

José Artur de Sousa Martinho Simões

Curriculum Vitæ

Lisboa

Setembro 2018

Índice

CV resumido	3
Dados pessoais	4
Graus académicos	4
Actividade docente	4
Actividade científica	5
Principais actividades de serviço	6
Sociedades científicas	8
Orientações	8
Artigos científicos	11
Livros (autoria e edição)	21
Capítulos de livros	21
Trabalhos de natureza pedagógica	23
Outros trabalhos	24
Artigos vários	26
Conferências e comunicações convidadas	28

José Artur de Sousa Martinho Simões (CV Resumido)

Departamento de Química e Bioquímica
Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa
Campo Grande, 1749-016 Lisboa
Telefone 217500005 / 217500075; Fax 217500088
E-mail jams@fc.ul.pt; <http://webpages.fc.ul.pt/~jamsimoes/>; <http://molenergetics.fc.ul.pt>

Graus académicos

- Agregação, Instituto Superior Técnico, 1988.
- Doutoramento, Instituto Superior Técnico, 1981.
- Licenciatura, Instituto Superior Técnico, 1975.

Posições académicas

- Professor Catedrático Convidado, Instituto de Tecnologia Química e Biológica, Universidade Nova de Lisboa, 2008-2017.
- Professor Catedrático, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, 1993-.
- Guest Researcher, National Institute of Standards and Technology (USA), 1996-1997.
- Visiting Research Officer, National Research Council of Canada, 1988-1989.
- Professor Associado, Instituto Superior Técnico, 1987-1993.
- Visiting Associate, California Institute of Technology (USA), 1982-1983.
- Professor Auxiliar, Instituto Superior Técnico, 1981-1987.

Algumas actividades de serviço

- Director da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, 2014-2018.
- Director do Instituto de Tecnologia Química e Biológica, Universidade Nova de Lisboa, 2008-2011.
- Presidente da Sociedade Portuguesa de Química, 1998-2000.
- Secretário-Geral da Sociedade Portuguesa de Química, 1991-1995.
- Presidente do Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, 1993-1995 e 2001-2003.
- Vice-Presidente do Conselho Científico da Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, 1998-1999.
- Representante da Fundação para a Ciência e Tecnologia no CERC3 (Chairmen of the European Research Councils' Chemistry Committees), 1998-2004. Chairman do CERC3, 2002-2003.
- Representante da Fundação para a Ciência e a Tecnologia no projecto ERA-Chemistry (Implementation of Joint Bottom-up European Programmes in Chemistry), financiado pela Comissão Europeia no âmbito do 6º Programa Quadro, 2004-2005.
- Coordenador do Centro de Química e Bioquímica, 2003-2006.
- Membro do Conselho Científico (área das Ciências Exactas) da Fundação para a Ciência e a Tecnologia, 2003-2004.
- Membro do Editorial Advisory Board da publicação *SEARCH (Structure, Energetics, and Reactivity in Chemistry) Series* (Chapman & Hall), 1992-.
- Expert Analyst da publicação *CHEMTRACTS, Inorganic Chemistry*, 1990-1999).
- Regional Advisory Editor da publicação *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions*, 1994-1997.
- Membro do Editorial Board da publicação *Gazzetta Chimica Italiana*, 1994-1997.
- Membro do Editorial Board da publicação *Structural Chemistry* (Springer), 1998-2006.
- "Referee" das seguintes revistas: *Chemical Communications*; *Chemical Physics Letters*; *Chemical Society Reviews*; *Green Chemistry*; *Inorganic Chemistry*; *Journal of the American Chemical Society*; *Journal of the Brazilian Chemical Society*; *Journal of Chemical and Engineering Data*; *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions*; *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions*; *Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions*; *Journal of Chemical Thermodynamics*; *Journal of Organic Chemistry*; *Journal of Organometallic Chemistry*; *Journal of Physical Chemistry*; *New Journal of Chemistry*; *Organometallics*; *Physical Chemistry Chemical Physics*; *Structural Chemistry*; *Thermochimica Acta*.

Prémios

Prémio Ferreira da Silva da Sociedade Portuguesa de Química (2006).
Sócio Honorário da Sociedade Portuguesa de Química (2017)

Área científica

Química. Energética de moléculas.

Actividade científica

Autor ou co-autor de mais de 100 publicações científicas. ResearcherID B-7185-2011.

Dados Pessoais

Local e data de nascimento: Lisboa, 10 de Março de 1952.

Nacionalidade: Portuguesa.

Casado. Três filhas. Dois netos. Uma neta.

Graus Académicos

Licenciatura em Engenharia Química (Química e Processos) no Instituto Superior Técnico, em 1975, com 16 valores.

Doutoramento em Engenharia Química (Termodinâmica Química) no Instituto Superior Técnico, em Janeiro de 1981. Supervisores: Doutores Jorge C. G. Calado e Alberto Romão Dias.

Agregação em Química no Instituto Superior Técnico, em Janeiro de 1988.

Actividade Docente

Monitor do (então) Departamento de Química-Física do IST, de Janeiro de 1973 a Setembro de 1975.

Assistente Eventual do mesmo Departamento, de Setembro de 1975 a Setembro de 1977, e Assistente a partir da última data até Janeiro de 1981.

Professor Auxiliar do Departamento de Engenharia Química do IST (Secção de Química-Física e Termodinâmica), de Janeiro de 1981 a Julho de 1987.

Professor de Termodinâmica na Academia da Força Aérea Portuguesa, no ano lectivo de 1981/82.

Director do Laboratório de Química-Física do IST em 1983/84 e 1985/86.

Docente de um bloco sobre Energética de Espécies Organometálicas, inserido num curso de mestrado do Instituto de Química da Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), S. Paulo, Brasil (Novembro de 1985).

Docente de um bloco sobre Cinética Química, integrado no curso Combustão e Energia, organizado pelo Departamento de Engenharia Mecânica do IST (Setembro de 1986 e Outubro de 1987).

Docente de um bloco sobre bases de termoquímica, integrado no Seminário *Desenvolvimento de Processos Químicos. Utilização da Calorimetria de Reacção*, Departamento de Tecnologia de Indústrias Químicas, INETI (Novembro de 2003).

Professor Associado do Departamento de Engenharia Química do IST (Secção de Química-Física e Termodinâmica), de Julho de 1987 a Março de 1993.

Disciplinas leccionadas no IST (L = aulas de laboratório, TP = teórico-práticas, T = teóricas): Química-Física (L,TP,T), Termodinâmica Geral (L,TP,T), Termodinâmica

Química (L,TP,T), Laboratórios de Química-Física (L), Espectroscopia Atómica e Molecular (T; bloco sobre Espectrometria de Massa), Previsão de Propriedades (T,TP).

Professor Catedrático do Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, desde Março de 1993.

Disciplinas leccionadas na FCUL: Química-Física II (T), Química-Física III (T), Fundamentos de Química I e II (T), Química Geral I e II (T), Química (T; licenciatura em Microbiologia da Faculdade de Medicina da UL), Bioquímica (L), Perspectivas em Química e Bioquímica (T), Iniciação à Investigação (L), Estágio da Licenciatura em Química, Química Geral (T, TP), Química (Biologia) (T).

Professor Catedrático Convidado do Instituto de Tecnologia Química e Biológica, Universidade Nova de Lisboa, desde Março de 2008.

Responsável pelo bloco de Química da unidade *Advances in Chemistry and Structural Biology* integrada no *ITQB PhD Program in Chemical and Biological Sciences & Engineering* (2012 e 2013).

Actividade Científica

Bolseiro do Instituto de Alta Cultura e do Instituto Nacional de Investigação Científica no Centro de Química Estrutural da Universidade Técnica de Lisboa (Complexo I, IST), de Setembro de 1975 a Dezembro de 1989, como colaborador das linhas II (Química de Compostos Organometálicos) e III (Termodinâmica Química).

Enquanto estudante de doutoramento: visitas regulares ao Centro de Investigação em Química da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto (1977-1979), para, sob orientação do Doutor Manuel A. V. Ribeiro da Silva, realizar medidas num calorímetro de solução-reacção, envolvendo compostos organometálicos.

Investigador do Centro de Tecnologia Química e Biológica, Oeiras, de Janeiro de 1990 a Junho de 1993.

Membro do Centro de Ciência e Tecnologia de Materiais (Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa) de 1994 a 2003.

Membro do Centro de Química e Bioquímica (Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa) desde 2003.

Coordenador do Centro de Química e Bioquímica (Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa) de Janeiro de 2003 a Fevereiro de 2006.

Três visitas ao Departamento de Química da Universidade de Manchester, Reino Unido (1976, 1978 e 1980, num total de seis meses), para colaborar com o Grupo de Termoquímica (Prof. Henry A. Skinner) em estudos calorimétricos de compostos organometálicos.

“Visiting Associate” do California Institute of Technology, Pasadena, E.U.A., por um período de doze meses (1982/83), para realizar estudos energéticos de espécies organometálicas na fase gasosa (Prof. J. L. Beauchamp). Bolseiro da NATO e da Fundação Fulbright.

“Visiting Research Officer” da Chemistry Division do National Research Council of Canada, Ottawa, por um período de doze meses (1988/89), para colaborar com o grupo do Dr. David Griller em estudos energéticos de espécies transientes, por calorimetria fotoacústica.

“Guest Researcher” da Physical and Chemical Properties Division do National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland, E.U.A., por um período de doze meses (1996/97) para construir a *NIST Organometallic Thermochemistry Database*.

“Expert Analyst” da publicação *CHEMTRACTS, Inorganic Chemistry* (1990-1999).

Director Científico do “NATO-Advanced Study Institute” *Energetics of Organometallic Species*, Curia, Portugal, 1991.

Membro do “Editorial Advisory Board” da publicação *Structure, Energetics, and Reactivity in Chemistry*, Chapman & Hall (1992-).

“Regional Advisory Editor” da publicação *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions* (1994-1997).

Membro do “Editorial Board” da publicação *Gazzetta Chimica Italiana* (1994-1997).

Membro da Comissão Editorial da publicação *Química - Boletim da Sociedade Portuguesa de Química* (1995-1998).

Membro do “Editorial Board” da publicação *Structural Chemistry*, Springer (1998-2006).

"Referee" das seguintes revistas: *Chemical Communications; Chemical Physics Letters; Chemical Society Reviews; Green Chemistry; Inorganic Chemistry; Journal of the American Chemical Society; Journal of the Brazilian Chemical Society; Journal of Chemical and Engineering Data; Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions; Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions; Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions; Journal of Chemical Thermodynamics; Journal of Organic Chemistry; Journal of Organometallic Chemistry; Journal of Physical Chemistry; New Journal of Chemistry; Organometallics; Physical Chemistry Chemical Physics; Structural Chemistry; Thermochemica Acta*.

Principais Actividades de Serviço

Chefe de Gabinete do Secretário de Estado do Ensino Superior (1982).

Vogal da Comissão Executiva do Departamento de Engenharia Química do Instituto Superior Técnico (1984-1985).

Coordenador da Secção de Química-Física e Termodinâmica do Instituto Superior Técnico (1987-1988).

Secretário-Geral da Sociedade Portuguesa de Química (1991-1994).

Presidente do Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (1993-1995 e 2001-2003).

Vogal do Conselho de Administração da Fundação da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (1995).

Presidente da Sociedade Portuguesa de Química (1998-2000).

Vice-Presidente do Conselho Científico da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (1998-1999).

Representante da Fundação para a Ciência e a Tecnologia no CERC3 (Chairmen of the European Research Council Chemistry Committees) (1998-2004).

Chairman do CERC3 (2002-2003). Vice-Chairman do CERC3 (2001-2002 e 2003-2004).

Membro do Painel Avaliação das Bolsas de Investigação atribuídas pela Fundação para a Ciência e a Tecnologia, na área da Química (Abril de 1998, Setembro de 1998, Abril de 1999, Abril de 2000, Outubro de 2000, Julho de 2001, Novembro de 2001, Maio de 2002, Outubro de 2002, Julho de 2003, Janeiro de 2004, Julho de 2004, Janeiro de 2005).

Coordenador do Painel Avaliação das Bolsas de Investigação atribuídas pela Fundação para a Ciência e a Tecnologia, na área da Química (Julho de 2005, Maio de 2006, Março de 2007, Julho de 2007, Outubro de 2007, Junho de 2008, Setembro de 2008, Junho de 2009, Outubro de 2009, Julho de 2010, Outubro de 2010).

Coordenador de um Painel de Recursos de Projectos de Investigação na área da Química, referentes ao concurso de 2004 (2006).

Coordenador de um Painel de Recursos de Bolsas de Investigação na área da Química (Março de 2007, Novembro de 2007, Junho de 2009, Maio de 2011).

Coordenador do Painel de Avaliação de projectos atribuídos no âmbito do Programa PRAXIS XXI, na área da Química (Outubro de 1998).

Coordenador científico da publicação *Perfil da Investigação Científica em Portugal. Química, Engenharia Química e Biotecnologia*, editada pelo Observatório das Ciências e das Tecnologias (Março de 1999).

Coordenador do Painel de Avaliação das Unidades de Investigação na área da Química, Fundação para a Ciência e a Tecnologia (Setembro de 1999).

Coordenador de um Painel de Avaliação de projectos atribuídos no âmbito do Programa SAPIENS, na área da Química (Junho de 2000).

Co-coordenador do Painel de Avaliação Intercalar de Projectos no âmbito do concurso POCTI da área da Química (Fevereiro de 2003).

Coordenador do Painel de Acompanhamento de Projectos e de Avaliação de Relatórios Finais na área da Química, no âmbito da FCT (2007-).

Membro do júri do Concurso Jovens Cientistas e Investigadores, Fundação da Juventude (2003, 2004, 2005).

Membro do Scientific Committee of Programme AlBan (European Union Programme of High Level Scholarships for Latin America) (2003-2007).

Membro do júri do Concurso “Solvay Ideas Challenge” (Julho de 2003).

Membro do Conselho Científico (área das Ciências Exactas) da Fundação para a Ciência e a Tecnologia (2003-2004).

Membro do Painel de Avaliação das Acções Integradas (área da Química) do Conselho de Reitores das Universidades Portuguesas (2003, 2004, 2005, 2006, 2007).

Membro do júri do Prémio Universidade de Coimbra (1ª edição, 2004).

Representante da Fundação para a Ciência e a Tecnologia no projecto ERA-Chemistry (Implementation of Joint Bottom-up European Programmes in Chemistry), financiado pela Comissão Europeia no âmbito do 6º Programa Quadro (2004-2005).

Membro da Comissão de Aconselhamento do Centro de Química da Madeira, Universidade da Madeira (2007-2018).

Director do Instituto de Tecnologia Química e Biológica, Universidade Nova de Lisboa (2008-2011)

Coordenador de um grupo de trabalho sobre Avaliação de Ciência, no âmbito do relatório A Ciência em Portugal, iniciativa da Comissão de Educação e Ciência da Assembleia da República (2010).

Presidente da Comissão da Qualidade do Ensino do Instituto de Higiene e Medicina Tropical da Universidade Nova de Lisboa (2011-).

Sociedades Científicas

Sociedade Portuguesa de Química.

Royal Society of Chemistry, UK (2001-2010).

Sociedade Brasileira de Química.

American Chemical Society, USA (1993-2008).

Orientações

Pós-Doutoramento

José de Alencar Simoni (1989-91). Bolsa da FAPESP, Brasil.

Paulo Alexandre Marques Nunes (2003-2006 e 2006-2008). Bolsa FCT.

Rui Jorge Centeno Santos (2006-2009, 2010-2012). Bolsa FCT.

Tânia Vanessa Santos de Almeida (2010-2013). Bolsa FCT.

Elsa Marisa Duarte Rodrigues Gonçalves (2013-). Bolsa FCT

Filipe Miguel Peres Agapito (2012-). Bolsa FCT.

Doutoramento

Maria Margarida de Sousa Salema de Araújo, *Termoquímica de Derivados Bis-ciclopentadienilo de Titânio*, Tese de Doutoramento, IST, 1983. Co-orientação com A. Romão Dias.

Maria Rute Abreu Rodrigues Gomes da Costa, *Estudos sobre a Natureza da Ligação Metal-Azoto em Derivados Bis-ciclopentadienilo de Metais de Transição*, Tese de Doutoramento, IST, 1986. Co-orientação com A. Romão Dias.

Clementina Maria Cardoso Teixeira da Cunha Pereira, *Termoquímica de Complexos $MCp_2(SR)_2$ de Molibdénio, Tungsténio e Titânio*, Tese de Doutoramento, IST, 1986. Co-orientação com A. Romão Dias.

Manuel Eduardo Ribeiro Minas da Piedade, *Termoquímica de Derivados Bis-ciclopentadienilo de Titânio, Molibdénio e Tungsténio*, Tese de Doutoramento, IST, 1988. Co-orientação com A. Romão Dias.

Hermínio Albino Pires Diogo, *Termoquímica de Complexos Organometálicos de Zircónio e Nióbio do Tipo Bis-ciclopentadienilo e de Compostos Orgânicos Contendo C, H, O, N*, Tese de Doutoramento, IST, 1993.

João Paulo Arriegas Estevão Correia Leal, *Estudos Termoquímicos de Complexos Organometálicos de Urânio, Sódio, Lítio e Alumínio*, Tese de Doutoramento, IST, 1993.

Palmira Maria Martins Ferreira da Silva, *Termoquímica de Fosfinas e de Complexos Organometálicos*, Tese de Doutoramento, IST, 1996. Co-orientação com A. Romão Dias.

Rui Miguel da Silva Coelho Borges dos Santos, *Estudos Termoquímicos por Calorimetria Fotoacústica*, UL, 2000.

Rita Alexandra do Nascimento Cardoso Guedes, *Solvatação Diferencial do Fenol e do Radical Fenoxilo: Microsolvatação e Simulação Monte Carlo*, UL, 2003. Co-orientação com Benedito Costa Cabral.

Vânia Solange Ferreira Muralha, *Aplicação da Calorimetria Fotoacústica no Estudo da Energética de Moléculas*, UL, 2005. Co-orientação com Rui Borges dos Santos.

Ana Catarina Dias Filipe Pancada Correia, *Energética da Ligação O-H em Compostos Fenólicos*, UL, 2005. Co-orientação com Rui Borges dos Santos.

Paulo Ricardo Castelo Branco Cabral do Couto, *Understanding Electronic Properties of Water: A Theoretical Approach to the Calculation of the Adiabatic Band Gap of Liquid Water*, UL, 2008. Co-orientação com Benedito Costa Cabral.

Sílvia da Conceição Gomes Estácio, *Ligações de Hidrogénio: Estudo de Alguns Aspectos Energéticos, Electrónicos e Dinâmicos por Primeiros Princípios*, UL, 2008. Co-orientação com Benedito Costa Cabral.

Filipe Miguel Peres Agapito, *Theoretical Study of the Reactivity and Energetics of Organic Radicals*, UL, 2010. Co-orientação com Benedito Costa Cabral.

Hugo Filipe de Mesquita Costa Martiniano, *Dinâmica Molecular ab initio: Aplicações ao Estudo de Propriedades Electrónicas de Sistemas Moleculares*, UL 2013. Co-orientação com Benedito Costa Cabral.

Licenciatura

Maria Madalena Alves Campos de Sousa Dionísio, *Contribuição para o Desenvolvimento de Métodos de Estimativa de Entalpias de Vaporização*, Relatório de Estágio, FCUL, 1987. Co-orientação com Maria Helena Viegas Garcia.

João Filipe Colardelle da Luz Mano (1990-91), IST.

Jorge Miguel Monteiro Abalroado (1990-91), IST.

Carlos Manuel Bento António (1990-91), IST.

Jorge Manuel Cerqueira Lopes (1990-91), IST.

Rui Miguel da Silva Coelho Borges dos Santos (1991-92), IST.

Paulo Alexandre Marques Nunes (1991-92), IST.

René Gil Bakker Fonseca, *A Energética da Ligação Cobalto-Carbono do Coenzima B₁₂*, Relatório de Estágio, FCUL, 1995. Co-orientação com Rui Borges dos Santos.

Magda Sofia Milheiro Bizarro, *Estudo de Alguns Fenóis Substituídos por Calorimetria Fotoacústica*, Relatório de Estágio, FCUL, 1998. Co-orientação com Rui Borges dos Santos.

Vânia Solange Ferreira Muralha, *Energética da Ligação O–O no Peróxido de tert-Butilo*, Relatório de Estágio, FCUL, 2000. Co-orientação com Rui Borges dos Santos.

Ana Catarina Dias Filipe Pancada Correia, *Energética da Ligação O–O no Peróxido de tert-Butilo e O–H no Fenol*, Relatório de Estágio, FCUL, 2001. Co-orientação com Rui Borges dos Santos.

Sílvia da Conceição Gomes Estácio, *Re-parametrização de um Modelo de Potencial Proposto para o HCF-32 por meio de Cálculos DFT em “Clusters”*, Relatório de Estágio, FCUL, 2002. Co-orientação com Benedito Costa Cabral.

Ricardo André Fernandes da Mata, *Estrutura, Energética e Propriedades Electrónicas de Agregados de Acetonitrilo (CH₃CN)₁₋₈: Um Estudo Baseado na Teoria do Funcional de Densidade (DFT)*, Relatório de Estágio, FCUL, 2003. Co-orientação com Benedito Costa Cabral.

Filipe Miguel Peres Agapito, *Estudo Teórico da Entalpia de Dissociação da Ligação C–H em Éteres*, Relatório de Estágio, FCUL, 2004. Co-orientação com Benedito Costa Cabral.

Gustavo Coelho Malheiro Múrias, *Estudo de Espécies Transientes por Calorimetria Fotoacústica*, Relatório de Estágio, FCUL, 2006. Co-orientação com Paulo Marques Nunes.

Gustavo André Torcato Lopes, *Estudos de Calorimetria Fotoacústica*, Relatório de Estágio, FCUL, 2006. Co-orientação com Paulo Marques Nunes.

Hugo Filipe de Mesquita Costa Martiniano, *Efeito de Substituintes na Transferência Protónica Assistida por Solvente em Agregados Moleculares [p–X–PhOH–(H₂O)₁₋₃]^{•+} (X = NH₂, OH, H, CN, NO₂)*, Relatório de Estágio, FCUL, 2006. Co-orientação com Benedito Costa Cabral.

Artigos Científicos

- AC1 The Thermochemistry of Carbonyl Complexes of Cr, Mo, W and Co with Arenes, Cycloheptatriene, and Norbornadiene.
D. L. S. Brown, J. A. Connor, C. P. Demain, M. Y. Leung, J. A. Martinho Simões, H. A. Skinner, M. T. Z. Moattar.
Journal of Organometallic Chemistry **1977**, 142, 321-335.
- AC2 The Thermochemistry of Carbonyl Complexes of Cr, Mo and W with Pyridine and Acetonitrile.
F. A. Adedeji, J. A. Connor, C. P. Demain, J. A. Martinho Simões, H. A. Skinner, M. T. Z. Moattar.
Journal of Organometallic Chemistry **1978**, 149, 333-343.
- AC3 Heat of Formation of Bis(η -cyclopentadienyl)dimethyltungsten and Bis(η -cyclopentadienyl)dimethylmolybdenum.
J. C. G. Calado, A. R. Dias, J. A. Martinho Simões, M. A. V. Ribeiro da Silva.
Journal of the Chemical Society, Chemical Communications **1978**, 737.
- AC4 Bond-Enthalpy Contributions in $M(\eta\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{L}_2$ Complexes ($M = \text{Mo, W}$; $L = \text{H, CH}_3, \text{Cl}$).
J. C. G. Calado, A. R. Dias, J. A. Martinho Simões, M. A. V. Ribeiro da Silva.
Journal of Organometallic Chemistry **1979**, 174, 77-80.
- AC5 Thermochemistry of bis Arene- and Arenetricarbonyl-Chromium Compounds Containing Hexamethylbenzene, 1,3,5-Trimethylbenzene and Naphtalene.
J. A. Connor, J. A. Martinho Simões, H. A. Skinner, M. T. Z. Moattar.
Journal of Organometallic Chemistry **1979**, 179, 331-356.
- AC6 Metal-Hydrogen and Metal-Iodine Bond-Enthalpy Contributions in $[M(\eta\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{L}_2]$ ($M = \text{Mo, W}$; $L = \text{H, I}$).
J. C. G. Calado, A. R. Dias, J. A. Martinho Simões, M. A. V. Ribeiro da Silva.
Revista Portuguesa de Química **1979**, 21, 129-131.
- AC7 Metal-Bromine Bond-Enthalpy Contributions in $M(\eta\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{Br}_2$ Complexes ($M = \text{Mo, W}$).
J. C. G. Calado, A. R. Dias, J. A. Martinho Simões.
Journal of Organometallic Chemistry **1980**, 195, 203-206.
- AC8 Standard Enthalpy of Sublimation of $[\text{Mo}(\eta\text{-C}_5\text{H}_5)_2(\text{CH}_3)_2]$.
A Reevaluation of Mo-CH₃ and W-CH₃ Bond Enthalpy Contributions.
J. C. G. Calado, A. R. Dias, M. E. Minas da Piedade, J. A. Martinho Simões.
Revista Portuguesa de Química **1980**, 22, 57-62.
- AC9 Enthalpies of Formation of $[M(\eta\text{-C}_5\text{H}_5)_2(\text{OOCR})_2]$ Complexes; $M = \text{Mo, W or Ti}$ and $R = \text{C}_6\text{H}_5$ or CF_3 .
J. C. G. Calado, A. R. Dias, M. S. Salema, J. A. Martinho Simões.
Journal of The Chemical Society, Dalton Transactions **1981**, 1174-1177.
- AC10 Enthalpies of Formation of $[\text{Mo}(\eta\text{-C}_5\text{H}_5)_2(\text{SR})_2]$ Complexes; $R = n\text{-C}_3\text{H}_7, i\text{-C}_3\text{H}_7, n\text{-C}_4\text{H}_9, \text{ or } t\text{-C}_4\text{H}_9$.
A. R. Dias, J. A. Martinho Simões, C. Teixeira.

Journal of The Chemical Society, Dalton Transactions **1981**, 1178-1179.

- AC11 Complexes of Dimolybdenum(II) and Dichromium(II) with 2-Hydroxy-6-methylpyridine (Hmhp) and *m*-Dimethoxybenzene (HDMP). Enthalpies of Formation of $[\text{Mo}_2(\text{mhp})_2]$, $[\text{Cr}_2(\text{mhp})_4]$, $[\text{Mo}_2(\text{mhp})_2(\text{OAc})_2]$ and $[\text{Cr}_2(\text{DMP})_4]$. K. J. Cavell, C. D. Garner, J. A. Martinho Simões, G. Pilcher, H. Al-Sammam, H. A. Skinner, G. Al-Tekhin, I. B. Walton, M. T. Z. Moattar.
Journal of The Chemical Society, Faraday Transactions I **1981**, 77, 2927-2938.
- AC12 The Enthalpies of Formation of Bis-(benzene)molybdenum and of Bis-(toluene)tungsten. J. A. Connor, N. I. El-Saied, J. A. Martinho Simões, H. A. Skinner.
Journal of Organometallic Chemistry **1981**, 212, 405-410.
- AC13 Enthalpies of Formation of $\text{Ti}(\eta\text{-C}_5\text{H}_5)_2(\text{OR})_2$ Complexes ($\text{R} = \text{C}_6\text{H}_5$, 2- $\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4$, 3- $\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4$, 4- $\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4$, and 2- ClC_6H_4). A. R. Dias, M. S. Salema, J. A. Martinho Simões.
Journal of Organometallic Chemistry **1981**, 222, 69-78.
- AC14 On the Evaluation of Metal-Ligand “Bond Strengths” in $\text{M}(\eta\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{L}_2$ Complexes. A. R. Dias, J. A. Martinho Simões.
Revista Portuguesa de Química **1982**, 24, 191-199.
- AC15 Enthalpies of Formation of Bis(η^5 -cyclopentadienyl)diphenyltitanium and Bis(η^5 -cyclopentadienyl)diferrocenyltitanium. A. R. Dias, M. S. Salema, J. A. Martinho Simões.
Organometallics **1982**, 1, 971-973.
- AC16 Enthalpies of Formation of Complexes $[\text{Ti}(\eta\text{-C}_5\text{H}_5)_2(\text{N}_3)_2]$ and $[\text{Ti}(\eta\text{-C}_5\text{H}_5)_2(\text{NC}_8\text{H}_6)_2]$. M. J. Calhorda, R. Gomes da Costa, A. R. Dias, J. A. Martinho Simões.
Journal of The Chemical Society, Dalton Transactions **1982**, 2327-2330.
- AC17 Enthalpies of Formation of $\text{Ti}(\eta\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{L}_2$ Complexes ($\text{L} = 3\text{-CH}_3\text{C}_6\text{H}_4$, 4- $\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4$, 4- $\text{CF}_3\text{C}_6\text{H}_4$, and 4- $\text{CH}_3\text{OC}_6\text{H}_4$). M. J. Calhorda, A. R. Dias, M. S. Salema, J. A. Martinho Simões.
Journal of Organometallic Chemistry **1983**, 255, 81-86.
- AC18 Metal-Carbon “Bond Strengths” in $\text{Cr}(\text{CO})_6$, $\text{Cr}(\eta\text{-C}_6\text{H}_6)_2$, and $\text{Cr}(\text{CO})_3(\eta\text{-C}_6\text{H}_6)$. M. J. Calhorda, C. F. Frazão, J. A. Martinho Simões.
Journal of Organometallic Chemistry **1984**, 262, 305-314.
- AC19 Enthalpies of Formation of Complexes $[\text{M}(\eta\text{-C}_5\text{H}_5)_2(\text{SR})_2]$ ($\text{M} = \text{Mo}$, W , or Ti ; $\text{R} = \text{C}_3\text{H}_7$, C_4H_9 , or C_6H_5); Metal-Sulphur Bond Enthalpies. M. J. Calhorda, A. R. Dias, J. A. Martinho Simões, C. Teixeira.
Journal of The Chemical Society, Dalton Transactions **1984**, 2659-2663.
- AC20 Ion Cyclotron Resonance and Photoelectron Studies of the Ionization Energetics and Thermochemical Properties of $\text{Mn}(\text{CO})_5(\text{benzyl})$. Implications for the Manganese-Manganese Bond Strength in $\text{Mn}_2(\text{CO})_{10}$. J. A. Martinho Simões, J. C. Schultz, J. L. Beauchamp.
Organometallics **1985**, 4, 1238-1242.

- AC21 Enthalpy of Formation of $\text{Ti}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2(\text{OCOCCL}_3)_2$.
A. R. Dias, M. S. Salema, J. A. Martinho Simões.
Revista Portuguesa de Química **1984**, 26, 227-229.
- AC22 Energetics of Transition Metal-Sulfur and -Oxygen Bonds in $\text{M}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{L}_2$ Complexes (M = Ti, Mo, W). Molecular Structure of $\text{Mo}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2(\text{SO}_4)$.
M. J. Calhorda, M.A.A.F. de C.T. Carrondo, A. R. Dias, A.M.T.S. Domingos, J. A. Martinho Simões, C. Teixeira.
Organometallics **1986**, 5, 660-667.
- AC23 Estimation of Stepwise M-L Bond Dissociation Enthalpies in $\text{M}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{L}_2$ Complexes.
M. J. Calhorda, A. R. Dias, A. M. Galvão, J. A. Martinho Simões.
Journal of Organometallic Chemistry **1986**, 307, 167-176.
- AC24 Entalpias de Ligação Metal de Transição-Ligando em Complexos do Tipo $\text{M}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{L}_2$.
J. A. Martinho Simões.
Química Nova **1986**, 9, 152-160. (Artigo convidado).
- AC25 Studies on the Transferability of Transition Metal-Carbon and -Hydrogen Bond Enthalpies in Bis(cyclopentadienyl) Complexes.
M. J. Calhorda, A. R. Dias, M. E. Minas da Piedade, M. S. Salema, J. A. Martinho Simões.
Organometallics **1987**, 6, 734-738.
- AC26 Agostic Bonds in $(\text{MCH}_3)^+$ Fragments. Implications for $\text{M}^+\text{-CH}_3$ Bond Dissociation Energies.
M. J. Calhorda, J. A. Martinho Simões.
Organometallics **1987**, 6, 1188-1190.
- AC27 Energetics of Molybdenum-Azobenzene, Titanium-Azobenzene, Titanium-Iodide, and Titanium-Carbonyl Bonds in Bis(cyclopentadienyl) Complexes.
A. R. Dias, P. B. Dias, H. P. Diogo, A. M. Galvão, M. E. Minas da Piedade, J. A. Martinho Simões.
Organometallics **1987**, 6, 1427-1432.
- AC28 Estimation of Standard Enthalpies of Formation of Crystalline Inorganic and Organometallic Complexes.
A. R. Dias, J. A. Martinho Simões, C. Teixeira, C. Airolidi, A. P. Chagas.
Journal of Organometallic Chemistry **1987**, 335, 71-83.
- AC29 Thermochemistry of $\text{M}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{L}_n$ Complexes (M = Ti, Mo, W).
A. R. Dias, J. A. Martinho Simões.
Polyhedron Symposium-in-Print on Metal-Ligand Bonding Energetics in Organotransition Metal Compounds (T.J. Marks, Editor),
Polyhedron **1988**, 7, 1531-1544. (Artigo convidado).
- AC30 Stepwise Ti-Cl, Ti-CH₃, and Ti-C₆H₅ Bond Dissociation Enthalpies in Bis(pentamethylcyclopentadienyl)titanium Complexes.
A. R. Dias, M. S. Salema, J. A. Martinho Simões, J. W. Pattiasina, J. H. Teuben.

Journal of Organometallic Chemistry **1988**, 346, C4-C6.

- AC31 Energetics of Metal-Sulfur Bonds in Complexes $M(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2(\text{SC}_2\text{H}_5)_2$ ($M = \text{Ti}, \text{W}$) and $\text{W}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2(\text{SC}_6\text{H}_5)_2$. Molecular Structure of $\text{Ti}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2(\text{SC}_2\text{H}_5)_2$. M. J. Calhorda, M. A. A. F. de C. T. Carrondo, A. R. Dias, C. Frazão, M. B. Hursthouse, J. A. Martinho Simões, C. Teixeira. *Inorganic Chemistry* **1988**, 27, 2513-2518.
- AC32 Estimation of Standard Enthalpies of Formation of Inorganic and Organometallic Compounds. II. A. R. Dias, J. A. Martinho Simões, C. Teixeira, C. Airoidi, A. P. Chagas. *Journal of Organometallic Chemistry* **1989**, 361, 319-334.
- AC33 Thermochemistry of the Complexes $\text{Ti}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)(\text{C}_5\text{Me}_4\text{CH}_2)$ and $\text{Ti}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)[\text{C}_5\text{Me}_3(\text{CH}_2)_2]$. A. R. Dias, M. S. Salema, J. A. Martinho Simões, J. W. Pattiasina, J. H. Teuben. *Journal of Organometallic Chemistry* **1989**, 364, 97-103.
- AC34 Enthalpy of Formation of the Benzoyl Radical by Photoacoustic Calorimetry. J. A. Martinho Simões, D. Griller. *Chemical Physics Letters* **1989**, 158, 175-177.
- AC35 Unifying the Solution Thermochemistry of Molecules, Radicals, and Ions. D. Griller, J. A. Martinho Simões, P. Mulder, B. A. Sim, D. D. M. Wayner. *Journal of the American Chemical Society* **1989**, 111, 7872-7876.
- AC36 Transition Metal-Hydrogen and Metal-Carbon Bond Strengths: The Keys to Catalysis. J. A. Martinho Simões, J. L. Beauchamp. *Chemical Reviews* **1990**, 90, 629-688.
- AC37 Syntheses, Electrochemistry, and Bonding of Bis(cyclopentadienyl)molybdenum Alkyl Complexes. Molecular Structure of $\text{Mo}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2(\text{C}_4\text{H}_9)_2$. Thermochemistry of $\text{Mo}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{R}_2$ and $\text{Mo}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{L}$ ($\text{R} = \text{CH}_3, \text{C}_2\text{H}_5, \text{C}_4\text{H}_9$; $\text{L} = \text{Ethylene}, \text{Diphenylacetylene}$). M. J. Calhorda, M. A. A. F. de C. T. Carrondo, A. R. Dias, A. M. Galvão, M. H. Garcia, A. M. Martins, M. E. Minas da Piedade, C. I. Pinheiro, C. C. Romão, J. A. Martinho Simões, L. F. Veiros. *Organometallics* **1991**, 10, 483-494.
- AC38 Standard Enthalpies of Formation of Gaseous Dicyclopentadienyl Molybdenum and - Tungsten Dihydrides. A. R. Dias, H. P. Diogo, M. E. Minas da Piedade, J. A. Martinho Simões, A. S. Carson, E. H. Jamea. *Journal of Organometallic Chemistry* **1990**, 391, 361-366.
- AC39 Standard Enthalpies of Formation of Sodium Alkoxides. J. P. Leal, A. Pires de Matos, J. A. Martinho Simões. *Journal of Organometallic Chemistry* **1991**, 403, 1-10.
- AC40 Triphenylsilane: A Useful Radical-Based Reducing Agent. M. Lesage, J. A. Martinho Simões, D. Griller.

Journal of Organic Chemistry **1990**, *55*, 5413-5414.

- AC41 Estimation of Standard Enthalpies of Formation of Inorganic and Organometallic Compounds. III. Homoleptic Metal Halides.
A. R. Dias, J. A. Martinho Simões, C. Teixeira, C. Airoidi, A. P. Chagas.
Polyhedron **1991**, *10*, 1433-1441.
- AC42 Organometallic Derivatives of Actinide Polypyrazolylborates.
A. Domingos, J. P. Leal, J. Marçalo, N. Marques, A. Pires de Matos, I. Santos, M. Silva, B. Kanellakopulos, R. Maier, C. Apostolidis, J. A. Martinho Simões.
European Journal of Solid State and Inorganic Chemistry, **1991**, *28*, 413-420.
- AC43 Studies of the Formation and Stability of Pentadienyl and 3-Substituted Pentadienyl Radicals.
K. B. Clark, P. N. Culshaw, D. Griller, F. P. Lossing, J. A. Martinho Simões, J. C. Walton.
Journal of Organic Chemistry **1991**, *56*, 5535-5539.
- AC44 Enthalpies of Formation of cis-Azobenzene and trans-Azobenzene.
A. R. Dias, M. E. Minas da Piedade, J. A. Martinho Simões, J. A. Simoni, C. Teixeira, H. P. Diogo, Y. Meng-Yan, G. Pilcher.
Journal of Chemical Thermodynamics **1992**, *24*, 439-447.
- AC45 Uranium-Ligand Bond Dissociation Enthalpies in Uranium(IV) Polypyrazolylborate Complexes.
J. P. Leal, N. Marques, A. Pires de Matos, M. J. Calhorda, A. M. Galvão, J. A. Martinho Simões.
Organometallics **1992**, *11*, 1632-1637.
- AC46 A Study on the Reducing Abilities of Tris(alkylthio)silanes.
C. Chatgililoglu, M. Guerra, A. Guerrini, G. Seconi, K. B. Clark, D. Griller, J. Kanabus-Kaminska, J. A. Martinho Simões.
Journal of Organic Chemistry **1992**, *57*, 2427-2433.
- AC47 Standard Enthalpy of Formation of Triethylaluminum.
J. P. Leal, J. A. Martinho Simões.
Organometallics **1993**, *12*, 1442-1444.
- AC48 Thermochemistry of Zirconium and Niobium Organometallic Compounds.
H. P. Diogo, J. A. Simoni, M. E. Minas da Piedade, A. R. Dias, J. A. Martinho Simões.
Journal of the American Chemical Society **1993**, *115*, 2764-2774.
- AC49 Bonding and Energetics of Phosphorus (III) Ligands in Transition Metal Complexes.
P. B. Dias, M. E. Minas da Piedade, J. A. Martinho Simões.
Coordination Chemistry Reviews **1994**, *135/136*, 737-807.
- AC50 Standard Molar Enthalpies of Formation of Lithium Alkoxides.
J. P. Leal, J. A. Martinho Simões.
Journal of Organometallic Chemistry **1993**, *460*, 131-138.
- AC51 The Enthalpy of Sublimation of Diphenylacetylene from Knudsen Effusion Studies.

- H. P. Diogo, M. E. Minas da Piedade, A. C. Fernandes, J. A. Martinho Simões, M. A. V. Ribeiro da Silva, M. J. S. Monte.
Thermochimica Acta **1993**, 228, 15-22.
- AC52 Photomicrocalorimetry: Photosubstitution of Carbonyl by Phosphites in $\text{Mn}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_4\text{CH}_3)(\text{CO})_3$.
P. B. Dias, C. Teixeira, A. R. Dias, J. A. Simoni, J. A. Martinho Simões.
Journal of Organometallic Chemistry **1994**, 482, 111-118.
- AC53 Uranium-Ligand Bond Dissociation Enthalpies in Uranium (IV) Polipyrazolylborate Complexes.
J. P. Leal, J. A. Martinho Simões.
Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions **1994**, 2687-2691.
- AC54 Standard Enthalpy of Formation and Enthalpy of Vaporization of Di-1,1-dimethylethyl Peroxide. Re-evaluation of the Standard Enthalpy of Formation of the Di-1,1-dimethylethoxy Radical.
H. P. Diogo, M. E. Minas da Piedade, J. A. Martinho Simões, Y. Nagano.
Journal of Chemical Thermodynamics **1995**, 27, 597-604.
- AC55 The Enthalpy of Formation of Methyl Fluoride.
J. F. Liebman, J. A. Martinho Simões, S. W. Slayden.
Structural Chemistry **1995**, 6, 65-69.
- AC56 Energetics of Organometallic Species: The Entropic Factor
M. E. Minas da Piedade, J. A. Martinho Simões.
Journal of Organometallic Chemistry **1996**, 518, 167-180.
- AC57 Energetics of the Oxidative Addition of I_2 to $[\text{Ir}(\mu\text{-L})(\text{I})(\text{CO})_2]_2$ ($\text{L} = \text{S}^t\text{Bu}$, 3,5- Me_2pz , 7-aza) Complexes. X-Ray Structure of $[\text{Ir}(\mu\text{-S}^t\text{Bu})(\text{I})(\text{CO})_2]_2$ and $[\text{Ir}(\mu\text{-3,5-Me}_2\text{pz})(\text{I})(\text{CO})_2]_2$.
M. A. Ciriano, A. R. Dias, P. M. Nunes, L. A. Oro, M. F. Minas da Piedade, M. E. Minas da Piedade, P. Ferreira da Silva, J. A. Martinho Simões, J. J. Pérez-Torrente, L. F. Veiros.
Structural Chemistry **1996**, 7, 337-354.
- AC58 Density-Functional and Density-Functional Reaction Field Calculations of the Molecular Properties of Phenol.
B. J. Costa Cabral, R. G. Bakker Fonseca, J. A. Martinho Simões.
Chemical Physics Letters **1996**, 258, 436-444.
- AC59 Molecular Thermochemistry: 20 Years of Experiments and Estimates.
M. E. Minas da Piedade, J. A. Martinho Simões.
Revista Portuguesa de Química **1997**, 4, 45-56.
- AC60 Energetics of the O–H Bond in Phenol and Substituted Phenols. A Critical Evaluation of Literature Data.
R. M. Borges dos Santos, J. A. Martinho Simões.
Journal of Physical and Chemical Reference Data **1998**, 27, 707-739.
- AC61 Substituent Effects on the O–H Bond Dissociation Enthalpies in Phenolic Compounds: Agreements and Controversies.

- M. M. Bizarro, B. J. Costa Cabral, R. M. Borges dos Santos, J. A. Martinho Simões. *Pure and Applied Chemistry* **1999**, 71, 1249-1256. Correction: *ibid.* 1609-1610.
- AC62 Photoacoustic Calorimetry. An Examination of a Non-Classical Thermochemistry Tool.
R. M. Borges dos Santos, A. L. C. Lagoa, J. A. Martinho Simões.
Journal of Chemical Thermodynamics **1999**, 31, 1483-1510.
- AC63 Thermochemical Properties and Structure of Phenol-(H₂O)₁₋₆ and Phenoxy-(H₂O)₁₋₄ by Density Functional Theory.
R. C. Guedes, B. J. Costa Cabral, J. A. Martinho Simões, H. P. Diogo.
Journal of Physical Chemistry A **2000**, 104, 6062-6068.
- AC64 Standard Enthalpies of Formation of 2,6-di-*tert*-Butyl-4-Methylphenol and 3,5-di-*tert*-Butylphenol and their Phenoxy Radicals.
M. A.V. Ribeiro da Silva, M. A. R. Matos, M. S. Miranda, M. H. F. A. Sousa, R. M. Borges dos Santos, M. M. Bizarro, J. A. Martinho Simões.
Structural Chemistry **2001**, 12, 171-181.
- AC65 Energetics of C-Cl, C-Br, and C-I Bonds in Haloacetic Acids. Enthalpies of Formation of XCH₂COOH (X = Cl, Br, I) Compounds and the Carboxymethyl Radical.
A. L. C. Lagoa, H. P. Diogo, M. P. Dias, M. E. Minas da Piedade, L. M. P. F. Amaral, M. A. V. Ribeiro da Silva, J. A. Martinho Simões, R. C. Guedes, B. J. Costa Cabral, K. Schwarz, M. Epple.
Chemistry – A European Journal **2001**, 7, 483-489.
- AC66 Solvation Enthalpies of Free Radicals: O–O Bond Strength in Di-*tert*-butylperoxide.
R. M. Borges dos Santos, V. S. F. Muralha, C. F. Correia, J. A. Martinho Simões.
Journal of the American Chemical Society **2001**, 123, 12670-12674.
- AC67 Organometallic Thermochemistry at CQE-IST. An Overview.
H. P. Diogo, M. E. Minas da Piedade, J. A. Martinho Simões, C. Teixeira.
Journal of Organometallic Chemistry **2001**, 632, 188-196.
- AC68 Phenol O–H Bond Dissociation Energy in Water Clusters.
P. Cabral do Couto, R. C. Guedes, B. J. Costa Cabral, J. A. Martinho Simões.
International Journal of Quantum Chemistry **2002**, 86, 297-304.
- AC69 S–H Bond Dissociation Enthalpies in Thiophenols: A Time-Resolved Photoacoustic Calorimetry and Quantum Chemistry Study.
R. M. Borges dos Santos, V. S. F. Muralha, C. F. Correia, R. C. Guedes, B. J. Costa Cabral, J. A. Martinho Simões.
Journal of Physical Chemistry A **2002**, 106, 9883-9889.
- AC70 Solvent Effects on the Energetics of the Phenol O-H bond: Differential Solvation of Phenol and Phenoxy Radical in Benzene and Acetonitrile.
R. C. Guedes, K. Coutinho, B. J. Costa Cabral, S. Canuto, C. F. Correia, R. M. Borges dos Santos, J. A. Martinho Simões.
Journal of Physical Chemistry A **2003**, 107, 9197-9207.
- AC71 O–H Bond Dissociation Enthalpies in Hydroxyphenols. A Time-Resolved Photoacoustic Calorimetry and Quantum Chemistry Study.

- C. F. Correia, R. C. Guedes, R. M. Borges dos Santos, B. J. Costa Cabral, J. A. Martinho Simões.
Physical Chemistry Chemical Physics **2004**, 6, 2109-2118.
- AC72 The Hydration of the OH Radical: Microsolvation Modeling and Statistical Mechanics Simulation.
P. Cabral do Couto, R. C. Guedes, B. J. Costa Cabral, J. A. Martinho Simões.
Journal of Chemical Physics **2003**, 119, 7344-7355.
- AC73 Energetics of Alkylbenzyl Radicals: A Time-Resolved Photoacoustic Calorimetry Study.
V. S. Muralha, R. M. Borges dos Santos, J. A. Martinho Simões.
Journal of Physical Chemistry A **2004**, 108, 936-942.
- AC74 Reaction of *para*-Hydroxyl-substituted Diphenylmethanes with *tert*-Butoxy Radical.
C. F. Correia, R. M. Borges dos Santos, S. G. Estácio, J. P. Telo, B. J. Costa Cabral, J. A. Martinho Simões.
ChemPhysChem **2004**, 5, 1217-1221.
- AC75 Homolytic Dissociation in Hydrogen Bonding Liquids: Energetics of the Phenol O–H Bond in Methanol and the Water O–H Bond in Water.
S. G. Estácio, P. Cabral do Couto, R. C. Guedes, B. J. Costa Cabral, J. A. Martinho Simões.
Theoretical Chemical Accounts **2004**, 112, 282-289.
- AC76 Gas-Phase Energetics of Organic Free Radicals using Time-Resolved Photoacoustic Calorimetry.
C. F. Correia, P. M. Nunes, R. M. Borges dos Santos, J. A. Martinho Simões.
Thermochimica Acta **2004**, 420, 3-11.
- AC77 The Energetics of Intramolecular Hydrogen Bonding in Di-substituted Benzenes by the *ortho-para* Method.
S. G. Estácio, P. Cabral do Couto, B. J. Costa Cabral, M. E. Minas da Piedade, José A. Martinho Simões.
Journal of Physical Chemistry A **2004**, 108, 10834-10843.
- AC78 Antioxidant Activity of a Catechol Derived from Abietic Acid.
G. C. Justino, C. F. Correia, L. Mira, R. M. Borges dos Santos, José A. Martinho Simões, A. M. Silva, C. Santos, B. Gigante.
Journal of Agricultural and Food Chemistry **2006**, 54, 342-348.
- AC79 Carbon-Hydrogen Bond Dissociation Enthalpies in Ethers. A Theoretical Study.
F. Agapito, B. J. Costa Cabral, J. A. Martinho Simões.
Journal of Molecular Structure: THEOCHEM **2005**, 719, 109-114.
- AC80 The Enthalpy of Formation of the Pentane-2,4-dionate radical: A Complete Basis Set Approach.
P. Cabral do Couto, B. J. Costa Cabral, J. A. Martinho Simões.
Chemical Physics Letters **2006**, 419, 486-491.
- AC81 Energetics of Hydroxybenzoic Acids and of the Corresponding Carboxyphenoxyl Radicals. Intramolecular Hydrogen Bonding in 2-Hydroxybenzoic Acid.

- S. S. Pinto, H. P. Diogo, R. C. Guedes, B. J. Costa Cabral, M. E. Minas da Piedade, J. A. Martinho Simões.
Journal of Physical Chemistry A **2005**, *109*, 9700-9708.
- AC82 Oxygen-Oxygen Bond Dissociation Enthalpies of Di-*tert*-butyl Peroxide and Di-trifluoromethyl Peroxide.
F. Agapito, B. J. Costa Cabral, J. A. Martinho Simões.
Journal of Molecular Structure: THEOCHEM **2005**, *729*, 223-227.
- AC83 Time-resolved Photoacoustic Calorimetry as a Tool to Determine Rate Constants of Hydrogen Abstraction Reactions.
P. M. Nunes, C. F. Correia, R. M. Borges dos Santos, J. A. Martinho Simões.
International Journal of Chemical Kinetics **2006**, *38*, 357-363.
- AC84 Bond Dissociation Enthalpies in the Gas Phase and in Organic Solvents: Making Ends Meet.
R. M. Borges dos Santos, B. J. Costa Cabral, J. A. Martinho Simões.
Pure & Applied Chemistry **2007**, *79*, 1369-1382.
- AC85 Enthalpy of Formation of the Cyclopentadienyl Radical: Photoacoustic Calorimetry and ab Initio Studies.
P. M. Nunes, F. Agapito, B. J. Costa Cabral, R. M. Borges dos Santos, J. A. Martinho Simões.
Journal of Physical Chemistry A **2006**, *110*, 5130-5134.
- AC86 S–H Bond Dissociation Enthalpies: The Importance of a Complete Basis Set Approach.
P. Cabral do Couto, B. J. Costa Cabral, J. A. Martinho Simões.
Chemical Physics Letters **2006**, *421*, 504-507.
- AC87 A Cost-Effective Basis Set Extrapolation Scheme: Application to the Energetics of Homolytic Bond Dissociation.
F. Agapito, B. J. Costa Cabral, J. A. Martinho Simões.
Journal of Molecular Structure: THEOCHEM **2007**, *811*, 361-372.
- AC88 Substituent Effects on Water-Assisted Proton Transfer in $[p\text{-XC}_6\text{H}_4\text{OH}-(\text{H}_2\text{O})_{1-3}]^{\bullet+}$ Clusters.
H. F. M. C. Martiniano, B. J. Costa Cabral, J. A. Martinho Simões.
Chemical Physics Letters **2007**, *442*, 451-459.
- AC89 Energetics of the Allyl Group.
F. Agapito, P. M. Nunes, B. J. Costa Cabral, R. M. Borges dos Santos, J. A. Martinho Simões.
Journal of Organic Chemistry **2007**, *72*, 8770-8779. Correction: *ibid.* **2008**, *73*, 2480.
- AC90 Estimation of Enthalpies of Formation of Organometallic Compounds from Their Molecular Structures.
J. Jover, R. Bosque, J. A. Martinho Simões, J. Sales.
Journal of Organometallic Chemistry **2008**, *693*, 1261-1268.
- AC91 C–H Bond Dissociation Enthalpies in Norbornane. An Experimental and Computational Study.

P. M. Nunes, S. G. Estácio, G. T. Lopes, B. J. Costa Cabral, R. M. Borges dos Santos, J. A. Martinho Simões.
Organic Letters **2008**, *10*, 1613-1616.

- AC92 Energetic Differences between the Five- and Six-Membered Ring Hydrocarbons: Strain Energies in the Parent and Radical Molecules.
F. Agapito, P. M. Nunes, B. J. Costa Cabral, R. M. Borges dos Santos, J. A. Martinho Simões.
Journal of Organic Chemistry **2008**, *73*, 6213-6223.
- AC93 Determination of Gas-Phase Acidities of Dimethylphenols: Combined Experimental and Theoretical Study.
P. J. A. Madeira, P. J. Costa, M. T. Fernandez, J. A. Martinho Simões, J. P. Leal.
Journal of the American Society for Mass Spectrometry **2008**, *19*, 1590-1599.
- AC94 The α -C–H BDE in Tetralin: A Time-Resolved Photoacoustic Calorimetry Study.
R. M. Borges dos Santos, P. M. Nunes, J. A. Martinho Simões.
Journal of Thermal Analysis and Calorimetry **2010**, *100*, 381-384.
- AC95 Energetics of *tert*-Butoxyl Addition Reaction to Norbornadiene: A Method for Estimating the π -Bond Strength of a Carbon-Carbon Double Bond.
P. M. Nunes, S. G. Estácio, G. T. Lopes, F. Agapito, R. C. Santos, B. J. Costa Cabral, R. M. Borges dos Santos, J. A. Martinho Simões.
Journal of Physical Chemistry A **2009**, *113*, 6524-6530.
- AC96 Additivity Methods for Prediction of Thermochemical Properties. The Laidler Method Revisited. 2. Hydrocarbons Including Substituted Cyclic Compounds.
R. C. Santos, J. P. Leal, J. A. Martinho Simões.
Journal of Chemical Thermodynamics **2009**, *41*, 1356-1373.
- AC97 Energetics of H-Atom Addition to Naphthalene: A Thermochemical Cycle from Tetralin to Naphthalene.
R. C. Santos, F. Agapito, E. M. Gonçalves, J. A. Martinho Simões, R. M. Borges dos Santos.
Journal of Chemical Thermodynamics **2013**, *61*, 83-89.
- AC98 Thermodynamically Sick Molecules: Searching for Defective Experimental Enthalpies of Formation Values Using Empirical and Quantum Chemistry Methods.
R. C. Santos, T. S. Almeida, F. Agapito, R. M. Borges dos Santos, J. A. Martinho Simões.
Structural Chemistry **2013**, *24*, 2017-2026.
- AC99 Energetics of Non-Bonded *ortho* Interactions in Alkylbenzenes.
F. Agapito, R. C. Santos, J. A. Martinho Simões.
Journal of Physical Chemistry A **2013**, *117*, 2873-2878.
- AC100 Enthalpies of Formation of Dihydroxybenzenes Revisited: Combining Experimental and High-Level *ab initio* Data.
E. M. Gonçalves, F. Agapito, T. S. Almeida, J. A. Martinho Simões.
Journal of Chemical Thermodynamics **2014**, *73*, 90-96.
- AC101 Benchmark Thermodynamic Properties of Methylanisoles: Experimental and Theoretical Study.

V. N. Emel'yanenko, K. V. Zaitseva, F. Agapito, J. A. Martinho Simões, S. P. Verevkin.

Journal of Chemical Thermodynamics **2015**, 85, 155-162.

AC102 The Thermochemistry of Cubane 50 Years after Its Synthesis: A High-Level Theoretical Study of Cubane and Its Derivatives.

F. Agapito, R. C. Santos, R. M. Borges dos Santos, J. A. Martinho Simões.

Journal of Physical Chemistry A **2015**, 119, 2998-3007.

Livros (autoria e edição)

L1 Energetics of Organometallic Species.

J. A. Martinho Simões, Editor.

Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1992.

L2 Energetics of Organic Free Radicals.

J. A. Martinho Simões, J. F. Liebman, A. Greenberg, Editors.

Structure, Energetics and Reactivity in Chemistry Series (SEARCH Series), J.F. Liebman, A. Greenberg, Series Editors, Vol. IV, Blackie, London, 1996.

L3 Perfil da Investigação Científica em Portugal. Química, Engenharia Química e Biotecnologia.

J. A. Martinho Simões (Coordenação Científica).

Observatório das Ciências e das Tecnologias, Lisboa, 1999.

L4 Guia do Laboratório de Química e Bioquímica.

J. A. Martinho Simões, M. A. R. Botas Castanho, I. M. S. Lampreia, F. J. V. Santos, C. A. Nieto de Castro, M. F. Norberto, M. T. Pamplona, L. Mira, M. M. Meireles.

Lidel, Lisboa, 2000.

L5 Guia do Laboratório de Química e Bioquímica (2ª edição).

J. A. Martinho Simões, M. A. R. Botas Castanho, I. M. S. Lampreia, F. J. V. Santos, C. A. Nieto de Castro, M. F. Norberto, M. T. Pamplona, L. Mira, M. M. Meireles.

Lidel, Lisboa, 2008.

L6 Molecular Energetics: Condensed-Phase Thermochemical Techniques.

J. A. Martinho Simões, M. E. Minas da Piedade.

Oxford University Press: New York, 2008.

L7 Guia do Laboratório de Química e Bioquímica (3ª edição).

J. A. Martinho Simões, M. A. R. Botas Castanho, I. M. S. Lampreia, F. J. V. Santos, C. A. Nieto de Castro, M. T. Pamplona, M. E. Minas da Piedade.

Lidel, Lisboa, 2017.

L8 Anatomia das Moléculas.

J. A. Martinho Simões

Em impressão.

Capítulos de Livros

CL1 Reaction Kinetics of Sulfur-Centered Radicals.

- D. Griller, J. A. Martinho Simões.
Sulfur-Centered Reactive Intermediates in Chemistry and Biology
 (C. Chatgililoglu, K.-D. Asmus, Editors), Plenum, New York, 1990; pp. 327-340.
- CL2 Thermochemistry of Sulfur-Centered Intermediates.
 D. Griller, J. A. Martinho Simões, D. D. M. Wayner.
Sulfur-Centered Reactive Intermediates in Chemistry and Biology
 (C. Chatgililoglu, K.-D. Asmus, Editors), Plenum, New York, 1990; pp. 37-52.
- CL3 Metal-Carbon and Metal-Hydrogen Bond Dissociation Enthalpies from Classical and Non-Classical Calorimetric Studies.
 A. R. Dias, H. P. Diogo, D. Griller, M. E. Minas da Piedade,
 J. A. Martinho Simões.
American Chemical Society Symposium Series No. 428, Bonding Energetics in Organometallic Compounds (T.J. Marks, Editor), 1990; Chapter 14.
- CL4 Estimates of Thermochemical Data for Organometallic Compounds.
 J. A. Martinho Simões.
Energetics of Organometallic Species (J. A. Martinho Simões, Editor), Kluwer, Dordrecht, 1992; pp. 197-232.
- CL5 Aspects of the Thermochemistry of Lithium Compounds.
 J. F. Liebman, J. A. Martinho Simões, S. W. Slayden.
Lithium Chemistry: A Theoretical and Experimental Overview (A.-M. Sapse, P. von Ragué Schleyer, Editors), Wiley, New York, 1995; Chapter 6.
- CL6 Thermochemistry of Organo-Arsenic, Antimony and Bismuth Compounds.
 J. F. Liebman, J. A. Martinho Simões, S. W. Slayden.
The Chemistry of Organic Arsenic, Antimony and Bismuth Compounds (S. Patai, Editor), Wiley, New York, 1994; Chapter 4.
- CL7 Thermochemistry of Organometallic Compounds of Germanium, Tin and Lead.
 J. A. Martinho Simões, J. F. Liebman, S. W. Slayden.
The Chemistry of Organic Germanium, Tin and Lead Compounds (S. Patai, Editor), Wiley, New York, 1995; Chapter 4.
- CL8 A Short and Illustrated Guide to Metal-Alkyl Bonding Energetics.
 J. A. Martinho Simões, M. E. Minas da Piedade.
Energetics of Organic Free Radicals (J. A. Martinho Simões, A. Greenberg, J.F. Liebman, Editors), Blackie, London, 1996; Chapter 6.
- CL9 Thermochemistry of the Organometallic Compounds of Silver and Gold.
 J. F. Liebman, J. A. Martinho Simões, S. W. Slayden.
The Chemistry of Organic Derivatives of Gold and Silver (S. Patai, Z. Rappoport, Editors), Wiley, New York, 1999; Chapter 3.
- CL10 Experimental Methods to Derive Bond Energy Data. A Schematic Overview.
 J. A. Martinho Simões, M. A. V. Ribeiro da Silva.
Energetics of Stable Molecules and Reactive Intermediates (M. E. Minas da Piedade, Editor), Kluwer, Dordrecht, 1999; pp. 1-28.
- CL11. Organometallic Thermochemistry Data.
 J. A. Martinho Simões.

NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69, W. G. Mallard and P. J. Linstrom, Eds., National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899 (<http://webbook.nist.gov/chemistry/>).

- CL12 Structure and Bonding in Organometallic Compounds: Organometallic Thermochemistry.
J. A. Martinho Simões, M. E. Minas da Piedade.
Comprehensive Organometallic Thermochemistry III; R. H. Crabtree, D. M. P. Mingos, Editors; Elsevier: Oxford, 2007. Vol. 1, Chapter 1.22, pp. 605-638.

Trabalhos de Natureza Pedagógica

- TP1 Termodinâmica Molecular do Gás Perfeito.
J. A. Martinho Simões, C. A. Nieto de Castro.
Técnica **1975**, no. 430, 67-80.
- TP2 Problemas de Termodinâmica Estatística.
C. A. Nieto de Castro, J. A. Martinho Simões.
IST, Lisboa, 1975.
- TP3 Calor Específico de Sólidos. Contribuição Vibracional.
J. A. Martinho Simões.
A.E.I.S.T., Lisboa, 1977.
- TP4 Molecular Thermodynamics of a Real Gas. Some Comments about Property Evaluation.
J. A. Martinho Simões, V. A. Meira Soares, C. A. Nieto de Castro.
Acta Química Compostelense, Proceedings da I Conferencia Internacional de Termodinâmica de Dissolución de no Electrólitos, Santiago de Compostela, Espanha, 1979; pp. 527-541.
- TP5 Conceito e Medida de Temperatura.
I. J. Domingos, J. A. Martinho Simões, A. F. de Mendonça, A. F. S. Santos.
Boletim da Sociedade Portuguesa de Química **1980**, Série II, no. 3, 27-36.
- TP6 Guia do Laboratório de Química-Física.
Vários autores.
A.E.I.S.T., Lisboa, 1984-1992.
- TP7 Elementos de Cinética Química.
J. A. Martinho Simões.
IST, Lisboa, 1986.
- TP8 Um Banco de Dados de Entalpias de Vaporização e de Sublimação.
H. P. Diogo, M. Dionísio, A. M. Galvão, J. A. Martinho Simões.
Boletim da Sociedade Portuguesa de Química **1988**, Série II, no. 31, 22.
- TP9 Filling Ampoules with Air Sensitive Compounds without a Glove Box.
M. E. Minas da Piedade, A. R. Dias, J. A. Martinho Simões.
Journal of Chemical Education **1991**, 68, 261.

- TP10 Thermochemical Examples of Statistical Pitfalls: A Poor, but Real, Linear Plot and a Linear Correlation that is not.
J. A. Martinho Simões, C. Teixeira, C. Airoidi, A. P. Chagas.
Journal of Chemical Education **1992**, 69, 475-478.
- TP11 A Reaction-Solution Calorimeter for the Undergraduate Laboratory.
H. P. Diogo, M. E. Minas da Piedade, J. J. Moura Ramos, J. A. Simoni, J. A. Martinho Simões.
Journal of Chemical Education **1992**, 69, 940-942.
- TP12 Intermolecular Forces in Solution and Lattice Energies of Ionic Crystals. Calorimetric Experiments for the Physical-Chemistry Undergraduate Laboratory.
H. P. Diogo, M. E. Minas da Piedade, J. J. Moura Ramos, J. A. Simoni, J. A. Martinho Simões.
Journal of Chemical Education, **1993**, 70, A227-A232.
- TP13 O Carbono.
J. A. Martinho Simões.
Química **1992**, no. 47, 43-45.
- TP14 A Energia das Moléculas.
J. A. Martinho Simões.
Colóquio-Ciências **1993**, no. 13, 23-42.
- TP15 Guia do Laboratório do Departamento de Química e Bioquímica.
Vários autores.
FCUL, 1994, 1995.
- TP16 Problemas de Termodinâmica Molecular.
C. A. Nieto de Castro, J. A. Martinho Simões.
FCUL, Lisboa, 1999.

Outros Trabalhos

- OT1 Termoquímica de Metalocenos Dobrados.
Tese de Doutoramento em Engenharia Química.
Instituto Superior Técnico, Janeiro de 1981.
- OT2 Recomendações para Nomenclatura e Apresentação de Resultados em Análise Térmica.
J. A. Martinho Simões, M. A. V. Ribeiro da Silva.
Sociedade Portuguesa de Química, 1978.
- OT3 Recomendações para a Nomenclatura de Quantidades Termodinâmicas e Quantidades Físicas Relacionadas.
M. A. V. Ribeiro da Silva, J. A. Martinho Simões.
Relatório Técnico do Centro de Investigação em Química da Universidade do Porto, 1978.
- OT4 Solution Homolytic Bond Dissociation Energies of Organotransition-Metal Hydrides. (Comentários sobre o artigo: M. Tilset, V. D. Parker, *J. Am. Chem. Soc.* **1989**, 111, 6711).

- J. A. Martinho Simões.
CHEMTRACTS-Analytical, Physical, and Inorganic Chemistry **1990**, 2, 360-363.
- OT5 Direct Observation of η^2 -Arene Complexes of $[(C_5Me_5)Rh(PMe_3)]$.
 (Comentários sobre o artigo: W. D. Jones, L. Dong, *J. Am. Chem. Soc.* **1989**, 111, 8722).
 J. A. Martinho Simões.
CHEMTRACTS-Inorganic Chemistry **1991**, 3, 16-18.
- OT6 Uranium-Ligand Bond Dissociation Enthalpies in $U(C_9H_7)_3L$.
 (Comentários sobre o artigo: S. Bettonville, J. Goffart, J. Fuger, *J. Organometal. Chem.* **1990**, 393, 205).
 J. A. Martinho Simões.
CHEMTRACTS-Inorganic Chemistry **1991**, 3, 143-145.
- OT7 Thermochemical Interpretation of Electrode Potentials for Transition Metal Complexes.
 (Comentários sobre o artigo: D. E. Richardson, *Inorg. Chem.* **1990**, 29, 3213).
 J. A. Martinho Simões.
CHEMTRACTS-Inorganic Chemistry **1991**, 3, 221-224.
- OT8 A Photoelectron-Photoion Coincidence Study of $Fe(CO)_5$.
 (Comentários sobre o artigo: K. Norwood, A. Ali, G. D. Flesch, C. Y Ng, *J. Am. Chem. Soc.* **1990**, 112, 7502).
 J. A. Martinho Simões.
CHEMTRACTS-Inorganic Chemistry **1991**, 3, 225-227.
- OT9 Solution Calorimetric, Equilibrium, and Synthetic Studies of Oxidative Addition/Reductive Elimination of C_5R_5H ($R=H, Me, Indenyl$) to/from the Complexes $M(CO)_3(RCN)_3/(\eta^5-C_5R_5)M(CO)_3H$ ($M=Cr, Mo, W$).
 (Comentários sobre o artigo: G. J. Kubas, G. Kiss, C. D. Hoff, *Organometallics* **1991**, 10, 2870).
 J. A. Martinho Simões.
CHEMTRACTS-Inorganic Chemistry **1992**, 4, 104-106.
- OT10 Electron Affinity and Gas-Phase Electron Transfer Kinetics of $(\eta^4\text{-Butadiene})iron\ Tricarbonyl$.
 (Comentários sobre o artigo: G. W. Dillow, P. Kebarle, *J. Am. Chem. Soc.* **1992**, 114, 5742).
 J. A. Martinho Simões.
CHEMTRACTS-Inorganic Chemistry **1992**, 4, 234-236.
- OT11 Metal Carbonyl Complexes with Xenon and Krypton: IR Spectra, CO Substitution Kinetics, and Bond Energies.
 (Comentários sobre o artigo: B. H. Weiller, *J. Am. Chem. Soc.* **1992**, 114, 10910).
 J. A. Martinho Simões.
CHEMTRACTS-Inorganic Chemistry **1992**, 4, 357-359.
- OT12 $Co^+ \cdot (H_2)_n$ Clusters: Binding Energies and Molecular Parameters.
 (Comentários sobre o artigo: P. R. Kemper, J. Bushnell, G. von Helden, M. T. Bowers *J. Phys. Chem.* **1993**, 97, 52).
 J. A. Martinho Simões.

CHEMTRACTS-Inorganic Chemistry **1993**, 5, 53-55.

- OT13. Journal of Chemical Thermodynamics. Special Issue on Thermochemistry.
J. A. Martinho Simões (Invited Editor).
Journal of Chemical Thermodynamics **1999**, 31, No. 11.
- OT14. The Life and Career of Manuel Ribeiro da Silva
J. A. Martinho Simões, J. F. Liebman, M. J. S. Monte (Invited Editors).
Journal of Chemical Thermodynamics **2014**, 73, 1-2.

Artigos vários

- AV1 Entrevista com A. Herculano de Carvalho.
J. A. Martinho Simões.
Boletim da Sociedade Portuguesa de Química **1982**, Série II, no. 12, 4-7.
- AV2 Avaliação de Conhecimentos no IST.
J. A. Martinho Simões.
Boletim Informativo do IST, Maio de 1984; pp. 11-13.
- AV3 A Comissão Pedagógica do Departamento de Engenharia Química - Uma Experiência Pedagógica no IST.
J. A. Martinho Simões.
Simpósio Pedagogia na Universidade, Lisboa 1985; pp. 145-148.
- AV4 O “bias” do Professor e a Química-Física de P. Atkins.
(Crítica ao livro *Physical Chemistry*, de P. W. Atkins).
J. A. Martinho Simões.
Boletim da Sociedade Portuguesa de Química **1985**, Série II, no. 20, 59-60.
- AV5 Como se faz Química. Uma Reflexão sobre a Química e a Actividade do Químico
(Crítica ao livro da autoria de Aécio Pereira Chagas).
J. A. Martinho Simões.
Boletim da Sociedade Portuguesa de Química **1990**, Série II, no. 39, 69.
- AV6 Átomos, Electrões e Mudança.
(Crítica ao livro *Atoms, Electrons and Change*, de P. W. Atkins).
J. A. Martinho Simões.
Química **1993**, no. 48, 51.
- AV7 Bibliotecas Científicas.
J. A. Martinho Simões.
Química **1993**, no. 49, 10-11.
- AV8 Fotografia, Chuva Ácida e CFCs.
(Crítica a livros editados pelo Institute for Chemical Education).
J. A. Martinho Simões.
Química **1993**, no. 49, 48.
- AV9 A Química é Divertida.
(Crítica a livros editados pelo Institute for Chemical Education).
J. A. Martinho Simões.

Química **1993**, no. 50, 71.

- AV10 Universidade de Lisboa, Faculdade de Ciências, Departamento de Química e Bioquímica.
J. A. Martinho Simões.
Química **1995**, no. 56, 38-42.
- AV11 Procura-se: Licenciatura Nova.
J. A. Martinho Simões.
Química **1995**, no. 56, 11-13.
- AV12 Argilas, as Essências da Terra
(Crítica ao livro *Argilas, as Essências da Terra*, de A. P. Chagas).
J. A. Martinho Simões.
Química **1997**, no. 67, 39.
- AV13 Forward (for the Special Issue on Thermochemistry).
J. A. Martinho Simões.
Journal of Chemical Thermodynamics **1999**, 31, 1383-1384.
- AV14 Thermochemical and Thermodynamic Properties of Organometallic Compounds.
(Crítica ao livro de I. B. Rabinovich, V. P. Nistratov, V. I. Tel'noy, M. S. Sheiman).
J. A. Martinho Simões.
Journal of Chemical and Engineering Data **1999**, 44, 1434.
- AV15 Termodinâmica Química: Fundamentos, Métodos e Aplicações.
(Crítica ao livro de A. P. Chagas).
J. A. Martinho Simões.
Química **2000**, no. 77, 50.
- AV16 A Conspiração Solar do Padre Himalaya.
(Crítica ao livro de Jacinto Rodrigues).
J. A. Martinho Simões.
Química **2000**, no. 77, 51.
- AV17 E for Europe or for Entropy?
J. A. Martinho Simões.
Nachrichten aus der Chemie **2000**, 48, 1085.
- AV18 CERC3 – Uma das Pontas da Estrela AllChemE.
J. A. Martinho Simões.
Química **2000**, no. 79, 4.
- AV19 Um Ferro ARD/JC.
J. A. Martinho Simões.
Química **2001**, no. 83, 50-53.
- AV20 Entrevista.
J. A. Martinho Simões.
Química **2002**, no. 87, 43-50.
- AV21 Perfil do Professor Jorge Calado
J. A. Martinho Simões.

Química **2003**, no. 89, 34.

- AV22 Paz de Espírito
J. A. Martinho Simões.
InfoCiências **2004**, no. 140, 22-25.
- AV23 De Regresso aos Gregos? A Crise das Ciências Tradicionais.
J. A. Martinho Simões.
Química **2005**, no. 98, 12-13.
- AV24 A Criação do Espaço Científico Europeu: “Top-down” ou “Bottom-up”?
J. A. Martinho Simões.
Canal BQ (Revista da Sociedade Portuguesa de Bioquímica) **2006**, no. 2, 20-22.
- AV25 Entrevista.
J. A. Martinho Simões.
Improp (Revista da Associação dos Estudantes da FCUL) **2006**, no. 2, Série XIV, 11-13.
- AV26 A Idade dos Químicos.
J. A. Martinho Simões, J. Pedrosa de Jesus, J. Ferreira Gomes.
Química **2006**, no. 103, 15-18.
- AV27 Blue-sky Research e Inovação.
J. A. Martinho Simões.
Cadernos de Economia **2010**, no. 91 (Abr-Jun), 102-104.
- AV28 Size Matters?
J. A. Martinho Simões, F. J. V. Santos.
Química **2011**, no. 122, 26.

Conferências e Comunicações Convidadas

1. Centro de Química Estrutural, IST (1976, 1977, 1978, 1981, 1984, 1989).
2. Departamento de Química da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto (1977).
3. National Bureau of Standards, Gaithersburg, Maryland, USA (1983).
4. Departamento de Química da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto (1984).
5. Chemical Center, University of Lund, Suécia (1984).
6. Instituto de Química da Universidade Estadual Paulista, Araraquara, S. Paulo, Brasil (1985).
7. Instituto de Química da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, S. Paulo, Brasil (1985).
8. Instituto de Química da Universidade de S. Paulo, S. Paulo, Brasil (1985).
9. Departamento de Química da Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Brasil (1985).
10. Laboratório Nacional de Engenharia e Tecnologia Industrial, Sacavém, Portugal (1987).

11. Instituto de Química da Universidade Estadual da Paraíba, João Pessoa, Paraíba, Brasil (1988).
12. Instituto de Química da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, S. Paulo, Brasil (1988).
13. Instituto de Física e Química de S. Carlos, Universidade de S. Paulo, S. Carlos, S. Paulo, Brasil (1988).
14. Departamento de Química da Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de S. Paulo, Ribeirão Preto, S. Paulo, Brasil (1988).
15. Departamento de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil (1988).
16. Division of Chemistry, National Research Council of Canada, Ottawa, Canadá (1988).
17. Department of Chemistry, University of Calgary, Calgary, Alberta, Canadá (1989).
18. Simpósio “Bond Energies and the Thermodynamics of Organometallic Reactions”, American Chemical Society 198th National Meeting, Miami Beach, Florida, USA (1989).
19. Simpósio "Reaction of Hydrocarbons with Metal Atoms, Clusters, and Solids", University of Oslo, Oslo, Noruega (1990).
20. Italian-Portuguese-Spanish Meeting in Inorganic Chemistry, Gandía, Espanha (1990).
21. NATO Advanced Study Institute “Energetics of Organometallic Species”, Curia, Portugal (1991).
22. XI Reunión Anual Española de Química Organometálica, El Escorial, Espanha (1991).
23. Workshop “Frontiers in Inorganic Chemistry” (JNICT-NSF-FLAD), Lisboa (1992).
24. V International Conference on Thermodynamics of Solution of Non-Electrolytes, Porto, 1992.
25. Departament de Química Inorgànica, Universitat de València, Espanha (1992).
26. Departament de Química Inorgànica, Universitat de Barcelona, Espanha (1992).
27. Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Zaragoza, Espanha (1992).
28. Chemical Kinetics and Thermodynamics Division, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland, USA (1993).
29. Latin-American Inorganic Chemistry Meeting, Santiago de Compostela, Espanha (1993).
30. Conferência “A Química e Nós”, integrada no *Viva a Ciência*, Funchal (1994).
31. Conferência “A Química e Nós”, integrada no *Viva a Ciência*, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (1994).
32. Seminário Agostinho Lourenço (A Energia das Moléculas), Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (1994).
33. Conferência plenária (Os Gritos das Moléculas) no 2º Encontro Nacional de Química-Física da SPQ, Porto (1995).

34. Physical and Chemical Properties Division, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, USA (1996).
35. Department of Chemistry, Memphis State University, Memphis, Tennessee, USA (1996).
36. Department of Chemistry, University of Missouri, St. Louis, USA (1996).
37. Department of Chemistry, University of North Carolina at Charlotte, USA (1997).
38. Conferência “A Química e Nós”, integrada nos *Dias Abertos*, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (1998).
39. NATO Advanced Study Institute “Energetics of Stable Molecules and Reactive Intermediates”, Castelo Branco, Portugal (1998).
40. 15th International Conference on Chemical Thermodynamics, Porto, Portugal (1998).
41. Departamento de Química, Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa, Monte da Caparica, Portugal (1999).
42. Palestra “Os Santos Cálices da Química”, integrada no Seminário “Química: do Marquês de Pombal ao Século XXI”, Escola Politécnica, Lisboa, Portugal (1999).
43. Palestra integrada nos “Serões do Museu da Ciência”, Escola Politécnica, Lisboa, Portugal (2000).
44. Conferência plenária “A Luz que dá Voz às Moléculas” na 23ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, Poços de Caldas, Minas Gerais, Brasil (2000).
45. Conferência plenária “The Arts of the Chemist” no 6th European Conference on Research in Chemical Education and 2nd European Conference on Chemical Education, Aveiro, Portugal (2001).
46. Conferência plenária “A Luz que dá Voz às Moléculas” no XV Encontro Galego-Português de Química, A Coruña, Espanha (2001).
47. Comunicação convidada “As Artes do Químico” no XVIII Encontro Nacional da SPQ, Aveiro, Portugal (2002).
48. Palestra “As Artes do Químico” na sessão comemorativa do 91º aniversário da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Portugal (2002).
49. Departamento de Tecnologia das Indústrias Químicas do Instituto Nacional de Engenharia e Tecnologia Industrial, Lisboa, Portugal (2003).
50. Conferência plenária “The Solvation of Free Radicals. Photoacoustic Calorimetry and Computational Studies”, na 6th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis (MEDICTA), Porto, Portugal (2003).
51. Instituto Superior Técnico, Lisboa, Portugal (2004).
52. Palestra integrada no Dia Nacional de Cultura Científica (24 de Novembro), Universidade da Madeira, Funchal, Portugal (2005).
53. Comunicação convidada, “Radical Thermochemistry. Tools, Tasks, and Trends”, no 2nd International Symposium on Calorimetry and Chemical Thermodynamics, Brasil (2006).

54. Conferência plenária “Energetics of Free Radicals: Bridges Between Gas-Phase and Solution Data”, na 19th International Conference on Chemical Thermodynamics, Boulder, Colorado, USA (2006).
55. Conferência plenária do Prémio Ferreira da Silva, “Energética de Radicais em Solução e na Fase Gasosa”, XX Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Monte da Caparica, Portugal (2006).
56. Conferência plenária “Energetics of Free Radicals”, no 11th European Symposium on Organic Reactivity, Algarve, Portugal (2007).
57. Instituto de Tecnologia Química e Biológica, Oeiras, Portugal (2008).
58. Conferência de Abertura do Ano Internacional da Química, Universidade de Évora (2011).
59. Lição de Sapiência no XXV Aniversário da Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro (2011).