

## Notícias da SPQ

*O Boletim da SPQ é o veículo ideal para manter os sócios informados sobre as actividades em que a Sociedade está envolvida. Mais do que o anúncio de uma conferência ou de uma nova publicação, há que trazer aqui o dia-a-dia da SPQ, as novidades, os projectos, as dificuldades. Porque considero este «feedback» essencial para estimular uma maior participação de todos na vida da Sociedade, sugeri que, a partir do presente número, a rubrica «Notícias da SPQ» fosse incluída no Boletim. Agradeço à Doutora Raquel Gonçalves ter apoiado a ideia.*

JAMS

### Ficheiro de Sócios e Quotas

Há que actualizar, de uma vez por todas, o ficheiro de sócios, corrigindo erros, dando-lhe um formato mais adequado e aumentando a informação disponível. Esta acção começou já a ser desenvolvida, mas apenas na Delegação de Lisboa. Durante 1991 e 1992 tentar-se-á estendê-la às outras Delegações. Existe, por outro lado, um número apreciável de sócios com quotas em atraso. Deu-se início a uma campanha de «recuperação» desses sócios, a qual durará até ao próximo Encontro Anual, em Janeiro de 1992. A partir daí, serão apenas considerados os sócios com as quotas em dia. Para evitar situações semelhantes no futuro, *passará a ser enviada a cada sócio, no segundo semestre de cada ano, uma ficha de inscrição/actualização que deverá ser devolvida com o pagamento da quota do ano seguinte e com eventuais alterações (mudança de morada, de situação profissional, etc.).*

### Sede

O andar onde se localiza a Sede Nacional da SPQ, em Lisboa, é partilhado pelas Sociedades Portuguesas de Química, de Física, de Matemática e de Filosofia. Embora as relações entre estas sociedades tenham sempre sido satisfatórias, há que dinamizá-las e encontrar formas de otimizar os espaços comuns. Neste sentido, deu-se já um passo importante, ao nomear uma «Comissão de Gestão» da Sede, constituída pelas Doutoradas Rita Delgado (SPQ) e Margarida Cruz (SPF). Temos esperança que, a médio prazo, será possível melhorar a qualidade das instalações e assim estimular a visita regular de um maior número de sócios.

O espaço disponível para a SPQ na Sede foi uma das

dificuldades que se teve de superar. Mais de três quartos desse espaço estava ocupado pelo arquivo da Sociedade, nomeadamente pelas colecções de revistas científicas adquiridas por permuta com a *Revista* e o *Boletim*. Uma vez que eram muito poucos os sócios que se deslocavam à Sede para as consultar, decidiu-se ceder todas essas colecções, a título de empréstimo sem prazo, à Biblioteca de Química da Faculdade de Ciências de Lisboa. Esta decisão, conjugada com uma reorganização do restante arquivo da SPQ, permitiu reduzir para cerca de 50% o espaço do armazém. Existem planos para recuperar ainda mais espaço, que será destinado não só às actividades usuais da Sociedade mas também a uma biblioteca de software e a uma biblioteca, tanto quanto possível exaustiva, das obras de Química publicadas em Portugal.

### FAX

Quem quiser contactar a SPQ por FAX já o pode fazer. O número é o 795 23 49 da rede de Lisboa.

### Grupo de Utilizadores de Computadores em Química

Foi criado um Grupo com este nome, no âmbito da SPQ, coordenado pelos Doutores Fernando Fernandes (Faculdade de Ciências de Lisboa) e José Féria Seita (Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro). Um dos objectivos é o de reunir na Sede uma biblioteca de software de Química, onde os sócios possam examinar programas (comerciais ou não) e assim tomar decisões sobre quais são os mais adequados para os fins pretendidos. *Por favor contacte os referidos coordenadores se desejar mais informações ou se tiver conhecimento de software não comercial que possa ter interesse geral.*

### Biblioteca da SPQ

Como se referiu acima, iniciou-se a recolha de livros de Química publicados em Portugal. Espera-se que, no próximo ano, os sócios poderão dispor, para consulta na Sede, de uma colecção de títulos razoavelmente completa, pelo menos das obras mais recentes. *Pede-se a colaboração de todos na detecção e na oferta de exemplares à SPQ. Aos autores, solicita-se o envio de dois exemplares.* Tentar-se-á que a revisão de muitas destas obras seja feita no *Boletim da SPQ*.

## Editora da SPQ

Embora a SPQ tenha publicado várias monografias, algumas de boa qualidade, nunca manteve uma actividade editorial regular. A recém criada *Editora da SPQ*, coordenada pelo Doutor Joaquim Moura Ramos (Instituto Superior Técnico), centralizará todas as publicações não periódicas da Sociedade e procurará não só implementar um critério de qualidade mais exigente, mas principalmente estabelecer e levar a cabo um plano de edições de obras de químicos portugueses e de algumas traduções. No âmbito do ensino superior está a ser feito um trabalho de prospecção de originais, que, malgrado a sua qualidade, são apenas conhecidos pelo autor e pelos seus estudantes... No âmbito do ensino secundário, os planos são mais a médio prazo, mas pensa-se poder dar início a uma colecção de pequenas monografias sobre um conjunto de tópicos seleccionados. *Aos autores de «sebentas», docentes do ensino superior, solicita-se o envio de dois exemplares ao Prof. Moura Ramos, caso considerem a hipótese de a Sociedade editar os seus trabalhos.*

## Revista Portuguesa de Química

A *Revista Portuguesa de Química* será reformulada, quer para reduzir os seus custos, quer para a tornar verdadeiramente útil à comunidade científica. Não faz qualquer sentido manter a *Revista* na sua forma actual, com um conteúdo que, em média, pode ser considerado um subproduto do trabalho de investigação dos nossos químicos. As razões são várias, mas talvez a principal seja a forte concorrência de um número crescente de revistas internacionais que têm aparecido nos últimos anos. É hoje muito mais fácil publicar resultados que interessem a uma pequena parcela da comunidade científica do que o era há anos atrás, quando a maioria das revistas internacionais tinha que realizar uma selecção muito apertada dos artigos submetidos.

A *Revista Portuguesa de Química* pode facilmente ser transformada num veículo útil para divulgar a melhor Química que se faz em Portugal se o seu conteúdo for exclusivamente constituído por pequenos artigos de revisão, da autoria dos conferencistas convidados para os Encontros da Sociedade Portuguesa de Química. Acresce que esta solução é bem menos dispendiosa que a que resulta da actual política editorial, uma vez que será publicado apenas um número por ano. Assim, em consonância com os actuais Editores, Doutores Manuel Ribeiro da Silva (Faculdade de Ciências do Porto) e António Varandas (Faculdade de Ciências e Tecnologia de Coimbra), o número de 1992 será já publicado nos novos moldes.

Espera-se que, durante 1991 e 1992 seja possível recuperar o atraso na publicação da *Revista*. A situação actual, segundo informação dos Editores, é a seguinte: os volumes de 1988, 1989 e 1990 sairão este ano; os de 1991 e 1992 serão distribuídos no próximo ano. A propósito de distribuição, e tal como foi anunciado no *Boletim* anterior, deve referir-se que o volume de 1987 se encontra, há alguns meses, na Sede. O seu envio aos sócios implica, no entanto, um gasto de mais de 1000 contos (quase 500 escudos por sócio)! É pois necessário conceber vias alternativas de fazer chegar este exemplar aos sócios. Põem-se três hipóteses: (1) a recolha ser

feita na Sede, pelos próprios sócios; (2) a recolha ser feita durante o 13º Encontro, em Janeiro próximo; (3) os sócios que desejarem receber o referido exemplar pelo correio, enviam 500 escudos para a SPQ.

É oportuno salientar as enormes dificuldades que os aumentos no transporte de correio trouxeram para a SPQ. O problema que agora se põe com o volume de 1987 vai seguramente repetir-se com os próximos volumes.

## Federação Europeia das Sociedades de Química

A FECS (Federation of European Chemical Societies) é uma associação de sociedades europeias de Química fundada em 1970 para promover a cooperação em áreas de investigação em Química, desenvolvimento, normalização e educação, na Europa. Uma descrição mais detalhada da FECS e das suas actividades será feita num próximo número do *Boletim*. Para já, importa dizer que a Sociedade está a tentar ter uma participação mais dinâmica na FECS. A Doutora Maria José Calhorda (Instituto Superior Técnico), coordenadora do recém criado «grupo FECS» da SPQ, participou recentemente na Assembleia Geral daquela organização, realizada em Londres. Indicou, nessa altura, os nomes dos representantes da SPQ nos vários Grupos de Trabalho («Working Parties») da FECS, para os próximos dois anos. São eles: Maria Filomena Camões, FCL (WP on Analytical Chemistry); Elisa Maia, FCL (WP on Chemical Education e Sub-Group on the Education of Young People); Luísa Abrantes, FCL (WP on Chemistry and the Environment); Fernando Fernandes, FCL (WP on Computational Chemistry); José Simões Redinha, FCTUC (WP on Electrochemistry); José Êmpis, IST (WP on Food Chemistry); Maria Alzira Almoester Ferreira, FCL (WP on History of Chemistry e WP on Chemistry in the Conservation of the Cultural Heritage); Maria Helena Garcia, FCL (WP on Organometallic Chemistry); José Lopes da Silva, IST (WP on Professional Affairs); José Artur Martinho Simões, IST (Discussion Group on Chemistry in Developing Countries).

A importância da FECS aumentará à medida que crescer a unidade europeia. É por isso essencial que a participação da SPQ seja muito diferente do que até agora tem sido. Não foi por acaso que as pessoas escolhidas se concentram geograficamente (Faculdade de Ciências de Lisboa). Há necessidade de imprimir uma certa operacionalidade ao grupo FECS, o que é facilitado por contactos frequentes.

Um aspecto importante a ter em conta diz respeito aos mecanismos que serão usados para que aqueles representantes da SPQ nos transmitam a informação adquirida nas actividades da FECS em que participem. O *Boletim* é seguramente um dos meios ao seu alcance e a notícia que se segue, sobre o WP on Computational Chemistry é já um exemplo do que pode ser feito. Independentemente disso, existirão na Sede, para consulta dos interessados, dossiers com a documentação de cada um dos «Working Parties».

## FECS Working Party on Computational Chemistry

Na sua qualidade de representante da SPQ, o Doutor Fernando Fernandes (Faculdade de Ciências de Lisboa), deslocou-se recentemente a Munique, para participar na 3ª



reunião do WP on Computational Chemistry (WPCC). Transcreve-se em seguida um resumo do seu memorando sobre as actividades passadas e futuras no âmbito deste «working party».

O WPCC foi criado pela FECS em 1989, tendo sido nomeados para Presidente e Vice-Presidente os Professores Fernando Bernardi (Universidade de Bolonha, Itália) e J. Gasteiger (Universidade Técnica de Munique, Alemanha). A primeira reunião do grupo foi em Junho do mesmo ano, em Bolonha, e os delegados presentes (Finlândia, Holanda, Hungria e Checoslováquia, além do Presidente e do Vice-Presidente), decidiram que a designação «Computational Chemistry» é a que melhor descreve o âmbito do grupo, uma vez que engloba todas as possíveis aplicações da Ciência dos Computadores aos problemas químicos. Sob o nome de «Química Computacional» entende-se, de um modo geral, o domínio dos métodos computacionais aplicados à Química. Dado que existe um grande número de procedimentos computacionais, a Química Computacional apresenta-se como interdisciplinar, ramificando-se por diferentes áreas da Química, nomeadamente Química-Física, Química Orgânica, Química Farmacêutica, Bioquímica, Química Inorgânica e Química Analítica. Nos últimos dez anos, muitas das áreas de aplicação da Química Computacional tiveram um desenvolvimento significativo devido ao aparecimento de novos computadores, de software sofisticado, e a uma melhor compreensão dos princípios básicos. O potencial oferecido pela actual tecnologia de hardware e software teve como consequência o desenvolvimento de uma grande variedade de técnicas para cálculos numéricos e simbólicos. Esses métodos abriram muitas áreas de aplicação.

Os métodos são os seguintes: (1) cálculos Mecânico-Quânticos (*ab initio* e semi-empíricos); (2) cálculos de Mecânica Molecular; (3) Dinâmica Molecular, Monte Carlo e outras técnicas de simulação; (4) gráficos; (5) Quimiometria; (6) administração de bases de dados; (7) Inteligência Artificial (representação do conhecimento, sistemas especialistas, etc.). Quanto às áreas de aplicação, podem destacar-se: (1) armazenamento e consulta de informação química (literatura química, dados numéricos e factuais – propriedades físicas, dados cristalográficos, espectroscópicos, etc. –, bases de dados de reacções); (2) previsão de propriedades moleculares (geometrias, energias, interacções intra e intermoleculares); (3) previsão de propriedades físicas e químicas (cálculos directos, simulações, correlações); (4) modelação molecular (gráficos moleculares); (5) elucidação da estrutura (determinação de dados espectroscópicos); (6) relações estrutura-actividade (dados biológicos); (7) simulação de reacções químicas (modelos para a Cinética Química, cálculos de estados de transição); (8) planeamento de sínteses (procura de reacções de síntese, estratégias de síntese); (9) controlo de processos; (10) Química Analítica.

Considerou-se ainda, na referida primeira reunião do WPCC, que, devido ao aumento do interesse pela Química Computacional na Europa, é desejável que as actividades desenvolvidas nesta área pelas sociedades de Química nacionais sejam coordenadas a nível europeu. Foram, assim, definidas as actividades do WPCC: (a) promoção de todas as áreas de Química Computacional; (b) promoção de contactos entre químicos computacionais; (c) patrocínio de encontros inter-

disciplinares; (d) patrocínio de permutas científicas; (e) suporte a iniciativas de investigação.

A segunda reunião do WPCC foi em Dezembro de 1989, também na Universidade de Bolonha. Teve poucos participantes (a SPQ foi uma das presenças), mas foram discutidos os seguintes tópicos: (1) interdisciplinaridade da Química Computacional; (2) relações do WPCC com outras associações no âmbito da Química Computacional como, por exemplo, a Computer Graphics Society; (3) organização de simpósios. Dado que a Química Computacional é eminentemente interdisciplinar, ficou acordado que um objectivo importante do WPCC seria promover essa interdisciplinaridade através de simpósios apropriados e de uma publicação periódica informal para troca de informações e experiências entre os diferentes países.

A terceira reunião do WPCC realizou-se em Junho de 1991, na Universidade Técnica de Munique, e contou com delegados de França, da Jugoslávia, da Polónia, da Checoslováquia, da Áustria, da Finlândia e de Portugal. Foi uma vez mais discutido o interesse em prosseguir com a WPCC, sendo unânime a opinião da importância do grupo. Neste sentido, decidiu-se solicitar a todas as sociedades ausentes na reunião que nomeassem delegados.

Os delegados da Polónia e da Áustria reactivaram a discussão da designação «Computational Chemistry», argumentando que, para eles, muito ligados à Indústria, essa designação poderia levar as pessoas a pensar que se tratava de um grupo no âmbito restrito da Química Quântica. O Prof. Bernardi, um químico quântico, conseguiu desmitificar a ideia, ficando no entanto acordado que se vai escrever um artigo, da responsabilidade de todos os delegados, onde se apresentará o conceito de Química Computacional. Esse artigo será publicado no *Journal of Computational Chemistry* e no *Journal of Chemical Information and Computer Science*.

Os delegados manifestaram as dificuldades das respectivas sociedades em subsidiarem as suas deslocações e estadas. O mal, pelos vistos, não é somente português! Com o objectivo de ultrapassar este problema, ficou acordado que irão, de imediato, ser explorados programas da CEE (COMET, TEMPUS, etc.).

Ficou também acordado que, até fins de Setembro de 1991, todos os delegados elaborarão um memorando sobre as respectivas actividades nacionais no campo da Química Computacional, incluindo investigação científica, software desenvolvido e disponível para troca ou sujeito a pagamento, recursos nacionais disponíveis, etc.. Indagar-se-ão, por outro lado, quais os preceitos jurídicos referentes a direitos de *copyright* numa organização deste tipo. Toda a informação recolhida será compilada numa publicação informal (embrião de uma publicação periódica para compilação e troca de informação), a distribuir por todos os delegados, que a farão chegar aos pólos nacionais com interesses no campo da Química Computacional. *Pede-se a todos os que têm actividade nesta área que enviem a informação disponível para o Doutor Fernando Fernandes.*

Finalmente, ficou decidido organizar uma conferência internacional sobre Química Computacional, a realizar em 1993 ou 1994, em França. Esta conferência, subordinada ao título «European Conference on Computational Chemistry. State

of the Art», terá a duração de três dias e incluirá demonstrações de software e hardware.

## IUPAC

Tal como acontece com a FECS, há que estimular a participação da SPQ nas actividades da IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry), tanto mais que a sua 37ª Assembleia Geral se realizará em Lisboa, em 1993. Até há pouco a Sociedade tinha um número extremamente reduzido de representantes nas várias comissões e sub-comissões da IUPAC. Hoje a situação é diferente: o Doutor Carlos Nieto de Castro (Faculdade de Ciências de Lisboa), que coordena o «grupo IUPAC» da SPQ, indicou o nome de muitos outros sócios para representarem a Sociedade. A descrição da estrutura da IUPAC, bem como dos sócios cujos nomes foram indicados, virá publicada num próximo *Boletim*.

## European Communities Chemistry Council

O Doutor José Dias Lopes da Silva, Vice-Reitor da Universidade Técnica de Lisboa, é o representante da Sociedade neste conselho, que reúne duas vezes por ano para tratar de assuntos que vão desde a definição profissional do «químico europeu» até à recolha de informação detalhada sobre os currículos dos cursos das áreas da Química, em vigor nos países europeus. Esta informação é coligida na publicação *Chemical Education in Europe*, editada em colaboração com o Working Party on Chemical Education da FECS. Tal como anunciado para os casos da FECS e da IUPAC, a descrição detalhada das actividades do ECCC será dada num próximo *Boletim*.

## 13º Encontro Anual da SPQ

Procurar-se-á reviver o espírito de festa que caracterizou alguns dos Encontros da SPQ. A Doutora Maria Teresa Duarte, Presidente da Comissão Organizadora do 13º Encontro, convida-o/a a vir até ao Técnico, de 29 de Janeiro a 2 de Fevereiro de 1992 para assistir ao (provavelmente) melhor conjunto de conferências plenárias que a Sociedade já ofereceu. Para além da história do nascimento e infância da molécula mais espectacular dos últimos anos – o futebaleno,  $C_{60}$  – contada pelo Dr. Kroto, poderá aprender com o Dr. Peter Atkins, se estiver inscrito no bloco de Educação, alguns dos segredos que produziram «best-sellers» como *The Second Law*, *Molecules*, *Physical Chemistry* e *Inorganic Chemistry*. Não deixe também de participar no bloco de Indústria, onde o Dr. Jay Labinger, do California Institute of Technology, lhe procurará transmitir a sua experiência de químico «puro», mas com enormes interacções com o meio empresarial dos EUA. Terá ainda oportunidade de visitar a exposição de equipamento de laboratório, bibliográfica e de software, e de participar em muitas outras actividades.

## EXPOQUIM 92

A propósito de exposição, a SPQ encontra-se perto de celebrar, com a Associação Industrial Portuguesa, um protocolo de colaboração para organização conjunta de uma

exposição de Química na FIL, a EXPOQUIM. Ainda é cedo para revelar pormenores desta acção, incluindo a sua periodicidade, etc.. Mas pensa-se que, caso se venha a concretizar, a primeira edição terá lugar em Outubro de 1992 e durará três dias. Em simultâneo com a EXPOQUIM, a SPQ e a FIL organizarão simpósios sobre temas específicos na área da Química.

## V Encontro Galego-Português de Química

Como é hábito, este encontro é organizado pela Delegação do Porto da Sociedade, pela Agrupación Territorial de Galicia de la Anque e pelo Colegio de Químicos de Galicia. A quinta edição realiza-se em La Coruña, de 21 a 23 de Novembro de 1991, e tem como tema o Meio Ambiente. Para mais informações contactar o Doutor José Luís da Costa Lima (Faculdade de Farmácia do Porto).

## 2nd Italian-Portuguese-Spanish Meeting in Inorganic Chemistry

Cabe à SPQ organizar a segunda edição do IPS (a primeira foi em 1990, em Gandía, perto de Valência). Esta será no Hotel Alfa Mar, no Algarve, em Abril de 1992. Para informações contactar a Doutora Maria José Calhorda ou o Doutor José Moura (Centro de Tecnologia Química e Biológica, Oeiras).

## Ensino Superior de Química em Línguas Internacionais de Origem Latina

Com este nome complicadíssimo (ESQLIOL), estas conferências são organizadas por várias sociedades de Química de países latinos, incluindo a SPQ. Conforme notícia na 1ª circular, a próxima edição será em Málaga, de 22-24 de Setembro de 1992. Quem desejar informação mais detalhada pode contactar a Doutora Elisa Maia (Faculdade de Ciências de Lisboa).

## II Congresso Ibérico de Absorção Atómica

A Sociedade ofereceu o seu patrocínio a esta acção, que decorrerá em Lisboa (Instituto Superior Técnico), de 13-15 de Abril de 1992. Para mais informações contactar o Eng. João Barata (tel. 1-762172; fax 7937035).

## Gesellschaft Deutscher Chemiker

A SPQ foi convidada a assistir à 23ª Assembleia Geral da Sociedade de Química Alemã, que se realiza em Setembro deste ano, em Munique. O convite foi aceite e a SPQ será representada pelo Doutor Carlos Crispim Romão (IST e CTQB).

## Venda de Números do Boletim e de Medalhas da SPQ

Alguns números do *Boletim* encontram-se esgotados, mas ainda pode comprar muitos números antigos e completar a sua colecção. O custo de cada exemplar é de 200\$00, acrescido dos portes de correio. Eis a lista dos números disponíveis:

I Série: 1 e 3

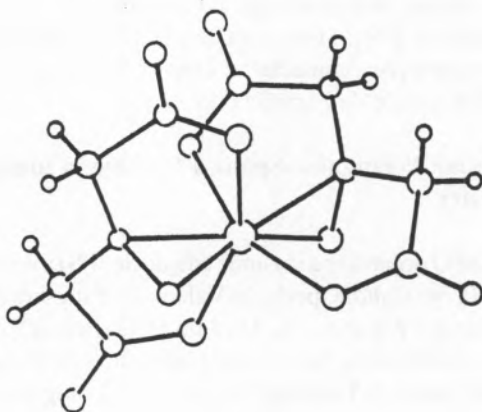
II Série: 1, 2, 3, 4, 7, 9, 10, 11, 12, 13/14, 15/16, 17/18, 19, 20, 21, 22, 23, 32/33, 34, 37, 38, 39, 40 e 42.

Quanto às medalhas comemorativas dos Encontros Anuais da SPQ, o seu custo unitário é de 1500\$00, também acrescido

dos portes de correio. Pode ainda comprar as medalhas de todos os Encontros, excepto do 1º, do 3º e do 9º.

As encomendas devem ser dirigidas à SPQ, acompanhadas de um cheque ou vale postal. Os portes de correio ser-lhe-ão debitados na altura que receber a sua encomenda.

## SECOND ITALIAN-PORTUGUESE-SPANISH MEETING IN INORGANIC CHEMISTRY



### ALFA MAR (ALGARVE), PORTUGAL

Tentative schedule  
MARCH or APRIL 1992

#### AIM AND SCIENTIFIC PROGRAM

The 1st ITALIAN-PORTUGUESE-SPANISH (IPS) MEETING in INORGANIC CHEMISTRY was held in Gandia, June 1990, and contributed to a better knowledge of the work done by Inorganic Chemists from the three countries. As a result, new collaboration projects involving researchers present at the meeting were started and previous ones had a further development. The 2nd IPS Meeting will take place in Alfa Mar (Algarve) Portugal (Spring 1992), and aims at strengthening this cooperation and at extending it to Inorganic Chemists of other countries, in an effort to go "TOWARDS EUROPE".

The meeting will be organized in Plenary Lectures, Session Lectures and Posters Sessions devoted to the topics: Bioinorganic Chemistry, Coordination Chemistry, Inorganic Materials, Organometallic Chemistry and other fields of Inorganic Chemistry that might be of interest.

## INTERNATIONAL ORGANIZING COMMITTEE

### Italy

Ivano Bertini  
António Sgamellotti  
Claudio Bianchini

### Portugal

José J. G. Moura  
Maria José Calhorda  
Carlos F. Geraldès

### Spain

Francisco Gonzáles García  
Virtudes Moreno Martínez  
Miguel Angel Alario Franco  
José-Maria Moratal Mascarell

### President

Alberto Romão Dias

#### CONFERENCE

The conference will be held in Algarve, south of Portugal. The alfa Hotel is located at the seaside 25 Km from the international Faro Airport and 300 Km from Lisboa. Close villages are Vilamoura and Albufeira.

#### FURTHER INFORMATION

Profs. **J. J. G. Moura** or **M. J. Calhorda**  
CTQB - Apartado 127  
Rua da Quinta Grande, 6  
2780 Oeiras - PORTUGAL

Pho 351-1-4428616  
Fax 351-1-4428766  
Email J. MOURA@CTQB01.CTQB.RCCN.PT  
MJC@CTQB01.CTQB.RCCN.PT  
or D883@BETA.IST.RCCN.PT