

Boletim da  
SOCIIDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA



**Propriedade de:**

Sociedade Portuguesa de Química  
ISSN 0870 – 1180  
Registo na DGCS n.º 101 240 de 28/9/72  
Depósito Legal n.º 51 420/91  
Publicação Trimestral  
N.º 93, Abril – Junho 2004

**Redacção e Administração**

Avenida da República, 37 – 4.º  
1050-187 LISBOA  
Tel.: 217 934 637  
Fax: 217 952 349  
E-mail: boletim@dq.fct.unl.pt  
www.spq.pt

**Editor**

Joaquim Faria

**Editores-Adjuntos**

Carlos Folhadela  
Helder Gomes  
Jorge Morgado  
Marcela Segundo

**Comissão Editorial**

Hugh Burrows (FCT-UC)  
Maria José Calhorda (FC-UL)  
J. Ferreira Gomes (FC-UP)  
Ana Lobo (FCT-UNL)  
Irene Montenegro (UM)  
João Rocha (UA)  
M. N. Berberan e Santos (IST-UTL)  
A. Nunes dos Santos (FCT-UNL)

**Colaboradores**

António Lopes  
Christophe Siquet  
Rui Teives Henriques

**Publicidade**

Helder Gomes  
Tel.: 273 303 112  
Fax: 273 313 051  
htgomes@ipb.pt

**Grafismo**

sentido: designers / Nuno Gonçalves

**Execução Gráfica**

FACSIMILE, Offset e Publicidade, Lda  
Rua Vitor Bastos, 10-A  
1070 – 285 LISBOA  
Tel. 213 829 792  
Fax 213 829 794  
facsimile@netcabo.pt

**Tiragem**

2750 exemplares

**Preço avulso**

€12,50  
Assinatura anual – quatro números  
€45

(Continente, Açores e Madeira)

Distribuição Gratuita aos sócios da SPQ

As colaborações assinadas são da exclusiva responsabilidade dos seus autores, não vinculando de forma alguma a SPQ, nem a Direcção de "Química".

São autorizadas e estimuladas todas as citações e transcrições, desde que seja indicada a fonte, sem prejuízo da necessária autorização por parte do(s) autor(es) quando se trate de colaborações assinadas.

A Orientação Editorial e as Normas de Colaboração podem ser encontradas nas páginas interiores.

**Publicação subsidiada pela**

**FCT Fundação para a Ciência e a Tecnologia**  
MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E DA TECNOLOGIA

Apoio do Programa Operacional Ciência,  
Tecnologia, Inovação do Quadro Comunitário de Apoio III



O Química tem uma nova equipa editorial e com ela inicia-se mais um ciclo da vida do Boletim da Sociedade Portuguesa de Química. Desde o seu lançamento, o boletim tem sido o espaço comum de discussão, troca de ideias e de informação dos sócios da SPQ. Por detrás da natureza, mais ou menos técnica, científica ou educacional de cada artigo, ou secção, está sempre alguém cuja interacção com o leitor (quase uma cumplicidade) se pode encontrar algures no domínio da Química. Esta publicação foi feita pelos sócios e para os sócios da SPQ. As suas páginas devem ser um relato vivo das inúmeras actividades levadas a cabo por todos aqueles que voluntariamente e das mais diversas maneiras contribuem para a missão da SPQ. E com o mesmo espírito voluntário que essas acções são levadas a cabo elas devem ser transmitidas ao Química para se darem a conhecer aos demais sócios. O corpo editorial agora constituído procurou através dos seus membros reunir sensibilidades de vários quadrantes, não exclusivamente ligadas ao meio universitário. Mas, a natureza voluntária da sua participação implica que os recursos editoriais são escassos e estão limitados sobretudo à equipa editorial e aos eventuais colaboradores. Por isso, TODOS os sócios cada um por si, ou em grupo, têm de ser os principais contri-

buintes para os conteúdos das NOSSAS páginas.

O nosso papel é sobretudo manter abertos os canais de comunicação, e dar forma ao conteúdo, facilitando a sua publicação. Vamos tentar estar alerta e atentos aos episódios mais importantes, às movimentações mais interessantes, aos novos problemas e a todas as questões que nos motivam, mas contamos mesmo assim com a vossa valiosa contribuição. Sobretudo nos dias de hoje, estando todos à distância de um simples *e-mail* é bem mais fácil fazer ouvir a nossa voz. Considerem para este efeito aberta a secção "Cartas ao Editor" onde através das vossas cartas esperamos que nos façam chegar temas da actualidade com interesse para o Química.

Neste número a equipa está ainda a ambientar-se e por isso foi tentado um exercício de manutenção acompanhado de ligeiras alterações. Aos leitores de as descobrirem e se acharem por bem, dizerem-nos o que pensam. Este número corresponde também à entrada em funções dos novos corpos directivos da SPQ para o triénio 2004 -2006. As mensagens de acolhimento do novo Presidente e Secretário Geral, podem ser lidas no interior. No seguimento é tam-

bém indicada a constituição nos novos corpos directivos.

Os destaques foram para a grande reunião que é o Encontro Nacional, que desta vez decorreu em Coimbra, organizado pelo colega Doutor Sérgio Seixas de Melo, do Departamento de Química da UC. Paralelamente ao Encontro decorreu uma interessante exposição que pode agora ser visitada, por via do correspondente artigo no interior deste número. Noutra perspectiva, um dos artigos de fundo chama a atenção para os cinquenta anos da introdução definitiva dos métodos de Monte Carlo (1953) e da dinâmica molecular (1957) na simulação computacional. Outros artigos e algumas das habituais secções completam o presente número.

Não podemos deixar de reconhecer que o legado do anterior corpo editorial é extremamente valioso e a responsabilidade de o manter enorme. A actual equipa agradece reconhecidamente na pessoa do anterior editor o Prof. Fernando Pina os simpáticos votos de sucesso, mas agradecemos sobretudo o empenho e a disponibilidade em promover uma transição eficaz e facilitada. Tentaremos manter, e se possível, valorizar tamanha herança.

Joaquim Luís Faria  
boletim@fe.up.pt  
www.spq.pt

Nota: Cartas ao editor discutindo material publicado em números recentes do Química, ou de interesse genérico em química nas suas várias vertentes, podem ser submetidas por correio electrónico ou convencional (ao editor, Departamento de Engenharia Química – FEUP, Rua Dr. Roberto Frias, 4200-465 PORTO). A recepção das cartas não é acusada, nem os autores consultados para a sua publicação, podendo ser editadas para publicação em parte, ou no todo, de acordo com as disponibilidades de espaço.

## Boletim da SPQ – Orientação Editorial

Química, o Boletim da Sociedade Portuguesa de Química, versa todos os assuntos relacionados com a Química, e em particular todos aqueles que dizem respeito à Química em Portugal.

Química publica entrevistas, reportagens, artigos solicitados e propostos,

noticiário, resenhas de livros e outras publicações e correspondência dos leitores.

É dada preferência a artigos de carácter relativamente geral e escritos de modo a despertar interesse a um vasto leque de leitores.

---

## Normas de Colaboração e Instruções para os Autores

1. Os artigos devem ser enviados por correio electrónico, para o endereço do Química, boletim@fe.up.pt. Em alternativa, podem ser enviados dois exemplares impressos dirigidos ao cuidado de Joaquim Luís B. M. Faria, Editor do Química, Departamento de Engenharia Química, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Rua Dr. Roberto Frias, 4200-465 PORTO.

2. O corpo editorial acusará a recepção das colaborações propostas e os textos serão apreciados por um ou mais avaliadores. Com base nas apreciações obtidas, será decidida a aceitação, recusa das colaborações propostas, ou eventualmente a revisão dos textos pelos autores antes de tomar uma decisão definitiva.

3. Os artigos devem conter um resumo de 50 a 100 palavras com a descrição do respectivo conteúdo. Salvo casos excepcionais, os textos não devem exceder cerca de 36 000 caracteres (5 a 6 páginas da revista, incluindo as figuras). As figuras deverão ter a qualidade indispensável a uma boa reprodução gráfica.

4. Os artigos devem seguir, tanto quanto possível, as recomendações da

IUPAC quanto à nomenclatura e unidades.

5. Na Bibliografia, a indicação abreviada de artigos deve obedecer à convenção autores – volume – ano – página, por exemplo, E. Martinho, J. C. Oliveira, Química (Boletim da Sociedade Portuguesa de Química) 83 (2001) 55. A indicação de livros deverá seguir a convenção autor – título – editor – editora – ano, por exemplo, T. J. Meyer, H. Taube, in Comprehensive Inorganic Chemistry, Vol. 1, G. Wilkinson, R. D. Gillard, J. A. McCleverty (eds.), Pergamon Press, Oxford, 1987, p.331.

6. Em casos especiais, sujeitos à concordância da Direcção da Química, as contribuições poderão ser publicadas em inglês, ou noutra língua estrangeira, devendo então conter um resumo suplementar em português.

7. No caso dos autores desejarem corrigir as provas dos textos aceites para publicação, deverão indicá-lo expressamente quando da submissão do texto.

8. A inobservância de qualquer das normas de colaboração poderá levar à devolução do texto recebido.