share" face às revistas concorrentes.

Embora as revistas Europeias sejam relativamente recentes, são já conhecidas dos Químicos Portugueses que as têm escolhido para publicar os seus trabalhos. Existe ainda um potencial de crescimento particularmente importante nas áreas da Química-Física e da Bioquímica.

SPQ apela a todos os químicos Portugueses para que considerem a publicação dos seus trabalhos nas revistas Europeias a par de outras revistas em que habitualmente publicam. Deste modo estão a dar visibilidade e a prestigiar a Química Portuguesa e Europeia e a contribuir para o fortalecimento da Sociedade Portuguesa de Química.

3. Artigos com origem em Portugal em 2002

A publicação de artigos com origem em Portugal é feita ao longo do ano na página "Revistas Europeias" do *sítio* da SPQ (www.spq.pt) e anualmente no Boletim. No ano de 2002 foram publicados 20 artigos, apresentados seguidamente por ordem alfabética de primeiro autor.

- Platas-Iglesias C, Vander Elst L, Zhou WZ, Muller RN, Gerales CFGC, Maschmeyer T, Peters JA
Zeolite GdNaY nanoparticles with very high relaxivity for application as contrast agents in magnetic resonance imaging
CHEM-EUR J 8 (22): 5121-5131 NOV 15 2002
- Branco LC, Crespo JG, Afonso CAM
Studies on the selective transport of organic compounds by using ionic liquids as novel supported liquid membranes
CHEM-EUR J 8 (17): 3865-3871 SEP 2 2002
- Ruba E, Mereiter K, Schmid R, Sapunov VN, Kirchner K, Schottenberger H, Calhorda MJ, Veiros LF
Selective C-C bond formation between alkyne mediated by the [RuCp(PR₃)](+) fragment leading to allyl, butadienyl, and allenyl carbene complexes – An experimental and theoretical study
CHEM-EUR J 8 (17): 3948-3961 SEP 2 2002

- Branco LC, Rosa JN, Ramos JJM, Afonso CAM
Preparation and characterization of new room temperature ionic liquids
CHEM-EUR J 8 (16): 3671-3677 AUG 16 2002
- Paz FAA, Khimyak YZ, Bond AD, Rocha J, Klinowski J
Synthesis and characterization of a novel modular cadmium-organic framework with biphenyl-4,4'-dicarboxylate
EUR J INORG CHEM (11): 2823-2828 NOV 2002
- Ferreira R, Freire C, de Castro B, Carvalho AP, Pires J, de Carvalho MB
Encapsulation of copper(II) complexes with pentadentate N3O2 Schiff base ligands in a pillared layered clay
EUR J INORG CHEM (11): 3032-3038 NOV 2002
- Palma E, Correia JDG, Domingos A, Santos
New mixed-ligand Re-V complexes with bis(2-mercaptoethyl) sulfide and functionalized thioimidazolyl ligands
EUR J INORG CHEM (9): 2402-2407 SEP 2002
- Kuhn FE, Groarke M, Bencze E, Herdtweck E, Prazeres A, Santos AM, Calhorda MJ, Romão CC, Gonçalves IS, Lopes AD, Pillinger M
Octahedral bipyridine and bipyrimidine dioxomolybdenum(VI) complexes: Characterization, application in catalytic epoxidation, and density functional mechanistic study
CHEM-EUR J 8 (10): 2370-2383 MAY 17 2002
- Bakker MJ, Vergeer FW, Hartl F, Rosa P, Ricard L, Le Floch P, Calhorda MJ
Bonding and redox properties of [Os-3(CO)(9)(tmbp)(L)] (tmbp=4,4',5,5'-tetramethyl-2,2'-biphosphinine; L = CO, PPh₃) clusters with an unprecedented electron-deficient metallic core and doubly bridging bi-phosphinine dianion
CHEM-EUR J 8 (7): 1741-1752 APR 2 2002
- Calhorda MJ, Romão CC, Veiros LF
The nature of the indenyl effect
CHEM-EUR J 8 (4): 868-875 FEB 15 2002
- Blake AJ, Cacote MHM, Devillanova FA, Garau A, Isaia F, Lippolis V, Pereira CM, Silva F, Tei L
Coordination chemistry of 2,5,8-trithia[9],(2,9)-1,10-phenanthroline (L) toward rhodium(III) at the polarised water/1,2-dichloroethane interface – A possible new approach to the problem of separating Rh-III from chloride media
EUR J INORG CHEM (7): 1816-1822 JUL 2002

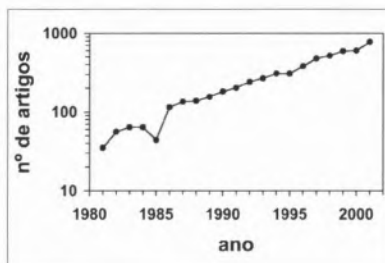
- Nunes CD, Pillinger M, Valente AA, Gonçalves IS, Rocha J, Ferreira P, Kuhn FE
Synthesis and characterization of methyltrioxorhenium(VII) immobilized in bipyridyl-functionalized mesoporous silica
EUR J INORG CHEM (5): 1100-1107 MAY 2002
- Pinto DCGA, Silva AMS, Almeida LMPM, Cavaleiro JAS, Elguero J
3-aryl-5-hydroxyflavones: Synthesis and transformation into aroylpyrazoles
EUR J ORG CHEM (22): 3807-3815 NOV 2002
- Marcos PM, Ascenso JR, Pereira JLC
Synthesis and NMR conformational studies of p-tert-butylidihomoxacalix[4]arene derivatives bearing pyridyl pendant groups at the lower rim
EUR J ORG CHEM (17): 3034-3041 SEP 2002
- Roque A, Lodeiro C, Pina F, Maestri M, Ballardini R, Balzani V
Photochromic properties of 3-methyl-substituted flavylum salts
EUR J ORG CHEM (16): 2699-2709 AUG 2002
- Silva NO, Abreu AS, Ferreira PMT, Monteiro LS, Queiroz MJRP
Synthesis using Suzuki cross couplings of sulfur analogues of dehydrotryptophan with a definite stereochemistry
EUR J ORG CHEM (15): 2524-2528 AUG 2002
- Janosik T, Bergman J, Romero I, Stensland B, Stalhandske C, Marques MMB, Santos MMM, Lobo AM, Prabhakar S, Duarte MF, Florencio MH
Synthetic, spectroscopic, and X-ray crystallographic studies of [1,2,7,8]tetrathiacyclododecino[4,3-b : 5,6-b' : 10,9-b'' : 11,12-b''']tetraindoles
EUR J ORG CHEM (8): 1392-1396 APR 2002
- dos Santos DJVA, Gomes JANF
Molecular dynamics study of the calcium ion transfer across the water/nitrobenzene interface
CHEMPHYSICHEM 3 (11): 946-951 NOV 15 2002
- Ribeiro-Claro PJA, Marques MPM, Amado AM
Experimental and theoretical evidence of C-H center dot center dot center dot O hydrogen bonding in liquid 4-fluorobenzaldehyde
CHEMPHYSICHEM 3 (7): 599-606 JUL 2 2002
- Varandas AJC
HOx catalytic cycles for ozone depletion hiding?
CHEMPHYSICHEM 3 (5): 433-+ MAY 17 2002

Publicações portuguesas em periódicos de Química

Segundo os dados do *Institute for Scientific Information*, as publicações portuguesas em periódicos de Química tiveram um aumento enorme nos últimos 20 anos, como se mostra no gráfico ao lado.

Em 1981, publicaram-se apenas 35 artigos. Em 1991, o número de artigos era já de 203, enquanto que em 2001 foi de 777! A partir de 1986, o crescimento é

aproximadamente exponencial, como se pode ver no gráfico, sendo o tempo de duplicação do número de artigos de aproximadamente 6 anos. Um ajuste



aos dados com este tipo de função faz prever a ultrapassagem da barreira dos 1000 artigos já em 2004. Uma extrapolação mais longa indicaria que os 5000 artigos seriam atingidos em 2016. Irá ser assim? Muito provavelmente não, dadas as tendências demográfica e sociológica, e a situação económica previsível, que apontam para uma estabilização, senão mesmo para um decréscimo dentro de alguns anos.

Mário Nuno Berberan e Santos
Secretário Geral da SPQ

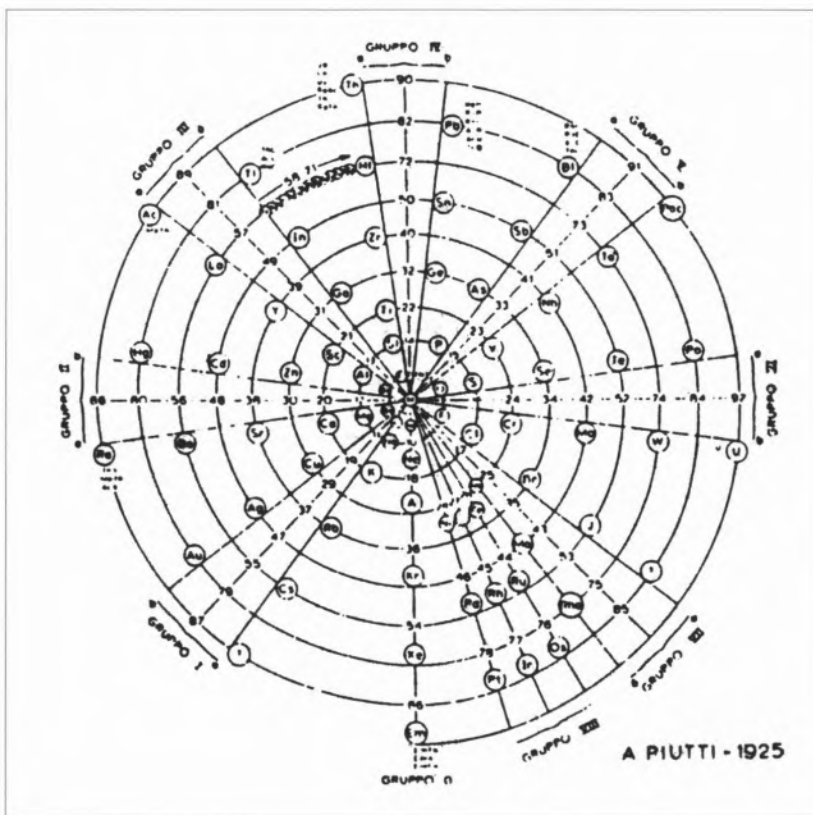


Tabela Periódica

Um elemento em cada casa, uma casa para cada elemento

Em 1869, Dimitri Mendeléev publicava uma lista de todos os elementos até então conhecidos (cerca de 60) à qual chamaria "periodic law & table". Desde então, e com o evoluir da ciência e tecnologia, muitos outros elementos foram descobertos e essa reduzida lista foi aperfeiçoada e modernizada dando ori-

gem à tão conhecida tabela periódica constituída actualmente por mais de uma centena de elementos. Com o objectivo de incentivar um melhor conhecimento da Tabela Periódica, promoveu-se um concurso/exposição de modo a estimular a criatividade artística aplicada ao conhecimento científico. A organização esteve a cargo do Instituto Politécnico do Porto (IPP), Instituto Superior de Engenharia do Porto (ISEP) e Rede

de Química e Tecnologia (REQUIMTE), tendo recebido apoio da SPQ.

Os cerca de 40 trabalhos apresentados a concurso, envolvendo um total de 180 participantes, utilizaram técnicas diversificadas na área da pintura, escultura, música, literatura, fotografia, culinária, vídeo, novas tecnologias... A Tabela Periódica transformou-se, associando o seu carácter científico e semiótico a uma visão mais abrangente no campo da percepção, da estética, da imagem, das sensações, isto é da Arte. Surge assim uma abordagem inovadora e irreverente, de uma matéria classificada pelos alunos de "árida e inacessível". Um processo de levar a Química às camadas mais jovens e a todos aqueles que se interessam pela Ciência.

A exposição foi inaugurada no dia 15 de Maio, com uma largada de balões efectuada por alunos de diversos graus de ensino que formaram uma tabela periódica ao vivo. A exposição estará patente ao público, na sala Museu do Instituto Superior de Engenharia do Porto, sito na Rua de António Bernardino de Almeida, até final de Junho.

Contactos:
Cristina Delerue Matos
cmm@isep.ipp.pt
Tel: 228340500
Fax: 228321159