

Els elements de la taula i de l'índex general de l'obra contenen enllaços a les pàgines corresponents.  
També hi ha enllaços interns en el text que remeten als apartats i a les notes.

INSTITUT D'ESTUDIS CATALANS  
SECCIÓ DE CIÈNCIES I TECNOLOGIA

# MAGNITUDS, UNITATS I SÍMBOLS EN QUÍMICA FÍSICA

UNIÓ INTERNACIONAL  
DE QUÍMICA PURA I APLICADA

Versió catalana  
(Segona edició, corregida)

BARCELONA  
2008

MAGNITUDS, UNITATS I SÍMBOLS  
EN QUÍMICA FÍSICA

Altres publicacions de l'Institut d'Estudis Catalans sobre nomenclatura recomanada per la Unió Internacional de Química Pura i Aplicada:

*Compendi de nomenclatura de química analítica: Regles definitives de 1977.* Divisió de Química Analítica, Unió Internacional de Química Pura i Aplicada. Edició a cura d'Enric Casassas i Salvador Alegret. Barcelona: Institut d'Estudis Catalans, 1987. (Monografies de la Secció de Ciències; 4) [llibre taronja]

*Nomenclatura de química orgànica: Seccions A, B i C: Regles definitives de 1979.* Divisió de Química Orgànica, Unió Internacional de Química Pura i Aplicada. Edició a cura d'Àngel Messeguer i Peypoch i Miquel A. Pericàs i Brondo. Barcelona: Consell Superior d'Investigacions Científiques i Institut d'Estudis Catalans, 1989. [llibre blau]

*Nomenclatura de química inorgànica: Recomanacions de 1990.* Unió Internacional de Química Pura i Aplicada. Versió catalana per Enric Casassas i Simó i Joaquim Sales i Cabré. Barcelona: Institut d'Estudis Catalans, 1997. [llibre vermell]

*Compendi de nomenclatura de química analítica: Regles definitives de 1997.* Unió Internacional de Química Pura i Aplicada. Edició a cura d'Enric Casassas, Elisabeth Bosch i Salvador Alegret. Barcelona: Institut d'Estudis Catalans, 2007. 3v. [llibre taronja]

INSTITUT D'ESTUDIS CATALANS  
SECCIÓ DE CIÈNCIES I TECNOLOGIA

MAGNITUDS, UNITATS I SÍMBOLS  
EN QUÍMICA FÍSICA

UNIÓ INTERNACIONAL  
DE QUÍMICA PURA I APLICADA

Versió catalana de la segona edició anglesa  
a cura de  
JOSEP M. COSTA

BARCELONA  
2008

**Magnituds**, unitats i símbols en química física. — Versió catalana de la 2a ed. anglesa  
Ed. orig.: Quantities, units and symbols in physical chemistry. 2nd ed. Oxford :  
Blackwell, 1992. — Bibliografia. Índexs  
ISBN 84-7283-733-5  
I. Costa i Torres, Josep M., trad. II. International Union of Pure and Applied Chemistry  
III. Institut d'Estudis Catalans. Secció de Ciències i Tecnologia  
1. Físicoquímica — Notació 2. Físicoquímica — Terminologia  
541.1

Els textos del present volum en llengua anglesa foren preparats per IAN MILLS, TOMISLAV CIVITAŠ, KLAUS HOMANN, NIKOLA KALLAY I KOZO KUCHITSU per a la International Union of Pure and Applied Chemistry, i foren publicats amb el títol de *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry*, en segona edició, per Blackwell, Oxford, 1993. ISBN 0-632-03583-8.

La present traducció ha estat realitzada per JOSEP M. COSTA I TORRES, catedràtic de Química Física de la Universitat de Barcelona, i membre de la Societat Catalana de Química. La present edició té l'autorització de la corresponent IUPAC National Adhering Organization.

© International Union of Pure and Applied Chemistry

© de la traducció, Institut d'Estudis Catalans

Editat per l'Institut d'Estudis Catalans

Carrer del Carme, 47. 08001 Barcelona

Primera edició: juny de 2004

Segona edició, corregida: juny de 2008

Tiratge: 600 exemplars

Text de la segona edició revisat lingüísticament pel Servei de Correcció Lingüística de l'IEC

Compost per fotocomposició gama, s. l.

Carrer d'Aristides Maillol, 9-11. 08028 Barcelona

Imprès a Limpergraf, SL

Polígon industrial Can Salvatella. Carrer de Mogoda, 29-31. Barberà del Vallès

ISBN: 978-84-7283-733-1

DOI: 10. 2436/10.2000.01.1

Aquesta obra és d'ús lliure, però està sotmesa a les condicions de la llicència pública de Creative Commons. Es pot redistribuir, copiar i reutilitzar, sempre que no hi hagi afany de lucre i que s'hi facin constar el autors. Aquesta autorització és sens perjudici dels drets derivats d'usos legítims o altres limitacions reconegudes per la llei. Es pot trobar una còpia completa dels termes d'aquesta llicència a l'adreça <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/2.5/es/legalcode.ca>.

Les condicions damunt dites es refereixen, sobretot, als aspectes següents:

- RECONeixEMENT EXPLícIT. Cal fer constar els crèdits de l'obra de la manera especificada pels autors o per l'Institut d'Estudis Catalans.
- NO COMERCIALIZACIó DE L'OBRA. Aquesta obra no es pot utilitzar, en cap cas, amb finalitats comercials.
- TERMES DE LA LLICéNCIA. En reutilitzar o redistribuir l'obra, cal especificar ben clarament els termes de la llicència d'ús concedida.
- ALTRES PERMISSOS. Els titulars dels drets d'explotació poden concedir permisos que depassin els termes d'aquesta llicència.

## EQUIP EDITORIAL

### *Traducció*

JOSEP M. COSTA I TORRES  
Universitat de Barcelona

### *Edició*

SALVADOR ALEGRET I SANROMÀ  
Institut d'Estudis Catalans

### *Correcció de l'original i confecció dels índexs*

SERGI GARCIA I MAÑES  
Oficina de Correcció i Assessorament Lingüístics de l'IEC

### *Supervisió lingüística i correcció tipogràfica*

JOSEP M. MESTRES I SERRA  
LAIA CAMPAMÀ I MORMENEO  
Oficina de Correcció i Assessorament Lingüístics de l'IEC

### *Assistència editorial*

MARTA VILARRASA I BARRERA  
LLUÍS MARQUET I FERIGLE

### *Revisió terminològica*

ROSA COLOMER I ARTIGA  
TERMCAT, Centre de Terminologia

# TAULA

PRÒLEG A L'EDICIÓ CATALANA	9
PREFACI DE LA VERSIÓ ORIGINAL	13
INTRODUCCIÓ HISTÒRICA	15
1. MAGNITUDS FÍSQUES I UNITATS	19
1.1. Magnituds físiques i càlcul de magnituds	19
1.2. Magnituds físiques de base i magnituds físiques derivades	21
1.3. Símbols de les magnituds físiques i de les unitats	22
1.4. L'ús dels mots <i>extensiu</i> , <i>intensiu</i> , <i>específic</i> i <i>molar</i>	23
1.5. Productes i quocients de magnituds físiques i d'unitats	25
2. TAULES DE MAGNITUDS FÍSQUES	27
2.1. Espai i temps	28
2.2. Mecànica clàssica	29
2.3. Electricitat i magnetisme	30
2.4. Mecànica quàntica i química quàntica	32
2.5. Àtoms i molècules	37
2.6. Espectroscòpia	40
2.7. Radiació electromagnètica	49
2.8. Estat sòlid	57
2.9. Termodinàmica estadística	61
2.10. Química general	62
2.11. Termodinàmica química	71
2.12. Cinètica química	80
2.13. Electroquímica	83
2.14. Química col·loïdal i de superfícies	90
2.15. Propietats de transport	92
3. DEFINICIONS I SÍMBOLS DE LES UNITATS	95
3.1. El sistema internacional d'unitats (SI)	95

3.2. Definicions de les unitats SI de base	95
3.3. Noms i símbols de les unitats SI de base	96
3.4. Unitats SI derivades que tenen noms i símbols especials	97
3.5. Unitats SI derivades per a altres magnituds	98
3.6. Prefixos del sistema internacional (prefixos SI)	99
3.7. Unitats que s'utilitzen conjuntament amb les de l'SI	100
3.8. Unitats atòmiques	101
3.9. Magnituds adimensionals	102
4. SÍMBOLS MATEMÀTICS RECOMANATS	107
4.1. Tipografia del nombres i dels símbols matemàtics	107
4.2. Símbols, operadors i funcions	109
5. CONSTANTS FÍSQUES FONAMENTALS	113
6. PROPIETATS DE PARTÍCULES, ELEMENTS I NÚCLIDS	117
6.1. Propietats d'algunes partícules	117
6.2. Pesos atòmics estàndard dels elements (2007)	119
6.3. Propietats dels núclids	123
7. LA CONVERSIÓ D'UNITATS	135
7.1. L'ús del càlcul de magnituds	135
7.2. Taules de conversió d'unitats (Factors de conversió de pressió, <i>segona pàgina de la guarda posterior</i> ; factors de conversió d'energia, <i>tercera pàgina de la guarda posterior</i> )	140
7.3. Els sistemes ues, uem, gaussià i d'unitats atòmiques	148
7.4. Transformació de les equacions de la teoria electromagnètica entre l'SI, la forma no racionalitzada de quatre magnituds i la forma gaussiana	155
8. ABREVIACIONS	159
9. REFERÈNCIES	171
9.1. Fonts primàries	171
9.2. Referències de la IUPAC	173
9.3. Altres referències	175
ÍNDEXS	179
Alfabet grec	180
Índex de símbols	181
Símbols especials	203
Índex de mots català-anglès	205
Índex de mots anglès-català	243
Índex general	281
Notes	285
Factors de conversió de pressió	<i>guarda posterior, segona</i>
Factors de conversió d'energia	<i>guarda posterior, tercera</i>



## PRÒLEG A L'EDICIÓ CATALANA

La Unió Internacional de Química Pura i Aplicada, més coneguda entre nosaltres per la seva sigla anglesa IUPAC, malda des de la seva fundació el 1919 per millorar, entre altres coses, la comunicació internacional de la informació científica, especialment de tot allò referent a la química. Avui, com és a bastament conegut, la ciència es difon internacionalment quasi exclusivament per mitjà de la llengua anglesa, i, per això, tota la documentació que elabora la IUPAC, per mitjà de les seves diverses comissions, també es fa en aquesta llengua.

Que la ciència es difongui internacionalment en anglès no obsta perquè els científics de comunitats nacionals amb llengües diferents de l'anglesa, quan aquestes són de forta tradició cultural, utilitzin dins de llur àmbit lingüístic la llengua que els és pròpia, tant en les seves activitats quotidianes, és clar, com en les professionals. Aquest és el cas de Catalunya i dels Països Catalans, on des de sempre els aspectes més avançats, tant de la ciència com de la tecnologia, s'han difós sense necessitat de manllevar cap altra llengua. I gosaria dir que des de Ramon Llull —que va traslladar al català part dels coneixements de la seva època per difondre'ls millor, tot deixant la nosa que el llatí començava a ser per a molts dels seus coetanis— fins avui hi ha un mateix fil conductor. Els científics i tècnics d'expressió catalana tradicionalment han assumit la responsabilitat social de transmetre els coneixements especialitzats en la llengua del seu país. Així ho veiem a les aules, als laboratoris i als tallers.

Modernament, el català dins els món de la ciència i la tècnica va de bracet de l'anglès. I hi va per una doble necessitat, tal com passa, d'altra banda, a les altres llengües europees considerades com a fortes. La pràctica totalitat dels avenços científics i tècnics entren a casa nostra acompanyats dels mitjans de comunicació especialitzats, bàsicament escrits en llengua anglesa. Els nostres professionals traslladen la informació que els és rellevant amb tota naturalitat a la seva llengua de comunicació quotidiana i, val a dir, ho fan, en general, amb un grau d'encert i

qualitat elevat. A més a més, aquests darrers anys, tots els indicadors palesen que el treball dels científics del nostre país és, com més va, més present internacionalment, tant en la literatura especialitzada com en els fòrums de discussió i difusió. Aquest coneixement generat pels científics catalans, malgrat que és expressat inicialment en la seva llengua, quan hom en fa la seva disseminació internacional el trasllada també amb tota naturalitat a l'anglès. Amb unes altres paraules, tant la transmissió com la generació de coneixements dins del nostre àmbit és feta en la llengua pròpia, i en anglès quan és tracta de comunicació internacional. Per tant, no hi ha una situació diglòssica respecte a l'anglès, sinó de complementarietat.

És, doncs, en aquest context que obres com la present, que apleguen recomanacions d'un organisme reconegut internacionalment per a millorar la difusió i bescanvi de la informació científica en el camp de la química, cal que siguin adaptades a la llengua catalana, per tal que la comunicació científica dins el nostre àmbit lingüístic tingui el mateix grau de coherència que el de la llengua de referència internacional i que la correspondència entre ambdues llengües sigui sòlidament establerta.

L'Institut d'Estudis Catalans ha estat molt sensible a l'adaptació al català de les recomanacions de nomenclatura que ha anant elaborant la IUPAC. Al frontispici d'aquest volum hi ha ressenyades les diverses versions catalanes publicades fins ara per l'IEC de les d'obres de la IUPAC, la qual cosa denota l'interès de la nostra institució per la normalització i difusió de la nomenclatura en química, en especial d'aquells aspectes en els quals, en haver-hi unes recomanacions internacionals, cal que el català hi encaixi adequadament.

Ara el lector té a les mans la versió catalana d'un llibre emblemàtic de la IUPAC: MAGNITUDS, UNITATS I SÍMBOLS EN QUÍMICA FÍSICA, obra fonamental dins el context de la metrologia que aplega unes recomanacions internacionals per als noms i el simbolisme de les magnituds i unitats físiques i fisicoquímiques més emprades en química, que ultrapassen l'àmbit estricte d'aquesta ciència i abracen els més diversos camps científics i tecnològics, recomanacions que són d'una gran utilitat també per als diferents cicles educatius.

És precisament per aquest caràcter fonamental suara esmentat que aquesta obra s'ha convertit arreu en un referent pel que fa a la nomenclatura i la simbologia de les magnituds fisicoquímiques en llengua anglesa. I és justament aquest caràcter d'obra de referència que, modestament, hem volgut atribuir també a la seva edició en llengua catalana. Amb aquesta finalitat, s'ha intentat conferir a l'obra la màxima coherència i rigorositat. Pel que fa als aspectes estrictament lingüístics, hem intentat cenyir-nos tant com hem pogut a la normativa vigent. Tanmateix, en els pocs casos on la normativa bé no es pronunciava, bé estava en contradicció amb altres obres de referència, hem intentat donar les solucions que, al nostre entendre, esdevenen més lògiques i que l'àmbit i la freqüència d'ús han fet que estiguin més arrelades en la nostra llengua. Finalment, i com a culminació d'aquest

esperit sistematitzador, s'ha canviat el format del vocabulari de l'obra original, per tal de fer-lo més útil i pràctic al lector. A més a més, s'ha introduït també el mateix índex en el format anglès-català, per tal que la cerca de termes pugui ser duta a terme en ambdues direccions.

El doctor Josep M. Costa n'ha fet la traducció, la qual ha estat duta a terme amb molta estimació, gosaria dir per la seva condició de catedràtic de Química Física, primer a la Universitat Autònoma de Barcelona i actualment a la Universitat de Barcelona, on ha pogut aportar tota l'experiència docent i investigadora de la seva llarga vida professional.

Com a membre de la Secció de Ciències i Tecnologia de l'IEC i catedràtic de Química Analítica de la Universitat Autònoma de Barcelona, he tingut el goig i la responsabilitat de preparar la publicació d'aquesta obra, on he comptat amb l'ajut de Lluís Marquet, de la Societat Catalana de Tecnologia, en alguns aspectes lexicogràfics, i sobretot de Sergi Garcia i Mañes, de l'Oficina de Correcció i Assessorament Lingüístics de l'IEC (OCAL), que també s'ha ocupat de la correcció dels originals, juntament amb Josep M. Mestres, cap de l'OCAL, i Laia Campamà, col·laboradora d'aquesta Oficina, que s'han encarregat de supervisar lingüísticament tota l'obra i, especialment, han tingut cura dels aspectes tipogràfics. El TERMCAT, Centre de Terminologia de la Generalitat de Catalunya, de la mà de Rosa Colomer, ha vetllat per la correcció terminològica, especialment pel que fa als vocabularis situats al final de l'obra.

SALVADOR ALEGRET  
Secretari general de l'IEC

INTERNATIONAL UNION OF PURE AND APPLIED CHEMISTRY  
PHYSICAL CHEMISTRY DIVISION

UNIÓ INTERNACIONAL DE QUÍMICA PURA I APLICADA  
DIVISIÓ DE QUÍMICA FÍSICA

COMISSIÓ DE SÍMBOLS I TERMINOLOGIA FISCOQUÍMICS

Segona edició de  
*Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry*  
preparada per a la publicació per

IAN MILLS  
KLAUS HOMANN  
KOZO KUCHITSU  
NIKOLA KALLAY  
TOMISLAV CVITAŠ

## PREFACI DE LA VERSIÓ ORIGINAL

L'objectiu d'aquest manual és millorar el bescanvi internacional d'informació científica. Les recomanacions per a assolir aquest objectiu estan incorporades en tres apartats generals. El primer és l'ús del càlcul de magnituds per tal de manejar les magnituds físiques i les regles generals per al simbolisme de magnituds i unitats, descrit tot això en el [capítol 1](#). El segon és l'ús de símbols convinguts internacionalment per a les magnituds d'utilització més freqüent, com es descriu en el [capítol 2](#). El tercer és l'ús de les unitats del sistema internacional (d'ara endavant, *unitats SI*), sempre que això és possible, per a l'expressió dels valors de les magnituds físiques; les unitats SI es descriuen en el [capítol 3](#).

Els capítols posteriors recullen la notació matemàtica recomanada ([capítol 4](#)), les millors estimacions actuals de les constants físiques ([capítols 5 i 6](#)), els factors de conversió entre les unitats SI i les altres unitats, amb exemples d'ús ([capítol 7](#)) i les abreviatures i sigles ([capítol 8](#)). Les referències ([p. 169](#)) es donen en el text mitjançant nombres (i lletres) entre claudàtors.

Agraïrem comentaris, crítiques i suggeriments que ens vulgueu fer arribar per a posteriors addicions a aquest llibre. Els oferiments per a col·laborar en la traducció i difusió en altres llengües s'han de fer, en primera instància, a la IUPAC o al president de la Comissió.

Volem donar les gràcies als col·legues següents, que han contribuït significativament a aquesta edició, tant per correspondència com en discussions:

R. A. Albery (Cambridge, Mass.); M. Brezlngeák (Zagreb); P. R. Bunker (Ottawa); G. W. Castellan (College Park, Md.); E. R. Cohen (Thousand Oaks, Calif.); A. Covington (Newcastle upon Tyne); H. B. F. Dixon (Cambridge); D. H. Everett (Bristol); M. B. Ewing (Londres); R. D. Freeman (Stillwater, Okl.); D. Garvin (Washington, DC); G. Gritzner (Linz); K. J. Laidler (Ottawa); J. Lee (Manchester); I. Levine (Nova York, N. Y.); D. R. Lide (Washington, DC); J. W. Lorimer (London, Ont.); R. L. Martin (Melbourne); M. L. McGlashan

(Londres); J. Michl (Austin, Tex.); K. Niki (Yokohama); M. Palmer (Edimburg); R. Parsons (Southampton); A. D. Pethybridge (Reading); P. Pyykkó (Hèlsinki); M. Quack (Zuric); J. C. Rigg (Wageningen); F. Rouquérol (Marsella); G. Schneider (Bochum); N. Sheppard (Norwich); K. S. W. Sing (Londres); G. Somsen (Amsterdam); H. Suga (Osaka); A. Thor (Estocolm); D. H. Whiffen (Stogursey).

*Comissió de Símbols, Terminologia  
i Unitats Fisicoquímiques*

Ian Mills  
Tomislav Cvitaš  
Klaus Homann  
Nikola Kallay  
Kozo Kuchitsu

## INTRODUCCIÓ HISTÒRICA

El *Manual of symbols and terminology for physicochemical quantities and units* [1.a], del qual aquest manual és successor directe, fou preparat per primera vegada per a la publicació el 1969, per encàrrec de la Divisió de Química Física de la IUPAC, per l'aleshores president de la Comissió de Símbols, Terminologia i Unitats Físicoquímiques (I.1), M. L. McGlashan. D'aquesta manera va fer una contribució substancial a l'objectiu que ell descrivia, en el prefaci d'aquella primera edició, com: «assegurar claredat i precisió, i un acord més ampli en l'ús de símbols, per part dels químics de diferents països, així com entre físics, químics i enginyers, i pels editors de revistes científiques». La segona edició del manual, preparada per a la publicació per M. A. Paul el 1973 [1.b], i la tercera edició, preparada per D. H. Whiffen el 1979 [1.c], foren revisions fetes per a tenir en compte els diversos desenvolupaments del sistema internacional d'unitats (SI), així com altres desenvolupaments de la terminologia.

La primera edició de *Quantities, units and symbols in physical Chemistry*, publicada el 1988 [2.a], fou una versió substancialment revisada i ampliada de les edicions anteriors, amb un títol més simplificat. La decisió de dur a terme aquest projecte es va prendre en l'Assemblea General de la IUPAC, a Lovaina, el 1981, quan D. R. Lide era president de la Comissió. El grup de treball fou establert en la reunió de Lyngby, el 1983, quan era president K. Kuchitsu, i el projecte ha rebut un important suport de tots els membres actuals i anteriors de la Comissió I.1 i d'altres Comissions de Química Física, particularment, de D. R. Lide, D. H. Whiffen i N. Sheppard.

Les ampliacions inclouen part del material prèviament publicat en apèndixs [1.d-1.k], totes les noves resolucions i recomanacions sobre unitats de la Conferència General de Pesos i Mesures (CGPM), i les recomanacions de la Unió Internacional de Física Pura i Aplicada (IUPAP) de 1978 i del Comitè Tècnic 12 de l'Organització Internacional de Normalització (ISO/TC 12). Les taules de mag-

nituds físiques ([capítol 2](#)) s'ampliaren per incloure les equacions de definició i les unitats SI de totes les magnituds. L'estil del manual també ha estat lleugerament canviat, i ha passat de ser un llibre de regles a ser un manual de consulta i ajut per a l'ús diari dels científics en el seu treball. Exemples d'això són la inclusió d'extenses notes a peu de pàgina i insercions aclaridores en el [capítol 2](#), i la introducció al càlcul de magnituds i les taules de factors de conversió entre les unitats SI i les que no ho són, així com la transformació d'equacions, tot això en el [capítol 7](#).

El manual, que ha comptat amb l'àmplia acceptació de la comunitat química, ha estat traduït al rus [[2.b](#)], a l'hongarès [[2.c](#)] i al japonès [[2.d](#)], i parts extenses n'han estat reproduïdes en la 7a edició i en edicions posteriors del *Handbook of Chemistry and Physics*, publicat per CRC Press, el 1990.

El present volum és una versió lleugerament revisada i un xic ampliada de l'edició anterior. Les noves revisions es basen en les resolucions recents de la CGPM [[3](#)], en les noves recomanacions de la IUPAP [[4](#)], en els nous estàndards internacionals ISO-31 [[5](#), [6](#)], en algunes recomanacions publicades per altres comissions de la IUPAC, i en nombrosos comentaris que hem rebut de químics de tot el món.

Els canvis principals afecten les seccions: [2.4](#) («Mecànica quàntica i química quàntica»), [2.7](#) («Radiació electromagnètica») i [2.12](#) («Cinètica química»), a fi d'incloure les magnituds físiques utilitzades en els camps de ràpid desenvolupament com són ara els càlculs de química quàntica, la física de làsers i la dispersió de feixos moleculars. En la present edició, s'ha afegit una nova [secció 3.9](#) sobre magnituds adimensionals, així com un índex de matèries i una llista d'abreviacions emprades en química física.

Les revisions han estat portades a terme principalment per Ian Mills i per mi mateix, amb aportacions substancials de Robert Alberty, Kozo Kuchitsu i Martin Quack, així com d'altres membres de la Comissió de Símbols, Terminologia i Unitats Fisicoquímiques de la IUPAC.

Institut Fraunhofer  
per a la Recerca  
sobre el Medi Atmosfèric  
Juny 1992

Tomislav Cvitaš  
President  
Comissió de Símbols, Terminologia  
i Unitats Fisicoquímiques



La composició de la Comissió durant el període de 1963 a 1991, en el qual es van preparar les successives edicions d'aquest manual, fou la següent:

### *Membres titulars*

*President:* 1963-1967, G. Waddington (EUA); 1967-1971, M. L. McGlashan (RU); 1971-1973, M. A. Paul (EUA); 1973-1977, D. H. Whiffen (RU); 1977-1981, D. R. Lide jr. (EUA); 1981-1985, K. Kuchitsu (Japó); 1985-1989, I. M. Mills (RU); 1989-, T. Cvitaš (Croàcia).

*Secretari:* 1963-1967, H. Brusset (França); 1967-1971, M. A. Paul (EUA); 1971-1975, M. Fayard (França); 1975-1979, K. G. Weil (Alemanya); 1979-1983, I. Ansara (França); 1983-1985, N. Kallay (Croàcia); 1985-1987, K. H. Homann (Alemanya); 1987-1989, T. Cvitaš (Croàcia); 1989-1991, I. M. Mills (RU); 1991-, M. Quack (Suïssa).

*Membres:* 1975-1983 I. Ansara (França); 1965-1969, K. V. Astachov (Rússia); 1963-1971, R. G. Bates (EUA); 1963-1967, H. Brusset (França); 1985-, T. Cvitaš (Croàcia); 1963, F. Daniels (EUA); 1981-1987, E. T. Denisov (Rússia); 1967-1975, M. Fayard (França); 1963-1965, J. I. Gerassimov (Rússia); 1979-1987, K. H. Homann (Alemanya); 1963-1971, W. Jaenicke (Alemanya); 1967-1971, F. Jellinek (Holanda); 1977-1985, N. Kallay (Croàcia); 1973-1981, V. Kellö (Txecoslovàquia); 1989-, I. V. Khudyakov (Rússia); 1985-1987, W. H. Kirchoff (EUA); 1971-1980, J. Koefoed (Dinamarca); 1979-1987, K. Kuchitsu (Japó); 1971-1981, D. R. Lide jr. (EUA); 1963-1971, M. L. McGlashan (RU); 1983-1991, I. M. Mills (RU); 1963-1967, M. Milone (Itàlia); 1967-1973, M. A. Paul (EUA); 1991-, F. Pavese (Itàlia); 1963-1967, K. J. Pedersen (Dinamarca); 1967-1975, A. Pérez Masiá (Espanya); 1987-, M. Quack (Suïssa); 1971-1979, A. Schuyff (Holanda); 1967-1970, L. G. Sillén (Suècia); 1989-, H. L. Strauss (EUA); 1963-1967, G. Waddington (EUA); 1981-1985, D. D. Wagman (EUA); 1971-1979, K. G. Weil (Alemanya); 1971-1977, D. H. Whiffen (RU); 1963-1967, E. H. Wiebenga (Holanda).

### *Membres associats*

1983-1991, R. A. Alberty (EUA); 1983-1987, I. Ansara (França); 1979-1991, E. R. Cohen (EUA); 1979-1981, E. T. Denisov (Rússia); 1987-, G. H. Findegg (Alemanya); 1987-1991, K. H. Homann (Alemanya); 1971-1973, W. Jaenicke (Alemanya); 1985-1989, N. Kallay (Croàcia); 1987-1989, I. V. Khudyakov

(Rússia); 1987-1991, K. Kuchitsu (Japó); 1981-1983, D. R. Lide jr. (EUA); 1971-1979, M. L. McGlashan (RU); 1991-, I. M. Mills (RU); 1973-1981, M. A. Paul (EUA); 1975-1983, A. Pérez Masiá (Espanya); 1979-1987, A. Schuyff (Holanda); 1963-1971, S. Seki (Japó); 1969-1977, J. Terrien (França); 1975-1979, L. Villena (Espanya); 1967-1969, G. Waddington (EUA); 1979-1983, K. G. Weil (Alemanya); 1977-1985, D. H. Whiffen (RU).

# 1. MAGNITUDS FÍSiques I UNITATS

## 1.1. MAGNITUDS FÍSiques I CÀLCUL DE MAGNITUDS

El valor d'una *magnitud física* es pot calcular com el producte d'un *valor numèric* per una *unitat*:

$$\text{magnitud física} = \text{valor numèric} \times \text{unitat}$$

Ni el nom de la magnitud física ni el símbol emprat per a designar-la han d'implicar una elecció particular d'unitat.

Les magnituds físiques, els valors numèrics i les unitats han de poder ser utilitzats d'acord amb les regles ordinàries de l'àlgebra. Així, per exemple, per a la longitud d'ona  $\lambda$  d'una de les ratlles grogues del sodi, es pot escriure

$$\lambda = 5,896 \times 10^{-7} \text{ m} = 589,6 \text{ nm} \quad (1)$$

on m és el símbol de la unitat de longitud anomenada *metre* (vegeu el [capítol 3](#)), nm és el símbol del *nanòmetre*, i la unitat m i la unitat nm estan relacionades per

$$\text{nm} = 10^{-9} \text{ m} \quad (2)$$

L'equivalència de les dues expressions de  $\lambda$  de l'equació (1) es dedueix immediatament quan les unitats es tracten d'acord amb les regles de l'àlgebra i es reconeix la identitat de nm i  $10^{-9}$  m en l'equació (2). La longitud d'ona es pot expressar igualment de la manera

$$\lambda/\text{m} = 5,896 \times 10^{-7} \quad (3)$$

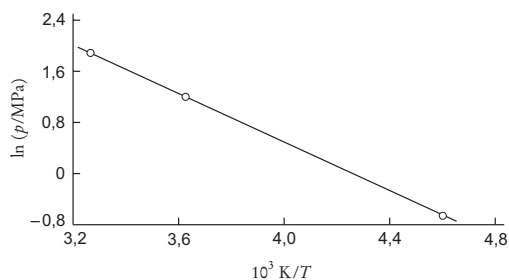
o bé

$$\lambda/\text{nm} = 589,6 \quad (4)$$

En tabular els valors numèrics de les magnituds físiques, o retolar els eixos dels gràfics, és particularment convenient usar el quocient entre una magnitud física i una unitat, de manera que els valors que es tabulin siguin nombres purs, com en les equacions (3) i (4).

*Exemples*

$T/\text{K}$	$10^3 \text{ K}/T$	$p/\text{MPa}$	$\ln(p/\text{MPa})$
216,55	4,617 9	0,518 0	-0,657 8
273,15	3,661 0	3,485 3	1,248 6
304,19	3,287 4	7,381 5	1,999 0



En comptes de  $10^3 \text{ K}/T$ , es poden emprar formes algebraicament equivalents, tals com  $\text{kK}/T$  o  $10^3(T/\text{K})^{-1}$ .

El mètode descrit aquí per a la utilització de les magnituds físiques i les seves unitats s'anomena *càlcul de magnituds*. Hom en recomana l'ús en ciència i tecnologia. La utilització del càlcul de magnituds no implica cap elecció particular d'unitats; és clar que un dels avantatges que té és que facilita el canvi d'unitats. En el [capítol 7](#), que tracta dels problemes del pas d'un sistema d'unitats a un altre, es donen altres exemples de càlcul de magnituds.

## 1.2. MAGNITUDS FÍSQUES DE BASE I MAGNITUDS FÍSQUES DERIVADES

Per conveni, les magnituds físiques s'organitzen en un sistema dimensional constituït per set *magnituds de base*, i es considera que cadascuna té la seva pròpia dimensió. Aquestes magnituds de base, i el símbols emprats per a designar-les, són les següents:

<i>Magnitud física</i>	<i>Símbol de la magnitud</i>
longitud	<i>l</i>
massa	<i>m</i>
temps	<i>t</i>
intensitat del corrent elèctric	<i>I</i>
temperatura termodinàmica	<i>T</i>
quantitat de substància	<i>n</i>
intensitat lluminosa	<i>I<sub>v</sub></i>

La resta de magnituds físiques s'anomenen *magnituds derivades* i es considera que tenen dimensions deduïdes algebraicament de les set magnituds de base per multiplicació o divisió.

### *Exemple*

dimensió de (energia) = dimensió de (massa × longitud<sup>2</sup> × temps<sup>-2</sup>)

La magnitud física *quantitat de substància* o *quantitat química* és especialment important per als químics. La quantitat de substància és proporcional al nombre d'entitats elementals especificades d'aquesta substància. El factor de proporcionalitat és el mateix per a totes les substàncies; l'invers d'aquest factor és la *constant d'Avogadro* (vegeu les seccions 2.10, p. 62, i 3.2, p. 95, i també el capítol 5). La unitat SI de quantitat de substància és el *mol*, definit més endavant, en el capítol 3. La magnitud física *quantitat de substància* no s'ha de continuar anomenant «nombre de mols», ni tampoc la magnitud física *massa* no s'ha d'anomenar «nombre de kilograms». Els noms *quantitat de substància* i *quantitat química* es poden abreujar sovint amb el mot *quantitat* tot sol, particularment en frases com «quantitat de N<sub>2</sub>» (vegeu-ne exemples a la p. 70).<sup>1</sup>

1. La Divisió de Química Mèdica de la IUPAC recomana que la *concentració en quantitat de substància* es designi abreujadament *concentració de substància*.

### 1.3. SÍMBOLS DE LES MAGNITUDS FÍSQUES I DE LES UNITATS [5.a]

Cal fer una clara distinció entre els noms i símbols de les magnituds físiques i els noms i símbols de les unitats. En el [capítol 2](#) hi ha els noms i símbols de moltes magnituds físiques; els símbols donats en aquell capítol són «recomanacions». Si empram altres símbols, cal definir-los clarament. Els noms i símbols de les unitats es donen en el [capítol 3](#); els símbols de les unitats que hi figuren són «obligats».

#### REGLES GENERALS PER ALS SÍMBOLS DE LES MAGNITUDS FÍSQUES

El símbol d'una magnitud física ha de ser, en general, una sola lletra de l'alfabet llatí o grec (vegeu la [p. 181](#)).<sup>1</sup> Hom pot usar lletres majúscules o minúscules. La lletra s'ha d'imprimir en cursiva. Si no es disposa de cursiva, hom pot recórrer a subratllar els símbols de les magnituds físiques, tal com fan de vegades els impressors. El símbol es pot modificar quan calgui mitjançant un subíndex i/o superíndex de significat específic. Els subíndexs i superíndexs que són per si mateixos símbols de magnituds físiques o de nombres s'han d'imprimir en cursiva; la resta de subíndexs i superíndexs s'han d'imprimir en rodona.

#### Exemples

	$C_p$	per a la capacitat calorífica a pressió constant
	$x_i$	per a la fracció molar de l'espècie $i$
però	$C_B$	per a la capacitat calorífica de la substància B
	$E_c$	per a l'energia cinètica <sup>#</sup>
	$\mu_r$	per a la permeabilitat relativa
	$\Delta_r H^\ominus$	per a l'entalpia de reacció estàndard
	$V_m$	per al volum molar

El significat dels símbols de les magnituds físiques es pot precisar encara més mitjançant un o dos subíndexs, o amb informació escrita entre parèntesis.

1. Es fa una excepció amb certes magnituds adimensionals emprades en l'estudi de fenòmens de transport, per a les quals els símbols convinguts internacionalment consten de dues lletres (vegeu la [secció 2.15](#)).

#### Exemple

nombre de Reynolds,  $Re$

Quan aquests símbols apareixen com a factors en un producte, cal separar-los d'altres símbols per un espai, pel signe de multiplicar o amb parèntesis.

<sup>#</sup> En català, el símbol d'energia cinètica,  $E_k$  ('kinetic energy'), es pot escriure també  $E_c$ . (N. de l'ed.)

*Exemples*

$$\Delta_r S^\circ(\text{HgCl}_2, \text{cr}, 25^\circ\text{C}) = -154,3 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$\mu_i = (\partial G / \partial n_i)_{T, p, n_{j \neq i}}$$

Els vectors i les matrius es poden imprimir en lletra negreta cursiva; per exemple:  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{a}$ . Les matrius i els tensors s'imprimeixen de vegades en lletra negreta de pal sec, per exemple:  $\mathbf{S}$ ,  $\mathbf{T}$ . Els vectors es poden caracteritzar alternativament mitjançant una sageta:  $\vec{A}$ ,  $\vec{a}$ ; i els tensors de segon rang, amb una doble sageta:  $\vec{\vec{S}}$ ,  $\vec{\vec{T}}$ .

**REGLES GENERALS PER ALS SÍMBOLS DE LES UNITATS**

Els símbols de les unitats s'han d'imprimir en rodona. Cal mantenir-los inalterats en el plural i no han d'anar seguits de punt, excepte al final d'enunciat.

*Exemple*

$$r = 10 \text{ cm}, \quad \text{no cm.} \quad \text{ni cms.}$$

El símbols de les unitats s'han d'escriure amb lletres minúscules, excepte quan provenen d'un nom personal, que han de començar amb majúscula. Una excepció és el símbol del litre, que pot ser L o l, és a dir, en majúscula o en minúscula.

*Exemples*

m (metre), s (segon), però J (joule), Hz (hertz)

Els múltiples i submúltiples decimals de les unitats es poden indicar mitjançant les formes prefixades definides més endavant, en la [secció 3.6](#).

*Exemples*

nm (nanòmetre), kHz (kilohertz), Mg (megagram)

**1.4. L'ÚS DELS MOTS *EXTENSIU*, *INTENSIU*, *ESPECÍFIC* I *MOLAR***

Una magnitud, el valor de la qual és additiu per als subsistemes, s'anomena *extensiva*; per exemple, la massa  $m$ , el volum  $V$ , l'energia de Gibbs  $G$ . Una magnitud, la quantitat de la qual és independent de l'extensió del sistema, s'anomena *intensiva*; per exemple, la temperatura  $T$ , la pressió  $p$ , el potencial químic (energia de Gibbs molar parcial)  $\mu$ .

L'adjectiu *específic* situat darrere del nom d'una magnitud extensiva indica sovint 'dividit per la massa'. Quan el símbol de la magnitud extensiva és una lletra majúscula, el símbol emprat per a la magnitud específica sovint és la lletra minúscula corresponent.

#### Exemples

volum,  $V$   
 volum específic,  $v = V/m = 1/\rho$  (on  $\rho$  és la densitat màssica)  
 capacitat calorífica a pressió constant,  $C_p$   
 capacitat calorífica específica a pressió constant,  $c_p = C_p/m$

L'ISO [5.a] recomana designar sistemàticament les magnituds físiques derivades d'altres mitjançant la divisió per la massa, el volum, l'àrea i la longitud emprant els complements nominals *màssic*, *volúmic*, *d'àrea* i *longitudinal*, respectivament. La Divisió de Química Mèdica de la IUPAC recomana, a més, usar el complement nominal *d'entitat* per a magnituds derivades mitjançant la divisió pel nombre d'entitats [8]. Així, per exemple, el volum específic s'anomena *volum màssic* i la càrrega superficial, *densitat de càrrega superficial*.

L'adjectiu *molar* darrere del nom d'una magnitud extensiva significa generalment 'dividit per la quantitat de substància'. El subíndex  $_m$  en una magnitud extensiva indica la magnitud molar corresponent.

#### Exemples

volum,  $V$       volum molar,  $V_m = V/n$  (p. 62)  
 entalpia,  $H$       entalpia molar,  $H_m = H/n$

De vegades és convenient dividir totes les magnituds extensives per la quantitat de substància, de manera que totes les magnituds passen a ser intensives; llavors es pot ometre el subíndex  $_m$  si s'explicita aquesta convenció i no hi ha perill d'ambigüitat. (Vegeu també els símbols recomanats per a les magnituds molars parcials en la [secció 2.11, p. 71](#), i els «Exemples de l'ús d'aquests símbols», [p. 76](#).)

En alguns casos l'adjectiu *molar* té un significat diferent, a saber, el de 'dividit per la concentració en quantitat de substància'.

#### Exemples

coeficient d'absorció,  $a$   
 coeficient d'absorció molar,  $\varepsilon = a/c$  (p. 51)  
 conductivitat,  $\kappa$   
 conductivitat molar,  $\Lambda = \kappa/c$  (p. 85)



## 1.5. PRODUCTES I QUOCIENTS DE MAGNITUDS FÍSQUES I D'UNITATS

Els productes de magnituds físiques es poden escriure de qualsevol de les maneres següents:

$$ab \text{ o } ab \text{ o } a \cdot b \text{ o } a \times b$$

i anàlogament, els quocients es poden escriure

$$a/b \text{ o } \frac{a}{b} \text{ o } ab^{-1}$$

*Exemples*

$$F = ma, \quad p = nRT/V$$

Cal no emprar més d'una barra obliqua (/) en una mateixa expressió, llevat que s'utilitzin parèntesis per tal d'evitar ambigüitats.

*Exemple*

$$(a/b)/c, \quad \text{però mai } a/b/c$$

Quan s'avaluen combinacions de molts factors, la multiplicació precedeix la divisió, en el sentit que  $a/bc$  s'ha d'interpretar com  $a/(bc)$  i no com  $(a/b)c$ ; malgrat tot, en les expressions complexes és convenient usar parèntesis per a evitar qualsevol ambigüitat.

Els productes i quocients d'unitats es poden escriure de manera similar, excepte que, quan en un producte d'unitats s'omet el signe de multiplicació, cal deixar un espai entre els símbols de les diferents unitats.

*Exemple*

$$N = \text{m kg s}^{-2}, \quad \text{però no } \text{mkgs}^{-2}$$



## 2. TAULES DE MAGNITUDS FÍSiques

Les taules següents contenen els noms i els símbols recomanats internacionalment per a les magnituds físiques més emprades pels químics. Podem trobar altres magnituds i símbols en les recomanacions de la IUPAC [4] i de l'ISO [5].

Encara que els autors són lliures d'adoptar qualsevol símbol que vulguin per a les magnituds que facin servir, sempre que en defineixin la notació i aquesta s'ajusti a les regles generals indicades en el [capítol 1](#), no cal dir que és molt més convenient per a la comunicació científica que tothom segueixi una notació estàndard. Els símbols que es donen més avall han estat seleccionats d'acord amb la pràctica corrent i procurant al màxim evitar conflictes. En determinades situacions es poden acceptar petits canvis dels símbols recomanats, potser afegint o modificant subíndexs o superíndexs, o ambdós, o mitjançant l'ús opcional de majúscules o minúscules. També es pot simplificar la notació dins del camp restringit d'un àmbit, ometent per exemple subíndexs o superíndexs qualificatius, sempre que això no porti a confusió. En qualsevol cas, cal definir sempre la notació adoptada. Les desviacions importants dels símbols recomanats han de ser particularment definides amb molta cura.

Les taules han estat ordenades per temes. Les cinc columnes de cada taula donen el nom de la magnitud, el símbol o símbols recomanats, una breu definició, el símbol de la unitat SI coherent (sense prefixos de múltiples o submúltiples, vegeu la [p. 99](#)) i les referències de peu de pàgina. Quan es recomanen dos o més símbols, s'escriuen separats per comes si són igualment acceptables, però es posen entre parèntesis els que no són prioritaris. Els símbols de magnituds lleugerament diferents estan separats per punt i coma. Les definicions es donen només per a identificació i no necessàriament són completes, de manera que cal considerar-les més com a relacions útils que com a definicions formals. En el cas de les magnituds adimensionals, s'ha posat un 1 en la columna de la unitat SI. En les no-

tes de peu de taula i en les insercions del text entre taules, si s'escau, hi figuren altres informacions.

## 2.1. ESPAI I TEMPS

Els noms i els símbols aconsellats aquí estan d'acord amb els recomanats per la IUPAP [4] i per l'ISO [5.b, 5.c].

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
coordenades cartesianes espacials	$x, y, z$		m	
coordenades polars esfèriques	$r; \theta; \phi$		m, 1, 1	
coordenades cilíndriques	$\rho; \theta; z$		m, 1, m	
coordenades generalitzades	$q, q_i$		(varia)	
vector de posició	$\mathbf{r}$	$\mathbf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$	m	
longitud	$l$		m	
símbols especials:				
altura, alçària	$h$			
amplada, amplària	$b$			
gruix, gruixària	$d, \delta$			
distància	$d$			
radi	$r$			
diàmetre	$d$			
recorregut	$s$			
longitud d'arc	$s$			
àrea	$A, A_s, S$		m <sup>2</sup>	1
volum	$V, (v)$		m <sup>3</sup>	
angle pla	$\alpha, \beta, \gamma, \theta, \phi \dots$	$\alpha = s/r$	rad, 1	2
angle sòlid	$\Omega, \omega$	$\Omega = A/r^2$	sr, 1	2
temps	$t$		s	
període	$T$	$T = t/N$	s	
freqüència	$\nu, f$	$\nu = 1/T$	Hz	
freqüència angular, freqüència circular	$\omega$	$\omega = 2\pi\nu$	rad s <sup>-1</sup> , s <sup>-1</sup>	2, 3
interval de temps característic, temps de relaxació, constant de temps	$\tau, T$	$\tau =  dt/d \ln x $	s	
velocitat angular	$\omega$	$\omega = d\phi/dt$	rad s <sup>-1</sup> , s <sup>-1</sup>	2, 4
velocitat	$\mathbf{v}, \mathbf{u}, \mathbf{w}, \mathbf{c}, \dot{\mathbf{r}}$	$\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$	m s <sup>-1</sup>	
rapidesa	$v, u, w, c$	$v =  \mathbf{v} $	m s <sup>-1</sup>	5
acceleració	$\mathbf{a}$	$\mathbf{a} = d\mathbf{v}/dt$	m s <sup>-2</sup>	6

- 1) Una àrea infinitesimal pot ser considerada com un vector  $dA$  perpendicular al pla. Hom pot emprar el símbol  $A_s$  quan calgui evitar confusions amb l'energia de Helmholtz,  $A$ .
- 2) Les unitats radian (rad) i estereoradian (sr) per a l'angle pla i l'angle sòlid, respectivament, són descrites com a *unitats suplementàries SI* [3]. Atès que tenen dimensió 1 (és a dir, són adimensionals),

si cal, es poden incloure en les expressions d'unitats derivades de l'SI, o bé es poden ometre en aquestes expressions si així no es perd claredat.

- 3) Per a la freqüència angular no s'ha de usar la unitat Hz.
- 4) La velocitat angular es pot tractar com a vector.
- 5) Per a les velocitats de la llum i del so s'acostuma a emprar el símbol  $c$ .
- 6) Per a l'acceleració de caiguda lliure s'usa el símbol  $g$ .

## 2.2. MECÀNICA CLÀSSICA

Els noms i els símbols aconsellats aquí estan d'acord amb els recomanats per la IUPAP [4] i per l'ISO [5.d]. Altres magnituds i símbols, emprats en acústica, es poden trobar a [4] i [5.b].

Nom	Símbol	Definició	Unitat SI	Notes
massa	$m$		kg	
massa reduïda	$\mu$	$\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$	kg	
densitat, densitat màssica	$\rho$	$\rho = m/V$	kg m <sup>-3</sup>	
densitat relativa	$d$	$d = \rho / \rho^*$	1	1
densitat superficial	$\rho_A, \rho_S$	$\rho_A = m/A$	kg m <sup>-2</sup>	
volum específic	$v$	$v = V/m = 1/\rho$	m <sup>3</sup> kg <sup>-1</sup>	
moment, quantitat de moviment	$\mathbf{p}$	$\mathbf{p} = m\mathbf{v}$	kg m s <sup>-1</sup>	
moment angular, acció	$\mathbf{L}$	$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$	J s	2
moment d'inèrcia	$I, J$	$I = \sum m_i r_i^2$	kg m <sup>2</sup>	3
força	$\mathbf{F}$	$\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt = m\mathbf{a}$	N	
parell de forces, moment d'una força	$\mathbf{T}, (\mathbf{M})$	$\mathbf{T} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}$	N m	
energia	$E$		J	
energia potencial	$E_p, V, \Phi$	$E_p = - \int \mathbf{F} \cdot d\mathbf{s}$	J	
energia cinètica <sup>#</sup>	$E_c, T, K$	$E_c = \frac{1}{2} m v^2$	J	
treball	$W, w$	$W = \int \mathbf{F} \cdot d\mathbf{s}$	J	
funció de Lagrange	$L$	$L(q, \dot{q}) = T(q, \dot{q}) - V(q)$	J	
funció de Hamilton	$H$	$H(q, p) = \sum p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q})$	J	
pressió	$p, P$	$p = F/A$	Pa, N m <sup>-2</sup>	
tensió superficial	$\gamma, \sigma$	$\gamma = dW/dA$	N m <sup>-1</sup> , J m <sup>-2</sup>	
pes	$G, (W, P)$	$G = mg$	N	
constant gravitacional	$G$	$F = Gm_1 m_2 / r^2$	N m <sup>2</sup> kg <sup>-2</sup>	
tensió normal	$\sigma$	$\sigma = F/A$	Pa	
tensió de cisallament	$\tau$	$\tau = F/A$	Pa	
deformació lineal, elongació relativa	$\varepsilon, e$	$\varepsilon = \Delta l/l$	1	

<sup>#</sup> En català, el símbol d'energia cinètica,  $E_k$  ('kinetic energy'), es pot escriure també  $E_c$ . (N. de l'ed.)

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
mòdul d'elasticitat, mòdul de Young	$E$	$E = \sigma/\varepsilon$	Pa	
deformació de cisallament	$\gamma$	$\gamma = \Delta x/d$	1	
mòdul de cisallament	$G$	$G = \tau/\gamma$	Pa	
deformació volúmica, deformació cúbica	$\theta$	$\theta = \Delta V/V_0$	1	
mòdul cúbic, mòdul de compressió	$K$	$K = -V_0(dp/dV)$	Pa	
viscositat, viscositat dinàmica	$\eta, \mu$	$\tau_{x,z} = \eta(dv_x/dz)$	Pa s	
fluïdesa	$\phi$	$\phi = 1/\eta$	$\text{m kg}^{-1} \text{s}$	
viscositat cinemàtica	$\nu$	$\nu = \eta/\rho$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	
factor de fricció	$\mu, (f)$	$F_{\text{frict}} = \mu F_{\text{norm}}$	1	
potència	$P$	$P = dW/dt$	W	
flux d'energia del so	$P, P_a$	$P = dE/dt$	W	
factores acústics				
factor de reflexió	$\rho$	$\rho = P_r/P_0$	1	4
factor d'absorció	$\alpha_a, (\alpha)$	$\alpha_a = 1 - \rho$	1	5
factor de transmissió	$\tau$	$\tau = P_{tr}/P_0$	1	4
factor de dissipació	$\delta$	$\delta = \alpha_a - \tau$	1	

1) Habitualment,  $\rho^* = \rho(\text{H}_2\text{O}, 4^\circ\text{C})$ .

2) En espectroscòpia atòmica i molecular hom acostuma a emprar altres símbols; vegeu la [secció 2.6](#).

3) En general  $I$  és una magnitud tensorial:  $I_{\alpha\alpha} = \sum m_i(\beta_i^2 + \gamma_i^2)$  i  $I_{\alpha\beta} = \sum m_i\alpha_i\beta_i$ ; si  $\alpha \neq \beta$ , on  $\alpha, \beta$  i  $\gamma$  són permutacions de  $x, y$  i  $z$ . En el cas de distribució contínua de la massa, les sumes són reemplaçades per integrals.

4)  $P_0$  és el flux d'energia del so incident,  $P_r$  el flux reflectit i  $P_{tr}$  el flux transmès.

5) Aquesta definició és especial per a l'acústica i és diferent de l'emprada en el tractament de la radiació, on el factor d'absorció correspon al factor de dissipació acústica.

## 2.3. ELECTRICITAT I MAGNETISME

Els noms i els símbols aconsellats aquí estan d'acord amb els recomanats per la IUPAP [4] i per l'ISO [5.f].

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
quantitat d'electricitat, càrrega elèctrica	$Q$		C	
densitat de càrrega	$\rho$	$\rho = Q/V$	$\text{C m}^{-3}$	
densitat de càrrega superficial	$\sigma$	$\sigma = Q/A$	$\text{C m}^{-2}$	
potencial elèctric	$V, \phi$	$V = dW/dQ$	V, J C <sup>-1</sup>	
diferència de potencial elèctric	$U, \Delta V, \Delta\phi$	$U = V_2 - V_1$	V	
força electromotriu	$E$	$E = \int (F/Q) \cdot ds$	V	

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
intensitat de camp elèctric	$E$	$E = F/Q = -\nabla V$	$\text{V m}^{-1}$	
flux elèctric	$\Psi$	$\Psi = \int \mathbf{D} \cdot d\mathbf{A}$	C	1
desplaçament elèctric	$\mathbf{D}$	$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}$	$\text{C m}^{-2}$	
capacitat	$C$	$C = Q/U$	F, $\text{C V}^{-1}$	
permitivitat	$\varepsilon$	$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}$	$\text{F m}^{-1}$	
permitivitat del buit	$\varepsilon_0$	$\varepsilon_0 = \mu_0^{-1} c_0^{-2}$	$\text{F m}^{-1}$	
permitivitat relativa	$\varepsilon_r$	$\varepsilon_r = \varepsilon / \varepsilon_0$	1	2
polarització dielèctrica (moment dipolar per volum)	$\mathbf{P}$	$\mathbf{P} = \mathbf{D} - \varepsilon_0 \mathbf{E}$	$\text{C m}^{-2}$	
susceptibilitat elèctrica	$\chi_e$	$\chi_e = \varepsilon_r - 1$	1	
1a hipersusceptibilitat	$\chi_e^{(2)}$	$\chi_e^{(2)} = \partial^2 P / \partial E^2$	$\text{C m J}^{-1}$	3
2a hipersusceptibilitat	$\chi_e^{(3)}$	$\chi_e^{(3)} = \partial^3 P / \partial E^3$	$\text{C}^2 \text{ m}^2 \text{ J}^{-2}$	3
moment dipolar elèctric	$\mathbf{p}, \boldsymbol{\mu}$	$\mathbf{p} = \sum Q_i \mathbf{r}_i$	C m	4
corrent elèctric, intensitat de corrent elèctric	$I, i$	$I = dQ/dt$	A	
densitat de corrent elèctric	$\mathbf{j}, \mathbf{J}$	$I = \int \mathbf{j} \cdot d\mathbf{A}$	$\text{A m}^{-2}$	1
inducció magnètica, densitat de flux magnètic	$\mathbf{B}$	$\mathbf{F} = Q \mathbf{v} \times \mathbf{B}$	T	5
flux magnètic	$\Phi$	$\Phi = \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{A}$	Wb	1
intensitat de camp magnètic	$\mathbf{H}$	$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$	$\text{A m}^{-1}$	
permeabilitat	$\mu$	$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$	$\text{N A}^{-2}, \text{H m}^{-1}$	
permeabilitat del buit	$\mu_0$	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{H m}^{-1}$	$\text{H m}^{-1}$	
permeabilitat relativa	$\mu_r$	$\mu_r = \mu / \mu_0$	1	
imantació (moment dipolar magnètic per volum)	$\mathbf{M}$	$\mathbf{M} = \mathbf{B} / \mu_0 - \mathbf{H}$	$\text{A m}^{-1}$	
susceptibilitat magnètica	$\chi, \kappa, (\chi_m)$	$\chi = \mu_r - 1$	1	6
susceptibilitat magnètica molar	$\chi_m$	$\chi_m = V_m \chi$	$\text{m}^3 \text{ mol}^{-1}$	
moment dipolar magnètic	$\mathbf{m}, \boldsymbol{\mu}$	$E_p = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$	$\text{A m}^2, \text{J T}^{-1}$	
resistència elèctrica	$R$	$R = U/I$	$\Omega$	7
conductància	$G$	$G = 1/R$	S	7
angle de pèrdua	$\delta$	$\delta = \phi_I - \phi_U$	1, rad	8
reactància	$X$	$X = (U/I) \sin \delta$	$\Omega$	
impedància (impedància complexa)	$Z$	$Z = R + iX$	$\Omega$	
admitància (admitància complexa)	$Y$	$Y = 1/Z$	S	
susceptància	$B$	$Y = G + iB$	S	
resistivitat	$\rho$	$\rho = E/j$	$\Omega \text{ m}$	9
conductivitat	$\kappa, \gamma, \sigma$	$\kappa = 1/\rho$	$\text{S m}^{-1}$	9
autoinductància	$L$	$E = -L(dI/dt)$	H	
inductància mútua	$M, L_{12}$	$E_1 = L_{12}(dI_2/dt)$	H	

Nom	Símbol	Definició	Unitat SI	Notes
potencial del vector magnètic	$A$	$B = \nabla \times A$	Wb m <sup>-1</sup>	
vector de Poynting	$S$	$S = E \times H$	W m <sup>-2</sup>	10

- 1)  $dA$  és un element vectorial d'àrea.
- 2) Aquesta magnitud s'anomenava abans *constant dielèctrica*.
- 3) Les hipersusceptibilitats són els coeficients dels termes no lineals del desenvolupament de la polarització  $P$  en potències del camp elèctric  $E$ :

$$P = \epsilon_0[\chi_e^{(1)}E + (1/2)\chi_e^{(2)}E^2 + (1/6)\chi_e^{(3)}E^3 + \dots]$$

on  $\chi_e^{(1)}$  és la susceptibilitat elèctrica usual  $\chi_e$  igual a  $\epsilon_r - 1$  en absència de termes superiors. En un medi anisòtrop,  $\chi_e^{(1)}$ ,  $\chi_e^{(2)}$  i  $\chi_e^{(3)}$  són tensors de rang 2, 3 i 4, respectivament. Per a un medi isòtrop (com ara un líquid) o per a un cristall amb una cel·la unitat de simetria central,  $\chi_e^{(2)}$  és zero per simetria. Aquestes magnituds caracteritzen un medi dielèctric, de la mateixa manera que les polaritzabilitats caracteritzen una molècula (vegeu la p. 38).

- 4) Quan el dipol està format per dues càrregues puntuals  $Q$  i  $-Q$  separades per una distància  $r$ , la direcció del vector es pren des de la càrrega negativa cap a la positiva. De vegades s'usa el conveni contrari, però aquesta utilització és desaconsellable. El moment dipolar d'un ió depèn de l'elecció de l'origen.
- 5) De vegades aquesta magnitud s'anomena impròpiament «camp magnètic».
- 6) El símbol  $\chi_m$  s'usa de vegades per a la susceptibilitat magnètica, però cal reservar-lo per a la susceptibilitat magnètica molar.
- 7) En un material amb reactància  $R = (U/I) \cos \delta$ , i  $G = R/(R^2 + X^2)$ .
- 8)  $\phi_I$  i  $\phi_U$  són les fases del corrent i de la diferència de potencial.
- 9) En els materials anisòtrops, aquestes magnituds són vectors.
- 10) Aquesta magnitud s'anomena també *vector de Poynting-Umov*.

## 2.4. MECÀNICA QUÀNTICA I QUÍMICA QUÀNTICA

Els noms i els símbols de les magnituds utilitzades en la mecànica quàntica aconsellats aquí concorden amb els recomanats per la IUPAP [4]. Els noms i símbols de les magnituds utilitzades principalment en el camp de la química quàntica s'han elegit d'acord amb la pràctica usual en aquest camp.

Nom	Símbol	Definició	Unitat SI	Notes
operador de quantitat de moviment	$\hat{p}$	$\hat{p} = -i\hbar\nabla$	J s m <sup>-1</sup>	1
operador d'energia cinètica	$\hat{T}$	$\hat{T} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2$	J	1
operador hamiltonià	$\hat{H}$	$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$	J	1
funció d'ona, funció d'estat	$\Psi, \psi, \phi$	$\hat{H}\psi = E\psi$	(m <sup>-3/2</sup> )	2, 3
funció d'ona hidrogenoide	$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$	$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$	(m <sup>-3/2</sup> )	3
funció harmònica esfèrica, harmònics esfèrics	$Y_{lm}(\theta, \phi)$	$Y_{lm} = N_{l m }P_l^{ m }(\cos \theta) e^{im\phi}$	1	4
densitat de probabilitat	$P$	$P = \psi^* \psi$	(m <sup>-3</sup> )	3, 5



<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
densitat de càrrega electrònica	$\rho$	$\rho = -eP$	(C m <sup>-3</sup> )	3,5,6
densitat de corrent de probabilitat, flux de probabilitat	$S$	$S = -(i\hbar/2m) \times (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$	(m <sup>-2</sup> s <sup>-1</sup> )	3
densitat de corrent elèctric [d'electrons]	$j$	$j = -eS$	(A m <sup>-2</sup> )	3,6
element d'integració	$d\tau$	$d\tau = dx dy dz$ , etc.	(varia)	
element de matriu de l'operador $\hat{A}$	$A_{ij}, \langle i A j\rangle$	$A_{ij} = \int \psi_i^* \hat{A} \psi_j d\tau$	(varia)	7
valor esperat de l'operador $\hat{A}$	$\langle A \rangle, \bar{A}$	$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau$	(varia)	7
conjugat hermitià de $\hat{A}$	$\hat{A}^\dagger$	$(\hat{A}^\dagger)_{ij} = (A_{ji})^*$	(varia)	7
commutador de $\hat{A}$ i $\hat{B}$	$[\hat{A}, \hat{B}], [\hat{A}, \hat{B}]_-$	$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$	(varia)	8
anticommutador de $\hat{A}$ i $\hat{B}$	$[\hat{A}, \hat{B}]_+$	$[\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$	(varia)	8
operadors de moment angular	(vegeu la p. 43)			
funció d'ona d'espín	$\alpha; \beta$		1	9

**Teoria d'orbitals moleculars de Hückel (HMO):**

funció de base d'orbitals atòmics	$\chi_r$		m <sup>-3/2</sup>	3
orbital molecular	$\phi_i$	$\phi_i = \sum_r \chi_r c_{ri}$	m <sup>-3/2</sup>	3, 10
integral coulombiana	$H_{rr}, \alpha$	$H_{rr} = \int \chi_r^* \hat{H} \chi_r d\tau$	J	3, 10, 11
integral de ressonància	$H_{rs}, \beta$	$H_{rs} = \int \chi_r^* \hat{H} \chi_s d\tau$	J	3, 10
paràmetre d'energia	$x$	$x = (\alpha - E)/\beta$	1	12
integral de superposició	$S_{rs}$	$S_{rs} = \int \chi_r^* \chi_s d\tau$	1	10
densitat de càrrega	$q_r$	$q_r = \sum_i^{\text{occ}} c_{ri}^2$	1	13
ordre d'enllaç	$p_{rs}$	$p_{rs} = \sum_i^{\text{occ}} c_{ri} c_{si}$	1	13

- 1) L'accent circumflex o «barret»,  $\hat{\phantom{x}}$ , s'usa per tal de distingir un operador d'una magnitud algebraica.  $\nabla$  designa l'operador nabla (vegeu la secció 4.2, p. 109).
- 2) Les lletres gregues psi majúscula i psi minúscula s'usen freqüentment per a la funció dependent del temps  $\Psi(x, t)$  i la funció d'amplitud  $\psi(x)$ , respectivament. Així, per a un estat estacionari:  $\Psi(x, t) = \psi(x) \exp(-iEt/\hbar)$ .
- 3) Per a la funció d'ona normalitzada d'una sola partícula en l'espai tridimensional, la unitat SI adient es dona entre parèntesis. Malgrat això, els resultats de la química quàntica s'expressen generalment en unitats atòmiques (vegeu la secció 3.8, p. 101; la secció 7.3, p. 148, i la referència [9]). Si les distàncies, energies, moments angulars, càrregues i masses s'expressen com a relacions adimensionals  $r/a_0, E/E_h, L/\hbar, Q/e$  i  $m/m_e$ , respectivament, totes les magnituds són adimensionals.

- 4)  $P_l^m$  indica la funció associada de Legendre de grau  $l$  i ordre  $|m|$ .  $N_{l,m}$  és una constant de normalització.
- 5)  $\psi^*$  és la complexa conjugada de  $\psi$ . Per a una funció d'ona antisimetritzada de  $n$  electrons  $\Psi(r_1, \dots, r_n)$ , la densitat de probabilitat total dels electrons és  $\int_2 \dots \int_n \Psi^* \Psi \, d\tau_2 \dots d\tau_n$ , on la integral s'estén a les coordenades de tots els electrons llevat d'un.
- 6)  $-e$  és la càrrega d'un electró.
- 7) La unitat és la mateixa que la de la magnitud física  $A$  representada per l'operador.
- 8) La unitat és la mateixa que la del producte de les magnituds físiques  $A$  i  $B$ .
- 9) Les funcions d'ona d'espín d'un sol electró,  $\alpha$  i  $\beta$ , es poden calcular mitjançant els elements de matriu del component  $z$  del moment angular d'espín  $\hat{s}_z$  per les relacions  $\langle \alpha | \hat{s}_z | \alpha \rangle = +\frac{1}{2}$ ,  $\langle \beta | \hat{s}_z | \beta \rangle = -\frac{1}{2}$ ,  $\langle \alpha | \hat{s}_z | \beta \rangle = \langle \beta | \hat{s}_z | \alpha \rangle = 0$ . Les funcions d'ona totals d'espín electrònic d'un àtom de molts electrons es designen mitjançant les lletres gregues  $\alpha, \beta, \gamma$ , etc., segons el valor de  $\Sigma m_s$ , començant pel més alt fins al més baix.
- 10)  $\hat{H}$  és un hamiltonià efectiu per a un sol electró,  $i$  i  $j$  són els índexs dels orbitals moleculars,  $i$  i  $s$  els dels orbitals atòmics. A la teoria de MO de Hückel,  $H_{rs}$  es pren com a diferent de zero tan sols per a parells d'àtoms  $r$  i  $s$  enllaçats, i tots els  $S_{rs}$  se suposen iguals a zero per a  $r \neq s$ .
- 11) Cal tenir en compte que el nom *integral coulombiana* té un significat diferent en la teoria de HMO (on es refereix a l'energia de l'orbital  $\chi_r$  en el camp del nuclis) que en la teoria de Hartree-Fock, discutida tot seguit (on es refereix a una integral de repulsió bielectrònica).
- 12) En l'aplicació més simple de la teoria de Hückel per als electrons  $\pi$  d'hidrocarburs plans conjugats, es pren la mateixa  $\alpha$  per a tots els àtoms C, i la mateixa  $\beta$  per a tots els parells d'àtoms C enllaçats; és costum escriure, doncs, el determinant secular de Hückel en funció del paràmetre adimensional  $x$ .
- 13)  $-eq_r$  és la càrrega sobre un àtom  $r$ , i  $p_{rs}$  és l'ordre d'enllaç entre els àtoms  $r$  i  $s$ . La suma s'estén a tots els espín-orbitals moleculars ocupats.

### TEORIA «AB INITIO» DEL CAMP AUTOCONSISTENT DE HARTREE-FOCK (SFC «AB INITIO»)

Els resultats de la química quàntica s'expressen freqüentment en unitats atòmiques (vegeu la p. 101 i la p. 153). En la resta de taules d'aquesta secció, totes les longituds, energies, masses, càrregues i moments angulars s'expressen com a relacions adimensionals respecte a les corresponents unitats atòmiques  $a_0$ ,  $E_h$ ,  $m_e$ ,  $e$  i  $\hbar$ , respectivament. Per tant, totes les magnituds queden convertides en adimensionals i s'elimina la columna de la unitat SI.

Nom	Símbol	Definició	Notes
orbital molecular	$\phi_i(\mu)$		14
espín-orbital molecular	$\phi_i(\mu)\alpha(\mu); \phi_i(\mu)\beta(\mu)$		14
funció d'ona total	$\Psi$	$\Psi = (N!)^{-1/2} \ \phi_i(\mu)\ $	14, 15
hamiltonià del centre (core) d'un electró	$\hat{H}_\mu^{\text{core}}$	$\hat{H}_\mu = -\frac{1}{2}\nabla_\mu^2 - \sum_A Z_A / r_{\mu A}$	14, 16

Nom	Símbol	Definició	Notes
integrals monoelectròniques: valor esperat del hamiltonià del centre (core)	$H_{ii}$	$H_{ii} = \int \phi_i^*(1) \hat{H}_1^{\text{core}} \phi_i(1) d\tau_1$	14, 16
integrals de repulsió bielectròniques: integral coulombiana	$J_{ij}$	$J_{ij} = \iint \phi_i^*(1) \phi_j^*(2) \frac{1}{r_{12}} \phi_i(1) \phi_j(2) d\tau_1 d\tau_2$	14, 17
integral de bescanvi	$K_{ij}$	$K_{ij} = \iint \phi_i^*(1) \phi_j^*(2) \frac{1}{r_{12}} \phi_i(1) \phi_j(2) d\tau_1 d\tau_2$	14, 17
energia de l'orbital monoelectrònic	$\varepsilon_i$	$\varepsilon_i = H_{ii} + \sum_j (2J_{ij} - K_{ij})$	14, 18
energia electrònica total	$E$	$E = 2 \sum_i H_{ii} + \sum_i \sum_j (2J_{ij} - K_{ij})$ $= \sum_i (\varepsilon_i + H_{ii})$	14, 18, 19
operador coulombià	$\hat{J}_i$	$\hat{J}_i \phi_j(2) = \langle \phi_i(1) \left  \frac{1}{r_{12}} \right  \phi_i(1) \rangle \phi_j(2)$	14
operador de bescanvi	$\hat{K}_i$	$\hat{K}_i \phi_j(2) = \langle \phi_i(1) \left  \frac{1}{r_{12}} \right  \phi_j(1) \rangle \phi_i(2)$	14
operador de Fock	$\hat{F}$	$\hat{F} = \hat{H}^{\text{core}} + \sum_i (2\hat{J}_i - \hat{K}_i)$	14, 20

- 14) Els subíndexs  $i, j$  indiquen els orbitals moleculars;  $\mu$  o bé els nombres  $1, 2$  indiquen les coordenades electròniques.
- 15) Les dobles barres indiquen un producte antisimmetritzat dels espín-orbitals moleculars ocupats  $\phi_i, \alpha$  i  $\phi_j, \beta$  (designats de vegades mitjançant  $\phi_i$  i  $\bar{\phi}_j$ ); per a un sistema de capa completa,  $\Psi$  seria un determinant de Slater normalitzat.  $(N!)^{-\frac{1}{2}}$  és la constant de normalització.
- 16)  $Z_A$  és el nombre de càrrega (nombre atòmic) del nucli A i  $r_{\mu A}$  és la distància entre l'electró  $\mu$  i el nucli A.  $H_{ii}$  és l'energia d'un electró a l'orbital  $\phi_i$  en el camp originat pel centre (core). Cal dir que en català no s'utilitza normalment el terme core, que aquí no escau traduir per *nucli* ja que podria portar a confusió amb el nucli atòmic, per la qual cosa s'ha d'utilitzar el terme *centre*.
- 17) Les integrals de repulsió interelectrònica s'escriuen habitualment amb la forma abreviada següent:  $J_{ij} = (ii^*|jj^*)$  i  $K_{ij} = (i^*j|ij^*)$ . S'entén convencionalment que el primer parell d'índexs dintre dels parèntesis es refereix als orbitals que impliquen l'electró 1 i els segons dos índexs, als orbitals que impliquen l'electró 2. En general, les funcions són reals i l'asterisc, \*, no s'escriu.
- 18) Aquestes relacions només s'apliquen a sistemes de capa completa i les sumes s'estenen als orbitals moleculars ocupats.
- 19) La suma sobre  $j$  inclou el terme en què  $j = i$ , per al qual  $J_{ii} = K_{ii}$ , de manera que aquest queda simplificat per a donar  $2J_{ii} - K_{ii} = J_{ii}$ .
- 20) Les equacions de Hartree-Fock són  $(\hat{F} - \varepsilon_i)\phi_i = 0$ . Cal tenir en compte que la definició de l'operador de Fock inclou totes les seves funcions pròpies  $\phi_i$  a través dels operadors coulombià i de bescanvi,  $\hat{J}_i$  i  $\hat{K}_i$ .

TEORIA SCF DE HARTREE-FOCK-ROOTHAAN, BASADA EN ORBITALS MOLECULARS DESENVOLUPATS COM A COMBINACIONS LINEALS DE FUNCIONS DE BASE D'ORBITALS ATÒMICS (TEORIA CLOA-OM O LCAO-MO)

Nom	Símbol	Definició	Notes
funció de base d'orbitals atòmics	$\chi_r$		21
orbital molecular	$\phi_i$	$\phi_i = \sum_r \chi_r c_{ri}$	
element de la matriu de superposició	$S_{rs}$	$S_{rs} = \int \chi_r^* \chi_s d\tau, \sum_{r,s} c_{ri}^* S_{rs} c_{sj} = \delta_{ij}$	
element de la matriu de densitat	$P_{rs}$	$P_{rs} = 2 \sum_i^{\text{occ}} c_{ri} c_{si}^*$	22
integrals sobre les funcions de base:			
— integrals monoelectròniques	$H_{rs}$	$H_{rs} = \int \chi_r^*(1) \hat{H}_1^{\text{core}} \chi_s(1) d\tau_1$	
— integrals bielectròniques	$(rs tu)$	$(rs tu) = \iint \chi_r(1) \chi_s(1) \frac{1}{r_{12}} \chi_t(2) \chi_u(2) d\tau_1 d\tau_2$	23, 24
energia electrònica total	$E$	$E = \sum_r \sum_s P_{rs} H_{rs} + \frac{1}{2} \sum_r \sum_s \sum_t \sum_u P_{rs} P_{tu} [(rs tu) - \frac{1}{2}(rt su)]$	24
element de matriu de l'operador de Fock	$F_{rs}$	$F_{rs} = H_{rs} + \sum_t \sum_u P_{tu} [(rs tu) - \frac{1}{2}(rt su)]$	25

- 21) Els subíndexs  $r, i$ , indiquen les funcions de base. En els càlculs numèrics, aquestes funcions es prenen com a orbitals de Slater (STO) o com a orbitals de tipus gaussià (GTO). Una funció de base STO en coordenades polars esfèriques té la forma general  $\chi(r, \theta, \phi) = N r^{n-1} \exp(-\zeta_{nl} r) Y_{lm}(\theta, \phi)$ , on  $\zeta_{nl}$  és un paràmetre d'apantallament que representa la càrrega efectiva en l'estat de nombres quàntics  $n$  i  $l$ . Les funcions GTO s'expressen generalment en coordenades cartesianes, de la forma  $\chi(x, y, z) = N x^a y^b z^c \exp(-\alpha r^2)$ . En molts casos s'usa una combinació lineal de dues o tres d'aquestes funcions amb exponents  $\alpha$  variables, de tal manera que es forma un STO.  $N$  és una constant de normalització.
- 22) La suma s'estén a tots els orbitals moleculars ocupats.
- 23) La notació abreujada per a les integrals bielectròniques de les funcions de base,  $(rs|tu)$ , es basa en el mateix conveni indicat en la nota 17.
- 24) Aquí les magnituds s'expressen en funció d'integrals de les funcions de base. Els elements de matriu  $H_{ii}$ ,  $J_{ij}$  i  $K_{ij}$  es poden expressar d'una manera semblant, en funció d'integrals de les funcions de base, segons les equacions següents:

$$H_{ii} = \sum_r \sum_s c_{ri}^* c_{si} H_{rs} \quad J_{ij} = \sum_r \sum_s \sum_t \sum_u c_{ri}^* c_{sj}^* c_{ti} c_{uj} (rt|tu) \quad K_{ij} = \sum_r \sum_s \sum_t \sum_u c_{ri}^* c_{sj}^* c_{ti} c_{uj} (rs|tu)$$

- 25) Les equacions SCF de Hartree-Fock-Roothaan, expressades en funció dels elements de matriu de l'operador de Fock  $F_{rs}$  i dels elements de matriu de superposició  $S_{rs}$ , presenten la forma

$$\sum_s (F_{rs} - \epsilon_i S_{rs}) c_{si} = 0$$

## 2.5. ÀTOMS I MOLÈCULES

Els noms i els símbols aquí recomanats concorden amb els recomanats per la IUPAP [4] i l'ISO [5.j]. Altres magnituds i símbols emprats en la física atòmica, nuclear i de plasma es poden trobar a [4 i 5.k].

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
nombre de nucleons, nombre màssic	$A$		1	
nombre de protons, nombre atòmic	$Z$		1	
nombre de neutrons	$N$	$N = A - Z$	1	
massa de l'electró en repòs	$m_e$		kg	1, 2
massa de l'àtom, massa atòmica	$m_a, m$		kg	
constant de massa atòmica	$m_u$	$m_u = m_a(^{12}\text{C})/12$	kg	1, 3
excés de massa	$\Delta$	$\Delta = m_a - A m_u$	kg	
càrrega elemental, càrrega del protó	$e$		C	2
constant de Planck	$h$		J s	
constant de Planck/ $2\pi$	$\hbar$	$\hbar = h/2\pi$	J s	2
radi de Bohr	$a_0$	$a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2$	m	2
energia de Hartree	$E_h$	$E_h = \hbar^2/m_e a_0^2$	J	2
constant de Rydberg	$R_\infty$	$R_\infty = E_h/2hc$	$\text{m}^{-1}$	
constant d'estructura fina	$\alpha$	$\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$	1	
energia d'ionització	$E_i$		J	
afinitat electrònica	$E_{\text{ea}}$		J	
electronegativitat	$\chi$	$\chi = \frac{1}{2}(E_i + E_{\text{ea}})$	J	4
energia de dissociació	$E_{\text{d}}, D$		J	
— des de l'estat fonamental	$D_0$		J	5
— des del mínim de potencial	$D_e$		J	5
nombre quàntic principal (àtom de H)	$n$	$E = -hcR/n^2$	1	
nombres quàntics de moment angular		(vegeu «Espectroscòpia», secció 2.6)		
moment dipolar magnètic d'una molècula	$\mathbf{m}, \boldsymbol{\mu}$	$E_{\text{p}} = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$	$\text{J T}^{-1}$	6
magnetitzabilitat d'una molècula	$\xi$	$\mathbf{m} = \xi \mathbf{B}$	$\text{J T}^{-2}$	
magnetó de Bohr	$\mu_{\text{B}}$	$\mu_{\text{B}} = e\hbar/2m_e$	$\text{J T}^{-1}$	
magnetó nuclear	$\mu_{\text{N}}$	$\mu_{\text{N}} = (m_e/m_{\text{p}})\mu_{\text{B}}$	$\text{J T}^{-1}$	
raó magnetogràfica (raó giromagnètica)	$\gamma$	$\gamma = \mu/L$	$\text{s}^{-1} \text{T}^{-1}$	7
factor $g$	$g$	$g = 2\mu/\mu_{\text{B}}$	1	

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
factor <i>g</i> nuclear	$g_N$	$g_N = \mu / I\mu_N$	1	
freqüència angular de Larmor	$\omega_L$	$\omega_L = (e/2m)B$	s <sup>-1</sup>	8
freqüència de Larmor	$\nu_L$	$\nu_L = \omega_L/2\pi$	Hz	
temps de relaxació				
— longitudinal	$T_1$		s	9
— transversal	$T_2$		s	9
moment dipolar elèctric d'una molècula	$\mathbf{p}, \boldsymbol{\mu}$	$E_p = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}$	C m	10
moment quadrupolar d'una molècula	$Q; \boldsymbol{\Theta}$	$E_p = \frac{1}{2} Q : V'' = \frac{1}{3} \boldsymbol{\Theta} : V''$	C m <sup>2</sup>	11
moment quadrupolar d'un nucli	$eQ$	$eQ = 2\langle \Theta_{zz} \rangle$	C m <sup>2</sup>	12
tensor gradient de camp elèctric	$\mathbf{q}$	$q_{\alpha\beta} = -\partial^2 V / \partial\alpha\partial\beta$	V m <sup>-2</sup>	
tensor d'energia d'interacció quadrupolar	$\chi$	$\chi_{\alpha\beta} = eQq_{\alpha\beta}$	J	13
polaritzabilitat elèctrica d'una molècula	$\boldsymbol{\alpha}$	$\alpha_{ab} = \partial p_a / \partial E_b$	C <sup>2</sup> m <sup>2</sup> J <sup>-1</sup>	14
1a hiperpolaritzabilitat	$\boldsymbol{\beta}$	$\beta_{abc} = \partial^2 p_a / \partial E_b \partial E_c$	C <sup>3</sup> m <sup>3</sup> J <sup>-2</sup>	14
2a hiperpolaritzabilitat	$\boldsymbol{\gamma}$	$\gamma_{abcd} = \partial^3 p_a / \partial E_b \partial E_c \partial E_d$	C <sup>4</sup> m <sup>4</sup> J <sup>-3</sup>	14
activitat (d'una substància radioactiva)	$A$	$A = -dN_B/dt$	Bq	15
constant [de velocitat] de decaïment, constant [de velocitat] de desintegració	$\lambda, k$	$A = \lambda N_B$	s <sup>-1</sup>	15
període de semidesintegració	$t_{\frac{1}{2}}, T_{\frac{1}{2}}$	$N_B(t_{\frac{1}{2}}) = N_B(0)/2$	s	15, 16
vida mitjana	$\tau$	$\tau = 1/\lambda$	s	16
amplària de nivell	$\Gamma$	$\Gamma = \hbar/\tau$	J	
energia de desintegració	$Q$		J	
secció eficaç [d'una reacció nuclear]	$\sigma$		m <sup>2</sup>	

- 1) Per a altres partícules s'usen símbols anàlegs amb els subíndexs <sub>p</sub> per al protó, <sub>n</sub> per al neutró, <sub>a</sub> per a l'àtom, <sub>N</sub> per al nucli, etc.
- 2) Aquesta magnitud també s'usa com a unitat atòmica; vegeu les seccions 3.8 i 7.3.
- 3)  $m_u$  és igual a la unitat de massa atòmica unificada, de símbol u, és a dir,  $m_u = 1$  u (vegeu la [secció 3.7](#)). En bioquímica s'usa el nom de *dalton*, amb el símbol Da, per a la unitat de massa atòmica unificada, encara que aquest nom i el símbol corresponent no han estat acceptats per la CGPM.
- 4) El concepte d'electronegativitat fou introduït per L. Pauling com la «capacitat d'un àtom en una molècula per a atreure electrons». Hi ha diverses maneres de definir aquesta magnitud [49]. La que figura en la taula, proposada per R. S. Mulliken, té un clar sentit físic d'energia. L'escala emprada més sovint, deguda a Pauling, està basada en les energies de dissociació de l'enllaç en eV i és una escala

relativa, en el sentit que conté els valors adimensionals i que defineix només diferències d'electronegativitat. Per als àtoms A i B:

$$\chi_{r,A} - \chi_{r,B} = (\text{eV})^{-1/2} \sqrt{E_d(\text{AB}) - [E_d(\text{AA}) + E_d(\text{BB})]}$$

on  $\chi_r$  indica l'electronegativitat relativa de Pauling. Hom defineix l'escala de manera que l'electronegativitat relativa de l'hidrogen sigui  $\chi_{r,H} = 2,1$ . No és fàcil decidir el signe de l'arrel quadrada, que determina el signe de  $\chi_{r,A} - \chi_{r,B}$ . Pauling ho va fer intuïtivament.

- 5) Els símbols  $D_0$  i  $D_e$  s'usen principalment per a les energies de dissociació diatòmiques.
- 6) Els moments magnètics de partícules específiques s'indiquen mitjançant un subíndex, per exemple,  $\mu_e, \mu_p, \mu_n$  per a un electró, un protó i un neutró, respectivament. Els valors tabulats corresponen generalment al valor de màxima esperança del component z. En la [taula 6.3](#) es donen valors per a nuclis estables.
- 7)  $\mu$  és el moment magnètic;  $L$ , el moment angular.
- 8) Aquesta magnitud s'anomena comunament *frequència circular de Larmor*.
- 9) Aquestes magnituds són emprades en el context dels efectes de saturació en espectroscòpia, particularment en l'espectroscòpia de ressonància d'espín (vegeu la [p. 42](#)).
- 10) Vegeu la nota 7 de la [p. 42](#).
- 11) El moment quadrupolar d'una molècula es pot representar alternativament pel tensor  $Q$ , definit mitjançant una integral de la densitat de càrrega  $\rho$ :

$$Q_{\alpha\beta} = \int r_\alpha r_\beta \rho \, dV$$

on  $\alpha$  i  $\beta$  indiquen  $x, y$  o  $z$ , o bé per un tensor sense traça  $\Theta$ , definit mitjançant

$$\begin{aligned} \Theta_{\alpha\beta} &= (1/2) \int (3r_\alpha r_\beta - \delta_{\alpha\beta} r^2) \rho \, dV \\ &= (1/2) [3Q_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta} (Q_{xx} + Q_{yy} + Q_{zz})] \end{aligned}$$

$V''$  és la derivada segona del potencial elèctric:

$$V''_{\alpha\beta} = -q_{\alpha\beta} = \partial^2 V / \partial \alpha \partial \beta$$

- 12) Els moments quadrupolars nuclears es defineixen convencionalment de manera diferent de la dels moments quadrupolars moleculars.  $Q$  és una àrea i  $e$  és la càrrega elemental;  $eQ$  es pren com el valor de màxima esperança de l'element  $zz$  del tensor. En la [taula 6.3](#) es donen els valors de  $Q$  per a alguns nuclis.
- 13) El tensor d'energia d'interacció quadrupolar nuclear  $\chi$  s'expressa normalment en MHz, que és la unitat corresponent a  $eQq/h$ , si bé generalment s'omet la  $h$ .
- 14) La polaritzabilitat  $\alpha$  i les hiperpolaritzabilitats  $\beta, \gamma, \dots$ , són els coeficients del desenvolupament del moment dipolar  $p$  en potències del camp elèctric  $E$ , d'acord amb l'equació:

$$p = p^{(0)} + \alpha E + (1/2)\beta E^2 + (1/6)\gamma E^3 + \dots$$

on  $\alpha, \beta$  i  $\gamma$  són tensors de rang 2, 3 i 4, respectivament. Els components d'aquests tensors es distingeixen mitjançant els subíndexs  $a, b, c, \dots$ , tal com s'indica a les definicions; el primer subíndex  $a$  sempre designa el component de  $p$  i els subíndexs posteriors, els components del camp elèctric. La polaritzabilitat i les hiperpolaritzabilitats presenten propietats de simetria. Així,  $\alpha$  és generalment un tensor simètric, tots els components de  $\beta$  són zero per a una molècula amb centre de simetria, etc. Els valors de les polaritzabilitats s'expressen freqüentment en unitats atòmiques (vegeu les [p. 101-102](#)), en la forma  $\alpha / 4\pi\epsilon_0$  en unitats de  $a_0^3$ ,  $\beta / (4\pi\epsilon_0)^2$  en unitats de  $a_0^5 e^{-1}$ ,  $\gamma / (4\pi\epsilon_0)^3$  en unitats de  $a_0^7 e^{-2}$ , etc.

- 15)  $N_B$  és el nombre d'àtoms radioactius B.
- 16) Els períodes de semidesintegració i les vides mitjanes sovint es donen en anys (a); vegeu la [p. 142](#).  
 $t_{1/2} = \tau \ln 2$  per a les desintegracions exponencials.

## 2.6. ESPECTROSCÒPIA

Aquesta secció s'ha ampliat considerablement respecte a les primeres edicions del manual [1.a-1.c] i a la secció corresponent del document de la IUPAP [4]. Està basada en les recomanacions de la Comissió Conjunta d'Espectroscòpia de l'ICSU [50, 51] i en la pràctica habitual en aquest camp, que està ben representada en els llibres de Herzberg [52]. La Comissió d'Estructura Molecular i Espectroscòpia de la IUPAC ha publicat diverses recomanacions que també s'han tingut en compte [10-16].

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
terme total	$T$	$T = E_{\text{rot}}/hc$	$\text{m}^{-1}$	1, 2
nombre d'ona de la transició	$\tilde{\nu}, (\nu)$	$\tilde{\nu} = T' - T''$	$\text{m}^{-1}$	1
freqüència de la transició	$\nu$	$\nu = (E' - E'')/h$	Hz	
terme electrònic	$T_e$	$T_e = E_e/hc$	$\text{m}^{-1}$	1, 2
terme vibracional <sup>#</sup>	$G$	$G = E_{\text{vibr}}/hc$	$\text{m}^{-1}$	1, 2
terme rotacional	$F$	$F = E_{\text{rot}}/hc$	$\text{m}^{-1}$	1, 2
constant d'acoblament espín-òrbita <sup>##</sup>	$A$	$T_{e-\dot{o}} = A(\hat{L} \cdot \hat{S})$	$\text{m}^{-1}$	1
moments d'inèrcia principals	$I_A; I_B; I_C$	$I_A \leq I_B \leq I_C$	$\text{kg m}^2$	
constants rotacionals				
— en nombre d'ona	$\tilde{A}; \tilde{B}; \tilde{C}$	$\tilde{A} = h/8\pi^2 c I_A$	$\text{m}^{-1}$	1, 2
— en freqüència	$A; B; C$	$A = h/8\pi^2 I_A$	Hz	
defecte inercial	$\Delta$	$\Delta = I_C - I_A - I_B$	$\text{kg m}^2$	
paràmetre d'asimetria	$\kappa$	$\kappa = \frac{2B - A - C}{A - C}$	1	3
constants de distorsió centrífuga,				
reducció S	$D_J; D_{JK}; D_K; d_1; d_2$		$\text{m}^{-1}$	4
reducció A	$\Delta_J; \Delta_{JK}; \Delta_K; \delta_J; \delta_K$		$\text{m}^{-1}$	4
nombre d'ona de vibració harmònica	$\omega_e; \omega_r$		$\text{m}^{-1}$	5
constant d'anharmonicitat vibracional	$\omega_e x_e; x_{rs}; g_{tt'}$		$\text{m}^{-1}$	5
nombres quàntics vibracionals	$v_r; l_r$		1	5
constant zeta de Coriolis	$\zeta_{rs}^a$		1	
nombres quàntics de moment angular		(vegeu-ne informació addicional més endavant)		

<sup>#</sup> En la definició de terme vibracional de la versió anglesa,  $E_{\text{vibr}}$  es representa  $E_{\text{vib}}$  (*vibrational*). (Nota de l'ed.)

<sup>##</sup> En la definició de la constant d'acoblament espín-òrbita de la versió anglesa,  $T_{e-\dot{o}}$  es representa  $T_{s.o.}$  (s.o. *'spin-orbit'*). (Nota de l'ed.)



<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
degeneració, pes estadístic	$g, d, \beta$		1	6
moment dipolar elèctric (d'una molècula)	$\mathbf{p}, \boldsymbol{\mu}$	$E_p = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}$	C m	7
moment dipolar de transició (d'una molècula)	$\mathbf{M}, \mathbf{R}$	$\mathbf{M} = \int \psi' \cdot \mathbf{p} \psi'' d\tau$	C m	7, 8
distàncies interatòmiques:				
distància d'equilibri	$r_e$		m	
distància mitjana en el punt zero	$r_z$		m	
distància en l'estat fonamental	$r_0$		m	
distància d'estructura de substitució	$r_s$		m	
coordenades de vibració:				9
coordenades internes	$R_i, r_i, \theta_j$ , etc.		(varia)	
coordenades de simetria	$S_i$		(varia)	
coordenades normals				
— ponderades de massa	$Q_r$		$\text{kg}^{1/2}\text{m}$	
— adimensionals	$q_r$		1	
constants de força vibracionals:				
constants diatòmiques	$f, (k)$	$f = \partial^2 V / \partial r^2$	$\text{J m}^{-2}$	11
constants poliatòmiques				
coordenades internes	$f_{ij}$	$f_{ij} = \partial^2 V / \partial r_i \partial r_j$	(varia)	
coordenades de simetria	$F_{ij}$	$F_{ij} = \partial^2 V / \partial S_i \partial S_j$	(varia)	
coordenades normals adimensionals	$\phi_{rst\dots}, k_{rst\dots}$		$\text{m}^{-1}$	12

**Ressonància magnètica nuclear** (RMN o bé NMR):

raó magnetogírica	$\gamma$	$\gamma = \mu / I\hbar$	$\text{s}^{-1}\text{T}^{-1}$	
constant de blindatge	$\sigma$	$B_A = (1 - \sigma_A)B$	1	13
desplaçament químic, escala $\delta$	$\delta$	$\delta = 10^6(\nu - \nu_0) / \nu_0$	1	14
constant d'acoblament				
— espín-espín [indirecte]	$J_{AB}$	$\hat{H} / \hbar = J_{AB} \hat{\mathbf{I}}_A \cdot \hat{\mathbf{I}}_B$	Hz	15
— espín-espín reduït	$K_{AB}$	$K_{AB} = \frac{J_{AB}}{\hbar} \frac{2\pi}{\gamma_A} \frac{2\pi}{\gamma_B}$	$\text{T}^2 \text{J}^{-1}, \text{NA}^{-2}\text{m}^{-3}$	16
— [dipolar] directe	$D_{AB}$		Hz	17
temps de relaxació				
— longitudinal	$T_1$		s	18
— transversal	$T_2$		s	18

Nom	Símbol	Definició	Unitat SI	Notes
<b>Ressonància d'espín electrònic (ESR), ressonància paramagnètica electrònica (EPR):</b>				
raó magnetogírica	$\gamma$	$\gamma = \mu / s\hbar$	$\text{s}^{-1} \text{T}^{-1}$	
factor $g$	$g$	$h\nu = g\mu_{\text{B}}B$	1	
constant d'acoblament hiperfí				
— en líquids	$a, A$	$\tilde{H}_{\text{hfs}}/h = a\hat{S} \cdot \hat{I}$	Hz	19
— en sòlids	$T$	$\tilde{H}_{\text{hfs}}/h = \hat{S} \cdot T \cdot \hat{I}$	Hz	19

- 1) En espectroscòpia, el nombre d'ona s'expressa quasi sempre amb la unitat  $\text{cm}^{-1}$ , i els valors i els nombres d'ona dels termes sempre es refereixen a l'invers de la longitud d'ona de la radiació equivalent al buit. El símbol  $c$  en la definició  $E/hc$  es refereix a la velocitat de la llum en el buit.
- 2) Els valors dels termes i les constants rotacionals es defineixen de vegades en unitats de nombre d'ona (per exemple,  $T = E/hc$ ) i de vegades en unitats de freqüència (per exemple,  $T = E/h$ ). Quan el símbol és el mateix en els dos casos, cal identificar les magnituds expressades en nombre d'ona amb una titlla (per exemple,  $\tilde{\nu}, \tilde{T}, \tilde{A}, \tilde{B}, \tilde{C}$ , per a les magnituds expressades en unitats de nombre d'ona), encara que aquesta no és la pràctica general.
- 3) També s'usen els paràmetres d'asimetria de Wang:  $b_p = (C - B)/(2A - B - C)$ , per a un rotor quasi-simètric allargat, i  $b_o = (A - B)/(2C - A - B)$ , per a un rotor quasimètric aplanat.
- 4) Si  $A$  representen les reduccions simètrica i asimètrica del hamiltonià rotacional, respectivament; vegeu [53] per a més detalls sobre les diverses representacions possibles de les constants de distorsió centrífuga.
- 5) Per a una molècula diatòmica:  $G(v) = \omega_e(v + \frac{1}{2}) - \omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 + \dots$ . Per a una molècula poliatòmica, els  $3N - 6$  modes vibracionals ( $3N - 5$  si és lineal) s'indiquen amb els subíndexs  $r, s, t, \dots$ , o  $i, j, k, \dots$ . El subíndex  $r$  s'assigna usualment en ordre decreixent de nombre d'ona, per a cada espècie de simetria. El subíndex  $t$  es reserva per a modes degenerats. La fórmula del terme vibracional és:

$$G(v) = \sum_r \omega_r(v_r + d_r/2) + \sum_{r \leq s} x_{rs}(v_r + d_r/2)(v_s + d_s/2) + \sum_{t \leq l} g_{ul}l_t l_l + \dots$$

- 6)  $d$  s'utilitza generalment per a la degeneració vibracional i  $\beta$  per a la degeneració d'espín nuclear.
- 7) Els moments dipolars moleculars s'expressen freqüentment amb la unitat debye (D), que no és unitat SI, on  $1 \text{ D} \approx 3,335\,64 \times 10^{-30} \text{ C m}$ . La unitat SI  $\text{C m}$  no és convenient per a expressar moments dipolars moleculars, per la qual cosa es continua emprant el debye (D), malgrat que sigui objectable. Una alternativa adient és utilitzar la unitat atòmica  $ea_0$ . Una altra manera d'expressar moments dipolars consisteix a donar les longituds del dipol elèctric,  $l_p = p/e$ , tal com es donen les àrees del quadrupol nuclear (vegeu la p. 38 i la p. 124). Així es dona la distància entre dues càrregues elementals del dipol equivalent i transmet una imatge clara de les dimensions moleculars.

#### Exemples

	Moment dipolar			Longitud del dipol
	SI $p/\text{C m}$	$p/\text{D}$	u. a. $p/ea_0$	$l_p/p\text{m}$
HCl	$3,60 \times 10^{-30}$	1,08	0,425	22,5
H <sub>2</sub> O	$6,23 \times 10^{-30}$	1,87	0,736	38,9
NaCl	$4,02 \times 10^{-29}$	12,1	4,74	251

Vegeu també la nota 4 de la p. 32.

- 8) Per a les magnituds que descriuen les intensitats de ratlla i de banda, vegeu la secció 2.7, p. 54-57.
- 9) Les distàncies interatòmiques (internuclears) i els desplaçaments vibracionals s'expressen sovint en la unitat *angstrom* (Å), que no és unitat SI,  $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m} = 0,1 \text{ nm} = 100 \text{ pm}$ .
- 10) Les diverses maneres lleugerament diferents de representar distàncies interatòmiques, distingides mitjançant subíndexs, impliquen diferents contribucions a la mitjana vibracional; es discuteixen a [54], on s'enumeren les estructures geomètriques de moltes molècules lliures. Tan sols la distància d'equilibri  $r_e$  és isotòpicament invariant. El paràmetre de distància efectiva  $r_0$  s'estima a partir de les constants rotacionals de l'estat fonamental de vibració i té un significat físic aproximat tan sols en el cas de molècules poliàtomiques.
- 11) Les constants de força s'expressen sovint en  $\text{mdyn Å}^{-1} = \text{aJ Å}^{-2}$  per a les coordenades de tensió,  $\text{mdyn Å} = \text{aJ}$  per a les coordenades de flexió i  $\text{mdyn} = \text{aJ Å}^{-1}$  per a les interaccions tensió-flexió. Pel que fa a detalls sobre definicions i notacions de constants de força, vegeu [17].
- 12) Les constants de força en coordenades normals adimensionals es defineixen normalment en unitats de nombre d'ona mitjançant l'equació  $V/hc = \sum \phi_{rst\dots} q_r q_s q_t \dots$ , on el sumatori que s'estén als índexs de les coordenades normals  $r, s, t, \dots$ , no està subjecte a restriccions.
- 13)  $\sigma_A$  i  $B_A$  indiquen la constant de blindatge i el camp magnètic local al nucli A.
- 14)  $\nu_0$  és la freqüència de ressonància d'una molècula de referència, habitualment el tetrametilsilà per als espectres de ressonància del protó i del  $^{13}\text{C}$  [12]. En la literatura antiga els desplaçaments químics del protó s'expressen sovint en l'escala  $\tau$ , on  $\tau = 10 - \delta$ , però aquesta escala ja no s'usa.
- 15) El símbol  $\hat{H}$  de la definició és el hamiltonià d'acoblament espín-espín entre els nuclis A i B.
- 16) La constant d'acoblament reduïda  $K_{AB}$  representa només la contribució electrònica; per tant, és aproximadament independent dels isòtops i pot presentar efectes químics, mentre que  $J_{AB}$  també inclou les raons magnetogiriques nuclears.
- 17) L'acoblament dipolar directe es presenta en els sòlids; la definició de la constant d'acoblament és  $D_{AB} = (\mu_0/4\pi)r_{AB}^{-3}\gamma_A\gamma_B(\hbar/2\pi)$
- 18) El temps de relaxació longitudinal està lligat amb la relaxació espín-xarxa i el temps de relaxació transversal, amb la relaxació espín-espín. Les definicions són:
- $$i \quad \frac{dM_z}{dt} = -(M_z - M_{z,e})/T_1$$
- $$\frac{dM_x}{dt} = -M_x/T_2$$
- on  $M_z$  i  $M_x$  són els components de la magnetització paral·lel i perpendicular al camp estàtic  $B$ , i  $M_{z,e}$  és el valor d'equilibri de  $M_z$ .
- 19)  $\hat{H}_{\text{hfs}}$  és el hamiltonià d'acoblament hiperfí. Generalment, les constants d'acoblament  $a$  són expressades en MHz, però de vegades ho són en unitats d'inducció magnètica (G o T) obtingudes dividint pel factor de conversió  $g\mu_B/h$ , que té la unitat SI Hz/T;  $g_e\mu_B/h \approx 28,025 \text{ GHz T}^{-1}$  ( $= 2,8025 \text{ MHz G}^{-1}$ ), on  $g_e$  és el factor  $g$  d'un electró lliure. Si en els líquids l'acoblament hiperfí és isotròpic, la constant d'acoblament és un escalar  $a$ . En els sòlids l'acoblament és anisotròpic i la constant d'acoblament és un tensor  $T \ 3 \times 3$ . S'apliquen comentaris semblants al factor  $g$ .

## SÍMBOLS DELS OPERADORS DE MOMENT ANGULAR I DELS NOMBRES QUÀNTICS

En la [taula següent](#) tots els signes d'operadors designen la relació adimensional (*moment angular*)/ $\hbar$ . (Per bé que aquesta és una pràctica universal per als nombres quàntics, alguns autors usen els símbols d'operadors per a designar el *mo-*

*ment angular*, cas en el qual els operadors tindrien les unitats SI: J s.) La capçalera de la columna «Eix Z» designa el component fix a l'espai i la capçalera «Eix z», el component fix en la molècula al llarg de l'eix de simetria (molècules lineals o roto-simètriques) o de l'eix de quantització.

<i>Moment angular</i> <sup>1</sup>	<i>Símbol de l'operador</i>	<i>Símbol del nombre quàntic</i>			<i>Notes</i>
		<i>Total</i>	<i>Eix Z</i>	<i>Eix z</i>	
orbital electrònic	$\hat{L}$	$L$	$M_L$	$\Lambda$	2
monoelectrònic	$\hat{l}$	$l$	$m_l$	$\lambda$	2
espín electrònic	$\hat{S}$	$S$	$M_S$	$\Sigma$	
monoelectrònic	$\hat{s}$	$s$	$m_s$	$\sigma$	
orbital electrònic + espín	$\hat{L} + \hat{S}$			$\Omega = \Lambda + \Sigma$	2
orbital nuclear (rotacional)	$\hat{R}$	$R$		$K_R, k_R$	
espín nuclear	$\hat{I}$	$I$	$M_I$		
vibració interna					
molècules rotoesfèriques	$\hat{l}$	$l(l\zeta)$		$K_l$	3
altres	$\hat{j}, \hat{\pi}$			$l(l\zeta)$	2, 3
suma de $R + L(+j)$	$\hat{N}$	$N$		$K, k$	2
suma de $N + S$	$\hat{J}$	$J$	$M_J$	$K, k$	2, 4
suma de $J + I$	$\hat{F}$	$F$	$M_F$		

- 1) En tots els casos, l'operador vectorial i els seus components estan relacionats amb els nombres quàntics mitjançant equacions de valors propis del tipus

$$\hat{J}^2\psi = J(J+1)\psi, \quad \hat{J}_z\psi = M_J\psi \quad \text{i} \quad \hat{J}_z\psi = K\psi$$

on els components dels nombres quàntics  $M_J$  i  $K$  prenen valors enters o semienters en l'interval  $-J \leq M_J \leq +J$ ,  $-J \leq K \leq +J$ . (Si els símbols de l'operador representen el *moment angular*, en comptes de (*moment angular*)/ $\hbar$ , les equacions de valors propis s'han de formular  $\hat{J}^2\psi = J(J+1)\hbar^2\psi$ ,  $\hat{J}_z\psi = M_J\hbar\psi$  i  $\hat{J}_z\psi = K\hbar\psi$ .)

- 2) Alguns autors, principalment Herzberg [52], tracten els components dels nombres quàntics  $\Lambda, \Omega, l$  i  $K$  de manera que tan sols prenen valors positius o zero, amb la qual cosa tot valor del nombre quàntic diferent de zero indica dues funcions d'ona amb signes oposats per al component apropiat del moment angular. Quan es fa això, la lletra minúscula  $k$  es considera freqüentment com un nombre quàntic amb signe, relacionat amb  $K$  per  $K = |k|$ . Malgrat tot, en les discussions teòriques, tots els components dels nombres quàntics es tracten habitualment amb el seu signe, i prenen tant valors positius com negatius.
- 3) No hi ha un conveni uniforme per a designar el moment angular de vibració interna; s'han emprat  $j, \pi, p$  i  $G$ . Per a molècules roto-simètriques i lineals, el component de  $j$  segons l'eix de simetria es designa sempre pel nombre quàntic  $l$ , on  $l$  pren valors en l'interval  $-v \leq l \leq +v$  en increments de 2. El component corresponent del moment angular és realment  $l\zeta\hbar$ , en comptes de  $l\hbar$ , on  $\zeta$  és una constant d'acoblament de Coriolis.
- 4) Els estats rotacionals de molècules roto-simètriques es designen mitjançant el valor de  $J$  (o de  $N$  si  $S \neq 0$ ), amb subíndexs  $K_a, K_c$ , relacionats amb el nombre quàntic  $K = |k|$  al voltant dels eixos  $a$  i  $c$  en els límits del rotor simètric allargat i aplanat, respectivament.

*Exemple*

$$J_{K_a, K_c} = 5_{2,3}, \text{ per a un nivell rotacional determinat}$$

## SÍMBOLS DELS OPERADORS DE SIMETRIA I MARQUES DE LES ESPÈCIES DE SIMETRIA

### I) Operadors de simetria en coordenades fixes a l'espai [55]

identitat	$E$
permutació	$P$
inversió fixa a l'espai	$E^*$
permutació-inversió	$P^* (= PE^*)$

L'operació permutació  $P$  permuta les marques de nuclis idèntics.

#### Exemple

En la molècula de  $\text{NH}_3$ , si els nuclis d'hidrogen s'indiquen amb 1, 2 i 3,  $P = (123)$  simbolitza la permutació que comporta reemplaçar 1 per 2, 2 per 3 i 3 per 1.

L'operació inversió  $E^*$  inverteix el signe de les coordenades de totes les partícules referides a l'origen fix a l'espai, o al centre de masses fix en la molècula, si s'ha separat la translació. També s'anomena *operador paritat*; en absència de camp, les funcions d'ona a les quals s'aplica  $E^*$  són de paritat + (inalterables) o paritat - (canvi de signe). Aquesta marca es pot usar per a distingir els dos components quasi degenerats formats pel desdoblament  $A$  (en un estat electrònic degenerat) o el desdoblament  $I$  (en un estat de vibració degenerat) en les molècules lineals, o pel desdoblament  $K$  (desdoblament de simetria) en les molècules lleugerament rotosimètriques. Per a molècules lineals, els components desdobllats segons  $A$  o  $I$  es poden distingir també mitjançant els marcadors  $e$  o  $f$  [56]; per als estats singlet, aquests corresponen, respectivament, a la paritat + o - quan  $J$  és parell, i viceversa quan  $J$  és senar (vegeu, però, [56]). Per a molècules lineals en estats electrònics degenerats, els nivells desdobllats segons  $A$  es poden designar alternativament amb  $\Pi(A')$  o  $\Pi(A'')$ , (o  $\Delta(A')$ ,  $\Delta(A'')$ , etc.), [57]. Aquí, els símbols  $A'$  o  $A''$  descriuen la simetria de la funció d'ona electrònica per a valors alts de  $J$ , pel que fa a la reflexió en el pla de rotació (vegeu, però, [57] per a més detalls). Els símbols  $A'$  o  $A''$  són particularment útils per a la correlació d'estats de molècules implicades en reaccions o fotodissociació.

En relació amb les espècies de simetria en la permutació-inversió, es poden utilitzar els superíndexs + o - per a indicar la paritat.

#### Exemples

- $A_1^+$  totalment simètrica respecte a la permutació, paritat positiva
- $A_1^-$  totalment simètrica respecte a la permutació, paritat negativa

Els símbols de Herman-Mauguin d'operacions de simetria emprats per als cristalls són definits en la secció 2.8, p. 60.

## II) Operadors de simetria en coordenades fixes en la molècula (símbols de Schönflies) [52]

identitat	$E$
rotació de $2\pi/n$	$C_n$
reflexió	$\sigma, \sigma_v, \sigma_d, \sigma_h$
inversió	$i$
rotació-reflexió	$S_n (= C_n\sigma_h)$

Si  $C_n$  és l'eix principal de simetria, a les funcions d'ona que no canvien o que canvien de signe en aplicar l'operador  $C_n$  se'ls assignen els símbols d'espècie  $A$  o  $B$ , respectivament, i a altres funcions d'ona que estan multiplicades per  $\exp(\pm 2\pi is/n)$  se'ls assigna el símbol d'espècie  $E_s$ . Les funcions d'ona que no canvien o que canvien de signe en aplicar-los  $i$  s'indiquen amb  $g$  (*gerade* 'parell, simètric') o  $u$  (*ungerade* 'senar, antisimètric'), respectivament. Les funcions d'ona que no canvien o que canvien de signe en aplicar-los  $\sigma_h$  s'indiquen mitjançant els símbols de l'espècie amb una prima ' o una doble prima '', respectivament. Per a regles més detallades, vegeu [51, 52].

## ALTRES SÍMBOLS I CONVENCIONS APLICATS EN ESPECTROSCÒPIA ÒPTICA

### I) Símbols dels termes dels estats atòmics

Els estats electrònics dels àtoms es designen mitjançant el valor del nombre quàntic  $L$  de l'estat. El valor de  $L$  s'indica amb lletres rodones majúscules: S, P, D, F, G, H, I i K..., que representen  $L = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$  i  $7, \dots$ , respectivament. Les lletres minúscules corresponents designen el moment angular orbital d'un sol electró. En un àtom polieletrònic, la multiplicitat d'espín electrònic ( $2S + 1$ ) es pot indicar mitjançant un superíndex a l'esquerra de la lletra, i el valor del moment angular total  $J$  amb un subíndex a la dreta. Si  $L$  o  $S$  són zero, només hi ha un valor de  $J$  possible i generalment se suprimeix el subíndex. Finalment, la configuració electrònica d'un àtom s'indica donant l'ocupació de cada orbital electrònic, tal com mostren els exemples presentats a continuació.

*Exemples*

B:  $(1s)^2(2s)^2(2p)^1, {}^2P_{1/2}$   
 C:  $(1s)^2(2s)^2(2p)^2, {}^3P_0$   
 N:  $(1s)^2(2s)^2(2p)^3, {}^4S$

**II) Símbols dels termes dels estats moleculars**

Els estats electrònics de les molècules s'indiquen mitjançant la designació de l'espècie de simetria de la funció d'ona del grup puntual molecular, amb lletres majúscules dels alfabetos llatí o grec. Com en els àtoms, la multiplicitat d'espín ( $2S + 1$ ) es pot indicar amb un superíndex a l'esquerra. Per a molècules lineals es pot incloure el valor de  $\Omega (= \Lambda + \Sigma)$  com a subíndex a la dreta (semblant a  $J$  per als àtoms). Si no s'especifica el valor de  $\Omega$ , els símbols del terme fan referència a tots els estats components i es pot agregar el subíndex  $r$  o el subíndex  $i$  a la dreta per a indicar que els components són regulars (l'energia augmenta amb  $\Omega$ ) o invertits (l'energia disminueix amb  $\Omega$ ), respectivament.

Els estats electrònics de les molècules també es poden designar amb una sola lletra. L'estat electrònic fonamental es designa amb X, els estats excitats d'igual multiplicitat són designats amb A, B, C..., en ordre ascendent d'energia, i els estats excitats de diferent multiplicitat ho són amb lletres minúscules a, b, c... En les molècules poliàtomiques (però no en les molècules diatòmiques) és costum afegir una titlla (per exemple,  $\tilde{X}$ ) a aquests símbols empírics per tal d'evitar possibles confusions amb els símbols de les espècies de simetria.

Finalment els orbitals electrònics s'indiquen mitjançant les lletres minúscules corresponents, i la configuració electrònica s'indica d'una manera semblant a la dels àtoms.

*Exemples*

L'estat fonamental del CH és  $(1\sigma)^2(2\sigma)^2(3\sigma)^2(1\pi)^1, X {}^2\Pi$ , on el component  ${}^2\Pi_{1/2}$  està per sota del component  ${}^2\Pi_{3/2}$ , tal com s'indica amb el subíndex  $r$ , 'regular'.

L'estat fonamental del OH és  $(1\sigma)^2(2\sigma)^2(3\sigma)^2(1\pi)^3, X {}^2\Pi$ , on el component  ${}^2\Pi_{3/2}$  està per sota del component  ${}^2\Pi_{1/2}$  tal com s'indica amb el subíndex  $i$ , 'invertit'.

Els dos estats electrònics més baixos del  $\text{CH}_2$  són

$$\dots (2a_1)^2(1b_2)^2(3a_1)^2, \tilde{a}^1A_1,$$

$$\dots (2a_1)^2(1b_2)^2(3a_1)^1(1b_1)^1, \tilde{X}^3B_1.$$

L'estat fonamental del  $C_6H_6$  (benzè) és  $\dots (a_{2u})^2(e_{1g})^4, \tilde{X}^1A_{1g}$ .

Els estats vibracionals de les molècules s'indiquen usualment donant els nombres quàntics de vibració per a cada mode normal.

### Exemples

Per a una molècula triatòmica no lineal,

(0, 0, 0) indica l'estat fonamental,

(1, 0, 0) indica l'estat  $\nu_1$ , és a dir,  $\nu_1 = 1$  i

(1, 2, 0) indica l'estat  $\nu_1 + 2\nu_2$ , etc.

### III) Notació per a les transicions espectroscòpiques

Els nivells superior i inferior d'una transició espectroscòpica s'indiquen mitjançant una prima ' i una doble prima ", respectivament.

#### Exemple

$$h\nu = E' - E''$$

Les transicions s'indiquen generalment amb el símbol de l'estat excitat seguit del símbol de l'estat fonamental, separats per un guió o una sageta per tal d'indicar la direcció de la transició (emissió cap a la dreta, absorció cap a l'esquerra).

#### Exemples

B – A indica la transició entre l'estat d'alta energia B a l'estat de baixa energia A;

B → A indica emissió des de B fins a A;

B ← A indica absorció des de A fins a B;

(0, 2, 1) ← (0, 0, 1) designa la banda calenta  $2\nu_2 + \nu_3 - \nu_3$  en una molècula triatòmica no lineal.

Hom pot utilitzar una notació més compacta [58] per a designar les transicions vibròniques (o vibracionals) en molècules poliatòmiques amb molts modes normals, en les quals a cada índex de vibració  $r$  se li posa un superíndex  $v'_r$  i un subíndex  $v''_r$ , que indiquen els valors de l'estat superior i inferior del nombre quàntic. Quan  $v'_r = v''_r = 0$  se suprimeix l'índex corresponent.

#### Exemples

$1_0^1$  indica la transició (1, 0, 0) – (0, 0, 0);

$2_0^2 3_1^1$  indica la transició (0, 2, 1) – (0, 0, 1).



Per a transicions rotacionals, el valor de  $\Delta J = J' - J''$  s'indica mitjançant una lletra que designa les branques d'una banda rotacional:  $\Delta J = -2, -1, 0, 1$  i  $2$  s'anomenen «branca O», «branca P», «branca Q», «branca R» i «branca S», respectivament. Els canvis d'altres nombres quàntics (tal com  $K$  per a una molècula rotosimètrica, o  $K_a$  i  $K_c$  per a una rotoasimètrica) es poden indicar posant lletres minúscules com a superíndex a l'esquerra, d'acord amb la mateixa regla.

#### *Exemple*

<sup>P</sup>Q indica una «branca Q de tipus p» en una molècula rotosimètrica, és a dir,  $\Delta K = -1, \Delta J = 0$ .

### IV) *Presentació dels espectres*

Recomanem representar els espectres, tant en l'infraroig com en el visible/ultraviolat, en funció del nombre d'ona, habitualment en  $\text{cm}^{-1}$ , amb el nombre d'ona decreixent cap a la dreta [10, 18]. (Els espectres en el visible/ultraviolat es representen de vegades en funció de la longitud d'ona, normalment en nm, amb la longitud d'ona creixent cap a la dreta.) Hom recomana representar els espectres Raman amb el desplaçament del nombre d'ona augmentant cap a l'esquerra [11].

Recomanem representar els espectres de ressonància d'espín electrònic (ESR) i els espectres de ressonància magnètica nuclear (RMN) amb la inducció magnètica (anomenada, de manera poc correcta, «camp magnètic») creixent cap a la dreta, quan es fixa la freqüència, o amb la freqüència creixent cap a l'esquerra quan es fixa el camp magnètic [12, 13].

Recomanem representar els espectres fotoelectrònics amb l'energia d'ionització creixent cap a l'esquerra, és a dir, amb l'energia cinètica fotoelectrònica creixent cap a la dreta [14].

## 2.7. RADIACIÓ ELECTROMAGNÈTICA

Les magnituds i els símbols que es donen aquí s'han seleccionat a partir de les recomanacions de la IUPAP [4], l'ISO [5.g] i la IUPAC [19-21] i tenint en compte la pràctica habitual en el camp de la física de làsers.

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
longitud d'ona	$\lambda$		m	
velocitat de la llum				
— en el buit	$c_0$	$c_0 = 299\,792\,458\text{ m s}^{-1}$	$\text{m s}^{-1}$	1
— en un medi	$c$	$c = c_0/n$	$\text{m s}^{-1}$	
nombre d'ona en el buit	$\tilde{\nu}$	$\tilde{\nu} = \nu/c_0 = 1/n\lambda$	$\text{m}^{-1}$	2
nombre d'ona [en un medi]	$\sigma$	$\sigma = 1/\lambda$	$\text{m}^{-1}$	
freqüència	$\nu$	$\nu = c/\lambda$	Hz	
freqüència angular, pulsància, pulsació	$\omega$	$\omega = 2\pi\nu$	$\text{s}^{-1}$ , rad $\text{s}^{-1}$	
índex de refracció	$n$	$n = c_0/c$	1	
constant de Planck	$h$		J s	
constant de Planck/ $2\pi$	$\hbar$	$\hbar = h/2\pi$	J s	
energia radiant	$Q, W$		J	3
densitat d'energia radiant	$\rho, w$	$\rho = Q/V$	$\text{J m}^{-3}$	3
densitat d'energia radiant espectral				3
— en termes de freqüència	$\rho_\nu, w_\nu$	$\rho_\nu = d\rho/d\nu$	$\text{J m}^{-3}\text{ Hz}^{-1}$	
— en termes de nombre d'ona	$\rho_{\tilde{\nu}}, w_{\tilde{\nu}}$	$\rho_{\tilde{\nu}} = d\rho/d\tilde{\nu}$	$\text{J m}^{-2}$	
— en termes de longitud d'ona	$\rho_\lambda, w_\lambda$	$\rho_\lambda = d\rho/d\lambda$	$\text{J m}^{-4}$	
probabilitats de transició d'Einstein:				4, 5
emissió espontània	$A_{ij}$	$dN_j/dt = -\sum_j A_{ij}N_j$	$\text{s}^{-1}$	
emissió estimulada, emissió induïda	$B_{ij}$	$dN_j/dt = -\sum_j \rho_{\tilde{\nu}}(\tilde{\nu}_{ij})B_{ij}N_j$	$\text{s kg}^{-1}$	
absorció	$B_{ji}$	$dN_i/dt = -\sum_j \rho_{\tilde{\nu}}(\tilde{\nu}_{ij})B_{ji}N_i$	$\text{s kg}^{-1}$	
potència radiant, energia radiant per unitat de temps	$\Phi, P$	$\Phi = dQ/dt$	W	3
intensitat radiant	$I$	$I = d\Phi/d\Omega$	$\text{W sr}^{-1}$	3
excitència radiant (flux radiant emès)*	$M$	$M = d\Phi/dA_{\text{focus}}$	$\text{W m}^{-2}$	3
radiància	$L$	$L = \frac{d^2\Phi}{d\Omega dA_{\text{focus}}}$	$\text{W sr}^{-1}\text{ m}^{-2}$	3, 6
intensitat, irradiància (flux radiant rebut)	$I, E$	$I = d\Phi/dA$	$\text{W m}^{-2}$	3, 7
intensitat espectral, irradiància espectral	$I(\tilde{\nu}), E(\tilde{\nu})$	$I(\tilde{\nu}) = dI/d\tilde{\nu}$	$\text{W m}^{-1}$	8
fluència	$F, (H)$	$F = \int I dt = \int \frac{d\Phi}{dA} dt$	$\text{J m}^{-2}$	9

# En la definició d'excitència radiant de la versió anglesa,  $dA_{\text{focus}}$  es representa  $dA_{\text{source}}$  (N. de l'ed.)

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
emitància	$\varepsilon$	$\varepsilon = M/M_{\text{bb}}$	1	10
constant de Stefan-Boltzmann	$\sigma$	$M_{\text{bb}} = \sigma T^4$	$\text{W m}^{-2} \text{K}^{-4}$	10
étendue, rendiment (potència col·lectora de llum)	$E, (e)$	$E = A\Omega = \Phi/L$	$\text{m}^2 \text{sr}$	11
poder de resolució	$R$	$R = \tilde{\nu}/\delta\tilde{\nu}$	1	12
resolució	$\delta\tilde{\nu}$		$\text{m}^{-1}$	2, 12, 13
interval espectral lliure	$\Delta\tilde{\nu}$	$\Delta\tilde{\nu} = 1/2l$	$\text{m}^{-1}$	2, 14
finor	$f$	$f = \Delta\tilde{\nu}/\delta\tilde{\nu}$	1	14
factor de qualitat	$Q$	$Q = 2\pi\nu \frac{W}{-dW/dt}$	1	14, 15
primera constant de radiació	$c_1$	$c_1 = 2\pi h c_0^3$	$\text{W m}^2$	
segona constant de radiació	$c_2$	$c_2 = hc_0/k$	$\text{K m}$	
transmitància, factor de transmissió	$\tau, T$	$\tau = \Phi_{\text{tr}}/\Phi_0$	1	16, 17
absortància, factor d'absorció	$\alpha$	$\alpha = \Phi_{\text{abs}}/\Phi_0$	1	16, 17
reflectància, factor de reflexió	$\rho$	$\rho = \Phi_{\text{refl}}/\Phi_0$	1	16, 17
absorbància [decimal]	$A_{10}, A$	$A_{10} = -\log(1 - \alpha_i)$	1	17, 18, 19
absorbància [neperiana]	$A_e, B$	$A_e = -\ln(1 - \alpha_i)$	1	17, 18, 19
coeficient d'absorció				
— [lineal] decimal	$a, K$	$a = A_{10}/l$	$\text{m}^{-1}$	17, 20
— [lineal] neperià	$\alpha$	$\alpha = A_e/l$	$\text{m}^{-1}$	17, 20
— molar [decimal]	$\varepsilon$	$\varepsilon = a/c = A_{10}/cl$	$\text{m}^2 \text{mol}^{-1}$	17, 20, 21
— molar neperià	$\kappa$	$\kappa = \alpha/c = A_e/cl$	$\text{m}^2 \text{mol}^{-1}$	17, 20, 21
secció eficaç d'absorció neta <sup>#</sup>	$\sigma_{\text{neta}}$	$\sigma_{\text{neta}} = \kappa/N_A$	$\text{m}^2$	22
intensitat integrada d'absorció				
— en funció de $\tilde{\nu}$	$A, \bar{A}$	$A = \int \kappa(\tilde{\nu}) d\tilde{\nu}$	$\text{m mol}^{-1}$	22, 23
	$S$	$S = A/N_A$	$\text{m}$	22, 23
	$\bar{S}$	$\bar{S} = (1/pl) \int \ln(I_0/I) d\tilde{\nu}$	$\text{Pa}^{-1} \text{m}^{-2}$	22, 23, 24
— en funció de $\ln \tilde{\nu}$	$\Gamma$	$\Gamma = \int \kappa(\tilde{\nu}) \tilde{\nu}^{-1} d\tilde{\nu}$	$\text{m}^2 \text{mol}^{-1}$	22, 23
secció eficaç d'absorció integrada	$G_{\text{neta}}$	$G_{\text{neta}} = \int \sigma_{\text{neta}}(\tilde{\nu}) \tilde{\nu}^{-1} d\tilde{\nu}$	$\text{m}^2$	22, 23
índex d'absorció	$k$	$k = \alpha/4\pi\tilde{\nu}$	1	25
índex de refracció complex	$\hat{n}$	$\hat{n} = n + ik$	1	
refracció molar	$R$	$R = \left( \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \right) V_m$	$\text{m}^3 \text{mol}^{-1}$	

# En anglès, el símbol de secció eficaç d'absorció neta,  $\sigma_{\text{neta}}$ , es representa  $\sigma_{\text{net}}$ . (Nota de l'ed.)

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
angle de rotació òptica	$\alpha$		1, rad	26
poder rotatori òptic específic	$[\alpha]_d^\theta$	$[\alpha]_d^\theta = \alpha / \gamma l$	rad m <sup>2</sup> kg <sup>-1</sup>	26
poder rotatori òptic molar	$\alpha_m$	$\alpha_m = \alpha / cl$	rad m <sup>2</sup> mol <sup>-1</sup>	26

- 1) Habitualment, quan no hi ha risc d'ambigüitat s'omet el subíndex <sub>0</sub> indicatiu de 'buit'.
- 2) La unitat cm<sup>-1</sup> s'usa generalment per al nombre d'ona en el buit.
- 3) Els símbols de les magnituds que van des d'*energia radiant* fins a la *irradiància* també s'usen per a les magnituds que es refereixen a la radiació visible, és a dir, les magnituds lluminoses i les magnituds fotòniques. Per tal d'evitar possibles confusions entre aquestes magnituds, es poden afegir els subíndex <sub>e</sub> per a 'energètic', <sub>v</sub> per a 'visible' i <sub>f</sub> per a 'fotó'. Les unitats emprades per a magnituds lluminoses deriven de la unitat bàsica *candela* (cd); vegeu el [capítol 3](#).

#### Exemple

intensitat radiant	$I_{e_0}$ , unitat SI: W sr <sup>-1</sup>
intensitat lluminosa	$I_{v_0}$ , unitat SI: cd
intensitat fotònica	$I_f$ , unitat SI: s <sup>-1</sup> sr <sup>-1</sup>

- 4) Els subíndex <sub>i</sub> i <sub>j</sub> es refereixen a estats individuals;  $E_j > E_i$ ,  $E_j - E_i = hc\tilde{\nu}_{ij}$  i  $B_{ji} = B_{ij}$  en les equacions de definició. Els coeficients  $B$  es defineixen aquí utilitzant la densitat d'energia en funció del nombre d'ona  $\rho_\nu$ ; també es pot definir alternativament emprant la densitat d'energia definida en funció de la freqüència  $\rho_\nu$ ; en aquest cas  $B$  té unitats SI m kg<sup>-1</sup> i  $B_{\tilde{\nu}} = c_0 B_\nu$ , on  $B_\nu$ , és definit en funció de la freqüència i  $B_{\tilde{\nu}}$  en funció del nombre d'ona.
- 5) La relació entre els coeficients d'Einstein  $A$  i  $B_{\tilde{\nu}}$  és  $A = 8\pi hc_0 \tilde{\nu}^3 B_{\tilde{\nu}}$ . El coeficient d'absorció o emissió estimulades d'Einstein,  $B$ , es pot relacionar també amb el moment de transició entre els estats  $i$  i  $j$ ; per a una transició de dipol elèctric la relació és

$$B_{\tilde{\nu},ij} = \frac{8\pi^3}{3h^3 c_0 (4\pi\epsilon_0)} \sum_{\rho} |\langle i | \mu_{\rho} | j \rangle|^2$$

on el sumatori de  $\rho$  s'estén als tres eixos cartesianes fixos a l'espai i  $\mu_{\rho}$  és un component fix a l'espai de l'operador moment dipolar. Aquestes equacions es basen, de nou, en la definició del coeficient d'Einstein  $B$  en funció del nombre d'ona (és a dir  $B_{\tilde{\nu}}$ , i no  $B_\nu$ ).

- 6) La radiància és una mesura normalitzada de la brillantor d'un focus lluminós; és la potència emesa per unitat de superfície del focus i per unitat d'angle sòlid del feix des de cada punt de la font.
- 7) El nom *intensitat*, de símbol  $I$ , s'usa habitualment en qüestions referents a feixos col·limats de llum, tals com les aplicacions de la llei de Lambert-Beer en l'anàlisi espectromètrica.
- 8) Les magnituds espectrals poden ser també definides respecte a la freqüència  $\nu$  o a la longitud d'ona  $\lambda$ ; vegeu més amunt la [densitat d'energia radiant espectral](#).
- 9) La fluència s'usa en fotoquímica per a designar l'energia lliurada en un interval de temps donat (per exemple, per un impuls de radiació làser). Aquesta magnitud també es pot anomenar *exposició radiant*.
- 10) L'emissància d'una mostra és la raó entre el flux emès per la mostra i el flux emès per un cos negre a la mateixa temperatura;  $M_{en}$  és aquesta última magnitud.
- 11) *Étendue* és una característica dels instruments òptics. Representa una mesura de la potència col·lectora de llum, és a dir, de la potència transmesa per la radiància del focus.  $A$  és l'àrea del focus (o obturador d'imatge);  $\Omega$  és l'angle sòlid tolerat des de cada punt del focus per l'obertura de l'obturador.
- 12) Aquesta magnitud caracteritza el funcionament d'un espectròmetre, o el grau amb què una ratlla espectral (o un feix de radiació làser) és monocromàtica. Es pot expressar també mitjançant la freqüència  $\nu$  o la longitud d'ona  $\lambda$ .

- 13) La definició precisa de *resolució* depèn de la forma de la ratlla, però habitualment es pren com l'amplària de la ratlla a la meitat de la intensitat màxima (FWHM 'full [line] with at half maximum [intensity]') en una escala de nombre d'ona,  $\delta\tilde{\nu}$ , o de freqüència,  $\delta\nu$ .
- 14) Aquestes magnituds caracteritzen una cavitat de Fabry-Perot, o una cavitat de làser.  $l$  és la separació de la cavitat i  $2l$  la longitud del camí d'anada i tornada. L'interval espectral lliure és l'interval de nombre d'ona entre modes longitudinals successius de la cavitat.
- 15)  $W$  és l'energia emmagatzemada a la cavitat i  $-dW/dt$  és la velocitat de disminució de l'energia emmagatzemada.  $Q$  també està relacionada amb l'amplària de ratlla d'un sol mode de cavitat:  $Q = \nu/\delta\nu = \tilde{\nu}/\delta\tilde{\nu}$ . Per tant, cavitats amb  $Q$  alta donen amplàries de ratlla estretes.
- 16) Si la dispersió i la luminescència es poden ignorar,  $\tau + \alpha + \rho = 1$ . En l'espectroscòpia òptica, les propietats internes (indicades amb el subíndex  $i$ ) es defineixen de manera que els efectes de superfície i els efectes de cel·la, tals com les pèrdues per reflexió, quedin exclosos, de manera que si es poden negligir la dispersió i la luminescència, resulta  $\tau_i + \alpha_i = 1$ . Això porta a la forma usual de la llei de Lambert-Beer,  $\Phi_{tr}/\Phi_0 = I_{tr}/I_0 = \tau_i = 1 - \alpha_i = \exp(-\kappa cl)$ .
- 17) En espectroscòpia, totes aquestes magnituds són habitualment definides en funció de la intensitat espectral,  $I(\tilde{\nu})$ , de manera que totes es consideren funcions del nombre d'ona  $\tilde{\nu}$  (o de la freqüència  $\nu$ ) al llarg de tot l'espectre. Així, per exemple, el coeficient d'absorció  $\alpha(\tilde{\nu})$  per al nombre d'ona  $\tilde{\nu}$  defineix l'espectre d'absorció de la mostra; anàlogament,  $T(\tilde{\nu})$  defineix l'espectre de transmitància.
- 18) Les definicions que es donen aquí relacionen l'absorbància  $A_{10}$  o  $A_e$  amb l'absortància interna  $\alpha$ ; vegeu la nota [16]. Tanmateix, hom omet sovint el subíndex  $i$  de l'absortància  $\alpha$ .
- 19) En la referència [19] s'usa el símbol  $A$  per a l'absorbància decimal i el símbol  $B$  per a l'absorbància neperiana.
- 20)  $l$  és la longitud del camí d'absorció i  $c$  és la concentració en quantitat (de substància).
- 21) En la bibliografia, el coeficient d'absorció molar decimal  $\epsilon$  és anomenat sovint *coeficient d'extinció*. Malauradament, moltes vegades els valors numèrics del coeficient d'extinció no porten unitats; l'absència d'unitats significa habitualment que aquestes són  $\text{mol}^{-1} \text{dm}^3 \text{cm}^{-1}$ . Vegeu també [18]. El mot *extinció* s'hauria de reservar, en rigor, per a la suma dels efectes de l'absorció, la dispersió i la luminescència.
- 22) Noteu que aquestes magnituds donen el coeficient d'absorció neta,  $\kappa$ , la secció eficaç d'absorció neta,  $\sigma_{\text{netas}}$  i el valors nets de  $A$ ,  $S$ ,  $\bar{S}$ ,  $\Gamma$  i  $G_{\text{netas}}$  en el sentit de ser les sumes dels efectes deguts a l'absorció i a l'emissió induïda. Vegeu la discussió més endavant, p. 54-55.
- 23) La integral definida que defineix aquestes magnituds es pot especificar donant els límits d'integració entre parèntesis, per exemple,  $G(\tilde{\nu}_1, \tilde{\nu}_2)$ . En general, s'entén que la integració s'efectua per a una ratlla d'absorció o per a una banda d'absorció.  $A$ ,  $\bar{S}$  i  $\Gamma$  són mesures de la intensitat de la banda en funció de la concentració en quantitat de substància;  $G_{\text{netas}} = \Gamma/N_A$  i  $S = A/N_A$  són les magnituds molars corresponents. Més endavant, a la p. 56, es discuteix la relació entre aquestes magnituds i les probabilitats de transició d'Einstein per a una ratlla espectral senzilla. El símbol  $\bar{A}$  es pot usar per al coeficient d'absorció integrat,  $A$ , quan hi pugui haver possibilitat de confusió amb el coeficient d'emissió d'Einstein,  $A_{ij}$ .

La intensitat integrada d'una transició electrònica s'expressa sovint en funció de la força de l'oscil·lador o «valor  $f$ », que no té dimensions, o en funció de la probabilitat de transició d'Einstein  $A_{ij}$  entre els estats implicats, amb unitats  $\text{SI s}^{-1}$ . Mentre que  $A_{ij}$  té un significat senzill i universalment acceptat (vegeu la p. 50),  $f$  s'usa de diferents maneres. Un conveni pràctic d'ús freqüent s'expressa mitjançant l'equació

$$f_{ij} = [(4\pi\epsilon_0)m_e c_0 / 8\pi^2 e^2] \lambda^2 A_{ij} \quad \text{o} \quad f_{ij} = (1,4992 \times 10^{-14})(A_{ij}/\text{s}^{-1})(\lambda/\text{nm})^2,$$

on  $\lambda$  és la longitud d'ona de transició i on  $i$  i  $j$  es refereixen a estats individuals. Per a transicions electròniques fortament permeses,  $f$  és de l'ordre de les unitats.

- 24) La magnitud  $\bar{S}$  s'utilitza tan sols per a gasos; es defineix d'una manera similar a  $A$ , excepte que la concentració,  $c$ , hi és substituïda per la pressió parcial del gas,  $p$ . A baixes pressions,  $p_i \approx c_i RT$ , amb la qual cosa  $\bar{S}$  i  $A$  estan mútuament relacionats per l'equació  $\bar{S} \approx A/RT$ . En conseqüència, si s'usa  $\bar{S}$  per a expressar intensitats de ratlles o bandes, caldrà especificar-ne la temperatura.
- 25) En aquesta definició,  $\alpha$  és el *coeficient d'absorció neperià*.
- 26) La convenció de signes per a l'angle de rotació és el següent:  $\alpha$  és positiu si el pla de polarització gira en el sentit de les agulles del rellotge, tal com es veu quan es mira cap al focus lluminós. Si gira en sentit contrari al de les agulles del rellotge,  $\alpha$  és negatiu.

La rotació òptica deguda a un solut en solució pot ser expressada de la manera següent:

$$\alpha(589,3 \text{ nm}, 20 \text{ }^\circ\text{C}, \text{sacarosa}, 10 \text{ g dm}^{-3} \text{ en H}_2\text{O}, 10 \text{ cm de recorregut}) = +0,664 \text{ }^\circ$$

Es forneix la mateixa informació si es dona el poder rotatori òptic específic  $\alpha/\gamma l$  o el poder rotatori òptic molar  $\alpha/c l$ , on  $\gamma$  és la concentració en massa,  $c$  la concentració en quantitat de substància i  $l$  la longitud del camí òptic. La major part de les tabulacions donen el poder rotatori òptic específic, indicat per  $[\alpha]_D^\theta$ . La longitud d'ona emprada  $\lambda$  (freqüentment la ratlla D del sodi) i la temperatura Celsius  $\theta$  s'escriuen convencionalment com a subíndex i superíndex del poder rotatori específic  $[\alpha]$ . Per a líquids i sòlids purs  $[\alpha]_D^\theta$  es defineix, de manera semblant, per  $[\alpha]_D^\theta = \alpha/\rho l$ , on  $\rho$  és la densitat en massa.

Els poders rotatoris òptics específics s'acostumen a anomenar *rotacions específiques*, i desgraciadament se solen donar sense expressar-ne les unitats. Quan manquen les unitats, es considera usualment que són grau  $\text{cm}^3 \text{ g}^{-1} \text{ dm}^{-1}$  en el cas de líquids purs i solucions, o grau  $\text{cm}^3 \text{ g}^{-1} \text{ mm}^{-1}$  per a sòlids, on la unitat grau és emprada com el símbol de graus d'angle pla.

## MAGNITUDS I SÍMBOLS RELATIUS A LA MESURA DE LA INTENSITAT D'ABSORCIÓ

En la major part dels experiments destinats a mesurar la intensitat d'absorció espectral, el que s'obté és l'*absorció neta*, resultat de l'absorció des del nivell d'energia més baix,  $m$ , fins al nivell d'energia més alt,  $n$ , menys l'emissió induïda des de  $n$  fins a  $m$ . Atès que la població d'un nivell depèn de la temperatura, també en dependrà l'absorció neta mitjana. Aquest comentari és vàlid per a totes les magnituds definides en la [taula](#) que mesuren la intensitat d'absorció, encara que per a transicions en les quals  $hc_0\tilde{\nu} \gg kT$ , la dependència de la temperatura és petita, per la qual cosa la inducció induïda es pot ignorar generalment per a  $\tilde{\nu} > 1\,000 \text{ cm}^{-1}$ .

D'una manera més conceptual, la secció eficaç d'absorció pura,  $\sigma_{ji}(\tilde{\nu})$ , es defineix per a una transició radiant induïda des de l'estat  $i$  a l'estat  $j$  (tant en emissió com en absorció). En un experiment ideal d'absorció, en el qual només estigui poblat el nivell  $i$ , la secció eficaç integrada d'absorció per a la transició  $j \leftarrow i$  s'expressa mitjançant l'equació

$$G_{ji} = \int \sigma_{ji}(\tilde{\nu}) \tilde{\nu}^{-1} d\tilde{\nu} = \int \sigma_{ji}(\nu) \nu^{-1} d\nu$$

Si els nivells d'energia superior i inferior estan degenerats, la intensitat de la ratlla observada és donada pel sumatori de les transicions entre tots els estats  $i$  del nivell inferior  $m$  i tots els estats  $j$  del nivell superior  $n$ , on cada terme es multiplica per la fracció de població  $p_i$  en l'estat inicial apropiat. Negligint l'emissió induïda, s'obté

$$G_{\text{neta}}(n \leftarrow m) = \sum_{i,j} p_i G_{ji}$$

Si l'emissió induïda és significativa, llavors la secció eficaç integrada neta queda de la manera següent:

$$G_{\text{neta}}(n \leftarrow m) = \sum_{i,j} (p_i - p_j) G_{ji} = (p_m/d_m - p_n/d_n) \sum_{i,j} G_{ji}$$

Aquí  $p_i$  i  $p_j$  indiquen les fraccions de població dels estats individuals  $i$  i  $j$  ( $p_i = \exp\{-E_i/kT\}/q$  a l'equilibri tèrmic, essent  $q$  la funció de partició);  $p_m$  i  $p_n$  indiquen les corresponents fraccions de població dels nivells d'energia, i  $d_m$  i  $d_n$  les degeneracions ( $p_i = p_m/d_m$ , etc.). La intensitat d'absorció  $G_{ji}$  i els coeficients d'Einstein  $A_{ij}$  i  $B_{ji}$  són les mesures fonamentals de la intensitat de la línia entre els estats  $i$  i  $j$ , les quals estan mútuament relacionades per les equacions  $\pi$

$$G_{ji} = hB_{v,ji} = (h/c_0)B_{v,ji} = A_{ij}/8\pi c_0 \tilde{\nu}^3$$

Finalment, per a una transició de dipol elèctric, aquestes magnituds es relacionen amb el quadrat del moment de transició mitjançant l'equació

$$G_{ji} = hB_{v,ji} = A_{ij}/8\pi c_0 \tilde{\nu}^3 = \frac{8\pi^3}{3hc_0(4\pi\epsilon_0)} |M_{ji}|^2$$

on el moment de transició  $M_{ji}$  és expressat per

$$|M_{ji}|^2 = \sum_{\rho} |\langle i | \mu_{\rho} | j \rangle|^2$$

El sumatori s'estén als tres eixos cartesianes fixos en l'espai i  $\mu_{\rho}$  és un component fixa a l'espai del moment dipolar elèctric. Substituint valors per les constants fonamentals, la relació entre  $G_{ji}$  i  $M_{ji}$  es pot donar en unitats pràctiques:

$$(G_{ji}/\text{pm}^2) = 41,623\ 8 |M_{ji}/\text{D}|^2$$

on D (= debye) =  $3,335\ 641 \times 10^{-30}$  C m.

Les intensitats integrades netes de les bandes d'absorció es caracteritzen usualment per una de les magnituds  $A$ ,  $S$ ,  $\bar{S}$ ,  $\Gamma$  o  $G_{\text{neta}}$  segons es defineixen en la [taula](#). La relació entre aquestes magnituds és donada per les equacions (aproximades)

$$G_{\text{neta}} = \Gamma / N_A = A / \tilde{\nu}_0 N_A = S / \tilde{\nu}_0 = \bar{S} (kT / \tilde{\nu}_0)$$

Tanmateix, tan sols la primera igualtat és exacta. En les que apareix  $A$ ,  $\bar{S}$  i  $S$ , s'ha de dividir pel nombre d'ona del centre de la banda  $\tilde{\nu}_0$  en relació amb una banda concreta, per tal de corregir el fet que  $A$ ,  $\bar{S}$  i  $S$  s'obtenen per integració del nombre d'ona i no del logaritme del nombre d'ona, tal com passa per a  $G_{\text{neta}}$  i  $\Gamma$ . Aquesta correcció és tan sols aproximada en el cas d'una banda (encara que l'error és negligible per a intensitats de ratlles senzilles en el cas de gasos). La relació que conté implica suposar que el gas és ideal (la qual cosa és aproximadament veritat a baixes temperatures) i a més inclou la temperatura. Per tant, les magnituds  $\Gamma$  i  $G_{\text{neta}}$  es relacionen d'una manera més simple amb magnituds més fonamentals, com ara les probabilitats de transició d'Einstein i el moment de transició, la qual cosa fa que siguin magnituds preferides per a expressar intensitats integrades de ratlla o banda.

La situació es complica encara més pel fet que hi ha autors que utilitzen el mateix símbol  $S$  per a qualsevol de les magnituds abans indicades, particularment per a qualsevol de les magnituds aquí indicades per  $A$ ,  $S$  i  $\bar{S}$ . És, per tant, molt important definir les magnituds i els símbols emprats quan es presenten intensitats integrades.

Per a transicions entre estats individuals, es poden usar qualsevol de les magnituds més fonamentals  $G_{ji}$ ,  $B_{\tilde{\nu}, ji}$ ,  $A_{ji}$  o  $|M_{ji}|$ ; les relacions entre elles són com les de més amunt i són exactes. Tanmateix, cal no confondre el coeficient integrat d'absorció,  $A$ , amb el coeficient d'Einstein,  $A_{ji}$  (ni amb l'absorbància, per a la qual també s'usa el símbol  $A$ ). Quan es pugui presentar aquesta confusió, hom recomana escriure  $\bar{A}$  per a la intensitat d'una banda, expressada com a coeficient d'absorció integrat del nombre d'ona.

La [taula](#) següent recull la unitat SI i la unitat habitualment emprada per a cadascuna de les magnituds  $A$ ,  $S$ ,  $\bar{S}$ ,  $\Gamma$  i  $G$ . La [taula](#) també mostra els factors numèrics de conversió de  $A$ ,  $S$ ,  $\bar{S}$  i  $\Gamma$  a  $G_{\text{neta}}$ , quan s'utilitzen les unitats habitualment emprades.



Magnitud	Unitat SI	Unitat comuna	Factor de conversió
$A, \bar{A}$	$\text{m mol}^{-1}$	$\text{km mol}^{-1}$	$(G/\text{pm}^2) = 16,605\ 40 \frac{(A/\text{km mol}^{-1})}{(\bar{v}_0/\text{cm}^{-1})}$
$\bar{S}$	$\text{Pa}^{-1} \text{m}^{-2}$	$\text{atm}^{-1} \text{cm}^{-2}$	$(G/\text{pm}^2) = 1,362\ 603 \times 10^{-2} \frac{(\bar{S}/\text{atm}^{-1} \text{cm}^{-2})(T/\text{K})}{(\bar{v}_0/\text{cm}^{-1})}$
$S$	$\text{m}$	$\text{cm}$	$(G/\text{pm}^2) = 10^{20} \frac{(S/\text{cm})}{(\bar{v}_0/\text{cm}^{-1})}$
$\Gamma$	$\text{m}^2 \text{mol}^{-1}$	$\text{cm}^2 \text{mol}^{-1}$	$(G/\text{pm}^2) = 1,660\ 540 \times 10^{-4} (\Gamma/\text{cm}^2 \text{mol}^{-1})$
$G$	$\text{m}^2$	$\text{pm}^2$	

Les magnituds referents a la intensitat d'absorció espectral i les relacions entre aquestes magnituds es discuteixen en les referències [59-61], i la llista de les mesures publicades d'intensitats de ratlles i d'intensitats de bandes, per a espectres en l'infraroig en fase gasosa, es poden trobar en les referències [60] i [61].

## 2.8. ESTAT SÒLID

Les magnituds i símbols que es donen a continuació han estat seleccionats de llistes més extenses de la IUPAP [4] i l'ISO [5.p]. Vegeu també les *International tables for Crystallography*, volum A [62].

Nom	Símbol	Definició	Unitat SI	Notes
vector de reticle	$\mathbf{R}, \mathbf{R}_0$		m	
vectors fonamentals de translació del reticle	$\mathbf{a}_1; \mathbf{a}_2; \mathbf{a}_3,$ $\mathbf{a}; \mathbf{b}; \mathbf{c}$	$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$	m	1
vector (circular) del reticle recíproc	$\mathbf{G}$	$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi m$	$\text{m}^{-1}$	2
vectors (circulars) fonamentals de translació del reticle recíproc	$\mathbf{b}_1; \mathbf{b}_2; \mathbf{b}_3,$ $\mathbf{a}^*; \mathbf{b}^*; \mathbf{c}^*$	$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_k = 2\pi\delta_{ik}$	$\text{m}^{-1}$	3
longituds de la cel·la unitat	$a; b; c$		m	
angles de la cel·la unitat	$\alpha; \beta; \gamma$		rad, 1	
longituds inverses de la cel·la unitat	$a^*; b^*; c^*$		$\text{m}^{-1}$	
angles inversos de la cel·la unitat	$\alpha^*; \beta^*; \gamma^*$		$\text{rad}^{-1}, 1$	

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
coordenades fraccionàries	$x; y; z$	$x = X/a$	1	4
factor de dispersió atòmica	$f$	$f = E_a/E_e$	1	5
factor d'estructura amb índexs $h, k, l$	$F(h, k, l)$	$F = \sum_{n=1}^N f_n e^{2\pi i(hx_n + ky_n + lz_n)}$	1	6
espaïat reticular	$d$		m	
angle de Bragg	$\theta$	$n\lambda = 2d \sin\theta$	1, rad	
ordre de reflexió	$n$		1	
paràmetres d'ordre				
— de curt abast	$\sigma$		1	
— de llarg abast	$s$		1	
vector de Burgers	$\mathbf{b}$		m	
vector de posició d'una partícula	$\mathbf{r}, \mathbf{R}_j$		m	7
vector de posició d'equilibri d'un ió	$\mathbf{R}_0$		m	
vector de desplaçament d'un ió	$\mathbf{u}$	$\mathbf{u} = \mathbf{R} - \mathbf{R}_0$	m	
factor de Debye-Waller	$B, D$		1	
nombre d'ona angular de Debye	$q_D$		$\text{m}^{-1}$	
freqüència angular de Debye	$\omega_D$		$\text{s}^{-1}$	
paràmetre de Grüneisen	$\gamma, \Gamma$	$\gamma = \alpha V / \kappa C_V$	1	8
constant de Madelung <sup>#</sup>	$\alpha, \mathcal{M}$	$E_{\text{coul}} = \frac{\alpha N_A z_+ z_- e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0}$	1	
densitat d'estats	$N_E$	$N_E = dN(E)/dE$	$\text{J}^{-1} \text{m}^{-3}$	9
densitat [espectral] de modes de vibració	$N_\omega, g$	$N_\omega = dN(\omega)/d\omega$	$\text{s m}^{-3}$	10
tensor resistivitat	$\rho_{ik}$	$\mathbf{E} = \boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{j}$	$\Omega \text{ m}$	
tensor conductivitat	$\sigma_{ik}$	$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\rho}^{-1}$	$\text{S m}^{-1}$	
tensor conductivitat tèrmica	$\lambda_{ik}$	$\mathbf{J}_q = -\boldsymbol{\lambda} \cdot \text{grad } T$	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	
resistivitat residual	$\rho_R$		$\Omega \text{ m}$	
temps de relaxació	$\tau$	$\tau = l/v_F$	s	11
coeficient de Lorenz	$L$	$L = \lambda/\sigma T$	$\text{V}^2 \text{K}^{-2}$	
coeficient de Hall	$A_H, R_H$	$\mathbf{E} = \boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{j} + R_H(\mathbf{B} \times \mathbf{j})$	$\text{m}^3 \text{C}^{-1}$	
força termoelectrònica	$E$		V	12
coeficient de Peltier	$\Pi$		V	12
coeficient de Thomson	$\mu, (\tau)$		$\text{V K}^{-1}$	
funció de treball	$\Phi$	$\Phi = E_\infty - E_F$	J	13

# En la definició de la constant de Madelung,  $E_{\text{coul}}$  és l'energia de Coulomb. (N. de l'ed.)

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
densitat en nombre, concentració en nombre	$n; p$		$\text{m}^{-3}$	14
energia interbanda	$E_g$		J	15
energia d'ionització del donador	$E_d$		J	15
energia d'ionització de l'acceptor	$E_a$		J	15
energia de Fermi	$E_F, \varepsilon_F$		J	15
vector d'ona circular, vector de propagació	$\mathbf{k}; \mathbf{q}$	$k = 2\pi/\lambda$	$\text{m}^{-1}$	16
funció de Bloch	$u_k(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = u_k(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$	$\text{m}^{-3/2}$	17
densitat de càrrega electrònica	$\rho$	$\rho(\mathbf{r}) = -e\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$	$\text{C m}^{-3}$	17, 18
massa eficaç	$m^*$		kg	19
mobilitat <sup>#</sup>	$\mu$	$\mu = v_{\text{arrosseg}}/E$	$\text{m}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	19
raó de mobilitat	$b$	$b = \mu_n/\mu_p$	1	
coeficient de difusió	$D$	$dN/dt = -DA(dn/dx)$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	19
longitud de difusió	$L$	$L = \sqrt{D\tau}$	m	19, 20
temperatura característica [de Weiss]	$\theta, \theta_W$		K	
temperatura de Curie	$T_C$		K	
temperatura de Néel	$T_N$		K	

1)  $n_1, n_2$  i  $n_3$  són enters.  $a, b$  i  $c$  s'anomenen també *constants de reticle*.

2)  $m$  és enter.

3) Els vectors del reticle recíproc es defineixen de vegades per  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_k = \delta_{ik}$ .

4)  $X$  indica la coordenada de dimensió longitud.

5)  $E_a$  i  $E_c$  indiquen les amplituds de dispersió per a l'àtom i l'electró aïllat, respectivament.

6)  $N$  és el nombre d'àtoms de la cel·la unitat.

7) Per tal de distingir entre els vectors de posició de l'electró i de l'ió, s'usen minúscules i majúscules, respectivament. El subíndex  $j$  es refereix a la partícula  $j$ .

8)  $\alpha$  és el coeficient de dilatació cúbica;  $V$ , el volum;  $\kappa$ , la compressibilitat isotèrmica, i  $C_V$ , la capacitat calorífica a volum constant.

9)  $N(E)$  és el nombre total d'estats amb energia electrònica menor que  $E$  dividit pel volum.

10)  $N(\omega)$  és el nombre total de modes de vibració amb freqüència menor que  $\omega$  dividit pel volum.

11) Aquesta definició s'aplica a electrons en metalls;  $l$  és el recorregut lliure mitjà i  $v_F$  la velocitat de l'electró a l'esfera de Fermi.

12) La substància a la qual s'aplica el símbol s'indica com a subíndex.

13)  $E_\infty$  és l'energia de l'electró en repòs a distància infinita.

14) Les densitats en nombre concretes s'indiquen com a subíndexs:  $n_n, n_o$  ( $n$ ) per a electrons;  $n_p, n_a, \sigma p$  per a forats;  $n_d$  per a donadors;  $n_a$  per a acceptadors;  $n_i$  ( $n_i^2 = n_+ n_-$ ) per a densitat en nombre intrínseca.

15) La unitat comunament emprada per a aquesta magnitud és el eV.

16) Per a partícules s'usa  $\mathbf{k}$  i per a fonons,  $\mathbf{q}$ .

<sup>#</sup> En la definició de mobilitat de la versió anglesa,  $v_{\text{arrosseg}}$  ('velocitat d'arrossegament') es representa  $v_{\text{drift}}$  (N. de l'ed.)

- 17)  $\psi(r)$  és una funció d'ona monoelèctronica.  
 18) La densitat de càrrega total s'obté sumant la de tots els electrons.  
 19) Per a indicar electrons i forats, es poden usar el subíndex  $n$  i el subíndex  $p$ , o bé  $-i$  i  $+$ , respectivament.  
 20)  $D$  és el coeficient de difusió i  $\tau$ , el temps de vida.

### SÍMBOLS PER A PLANS I DIRECCIONS EN CRISTALLS

índexs de Miller de la cara d'un cristall, o d'un pla net únic	$(h, k, l)$ o $(h_1, h_2, h_3)$
índexs de reflexió de Bragg en el conjunt de plans nets paral·lels $(h, k, l)$	$h, k, l$ o $h_1, h_2, h_3$
índexs d'un conjunt de totes les cares o plans nets d'un cristall simètricament equivalents	$\{h, k, l\}$ o $\{h_1, h_2, h_3\}$
índexs d'una direcció del reticle (eixos de zona)	$[u, v, w]$
índexs d'un conjunt de direccions de reticles simètricament equivalents	$\langle u, v, w \rangle$

En cada cas, en substituir els símbols alfabètics per nombres s'acostuma a ometre les comes. Un nombre negatiu per a un pla o cara del cristall, o per a una direcció específica, s'indica amb una ratlleta damunt el nombre.

#### Exemple

$(\bar{1}10)$  indica els plans paral·lels  $h = -1, k = +1, l = 0$ .

#### I) Símbols del reticle cristal·lí

primitiu	P
centrat a les cares	F
centrat al cos	I
centrat a la base	A; B; C
romboèdric	R

#### II) Símbols de Herman-Mauguin d'operacions de simetria

Operacions	Símbol	Exemples
rotació $n$ -ària	$n$	1; 2; 3; 4; 6
inversió $n$ -ària	$\bar{n}$	$\bar{1}; \bar{2}; \bar{3}; \bar{4}; \bar{6}$
caragolament $n$ -ari	$n_k$	2 <sub>1</sub> ; 3 <sub>1</sub> ; 3 <sub>2</sub> ; ...
reflexió	$m$	
lliscament	$a; b; c; n; d$	

## 2.9. TERMODINÀMICA ESTADÍSTICA

Els noms i els símbols que es presenten a continuació estan d'acord amb els recomanats per la IUPAP [4] i l'ISO [5.i].

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
nombre d'entitats	$N$		1	
densitat en nombre d'entitats, concentració en nombre	$C, n$	$C = N/V$	$\text{m}^{-3}$	
constant d'Avogadro	$L, N_A$	$L = N/n$	$\text{mol}^{-1}$	1
constant de Boltzmann	$k, k_B$		$\text{J K}^{-1}$	
constant [molar] dels gasos	$R$	$R = Lk$	$\text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1}$	
vector posició molecular	$\mathbf{r}(x, y, z)$		m	
vector velocitat molecular	$\mathbf{c}(c_x, c_y, c_z), \mathbf{c} = d\mathbf{r}/dt$ $\mathbf{u}(u_x, u_y, u_z)$		$\text{m s}^{-1}$	
vector de quantitat de moviment molecular	$\mathbf{p}(p_x, p_y, p_z) \mathbf{p} = m\mathbf{c}$		$\text{kg m s}^{-1}$	
funció de distribució d'un component de la velocitat	$f(c_x)$	$f = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{mc_x^2}{2kT}\right)$	$\text{m}^{-1} \text{s}$	
funció de distribució de la velocitat	$F(c)$	$F = 4\pi c^2 \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{mc^2}{2kT}\right)$	$\text{m}^{-1} \text{s}$	
velocitat mitjana	$\bar{c}, \bar{u}, \langle c \rangle, \langle u \rangle$	$\bar{c} = \int cF(c)dc$	$\text{m s}^{-1}$	
coordenada generalitzada	$q$		(m)	2
quantitat de moviment generalitzada	$p$	$p = \partial L / \partial \dot{q}$	$(\text{kg m s}^{-1})$	2
volum a l'espai de fases	$\Omega$	$\Omega = (1/h) \int p dq$	1	
probabilitat	$P$		1	
pes estadístic, degeneració	$g, d, W, \omega, \beta$		1	3
nombre [acumulatiu] d'estats	$N, W$		1	
densitat d'estats	$\rho(E)$	$\rho(E) = dN/dE$	$\text{J}^{-1}$	
funció de partició: suma d'estats:				
molècula aïllada	$q, z$	$q = \sum_i g_i \exp(-\varepsilon_i/kT)$	1	4
col·lectiu canònic, sistema canònic	$Q, Z$		1	
col·lectiu microcanònic	$\Omega, z$		1	
col·lectiu gran canònic	$\Xi$		1	
nombre de simetria	$\sigma, s$		1	
paràmetre de temperatura inversa	$\beta$	$\beta = 1/kT$	$\text{J}^{-1}$	
temperatura característica	$\Theta, \theta$		K	5
activitat absoluta	$\lambda$	$\lambda_B = \exp(\mu_B/RT)$	1	6

- 1)  $n$  és la *quantitat de substància* o *quantitat química*.
- 2) Si  $q$  és una longitud,  $p$  és una quantitat de moviment, tal com indiquen les unitats entre parèntesis. En la definició de  $p$ ,  $L$  indica el lagrangiana.
- 3)  $\beta$  s'usa generalment per al pes estadístic d'espín.
- 4)  $\varepsilon_i$  indica l'energia del nivell molecular  $i$ .
- 5) Les temperatures característiques concretes s'indiquen amb subíndexs; per exemple, rotacional  $\Theta_r = hc\tilde{B}/k$ , vibracional  $\Theta_v = hc\tilde{\nu}/k$ , de Debye  $\Theta_D = hc\tilde{\nu}_D/k$ , d'Einstein  $\Theta_E = hc\tilde{\nu}_E/k$ .
- 6) La definició s'aplica a les entitats B.  $\mu_B$  és el potencial químic; vegeu la p. 72.

## 2.10. QUÍMICA GENERAL

El símbols donats per la IUPAP [4] i per l'ISO [5.e, 5.i] concorden amb les recomanacions que es donen aquí.

Nom	Símbol	Definició	Unitat SI	Notes
nombre d'entitats (p. ex., molècules, àtoms, ions, unitats fórmula)	$N$		1	
quantitat [de substància], quantitat química	$n$	$n_B = N_B/L$	mol	1, 2
constant d'Avogadro	$L, N_A$		mol <sup>-1</sup>	
massa de l'àtom, massa atòmica	$m_a, m$		kg	
massa d'una entitat (molècula, unitat fórmula)	$m_i, m$		kg	3
constant de massa atòmica	$m_u$	$m_u = m_a(^{12}\text{C})/12$	kg	4
massa molar	$M$	$M_B = m/n_B$	kg mol <sup>-1</sup>	2, 5
massa molecular relativa (massa molar relativa, pes molecular)	$M_r$	$M_r = m_i/m_u$	1	6
massa atòmica relativa, (pes atòmic)	$A_r$	$A_r = m_a/m_u$	1	6
volum molar	$V_m$	$V_{m,B} = V/n_B$	m <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup>	2, 5
fracció en massa	$w$	$w_j = m_j/\sum m_i$	1	7
fracció en volum	$\phi$	$\phi_j = V_j/\sum V_i$	1	7, 8
fracció molar, fracció en quantitat, fracció en nombre	$x, y$	$x_B = n_B/\sum n_A$	1	2, 9
pressió [total]	$p, P$		Pa	10
pressió parcial	$p_B$	$p_B = y_B p$	Pa	11
concentració en massa (densitat en massa)	$\gamma, \rho$	$\gamma_j = m_j/V$	kg m <sup>-3</sup>	7, 12, 13

Nom	Símbol	Definició	Unitat SI	Notes
concentració en nombre, densitat en nombre d'entitats	$C, n$	$C_B = N_B/V$	$m^{-3}$	2, 12, 14
concentració en quantitat, concentració	$c$	$c_B = n_B/V$	$\text{mol m}^{-3}$	2, 12, 15
solubilitat	$s$	$s_B = c_B$ (solució saturada)	$\text{mol m}^{-3}$	2
molalitat [d'un solut]	$m, b$	$m_B = n_B/m_A$	$\text{mol kg}^{-1}$	2, 16
concentració superficial	$\Gamma$	$\Gamma_B = n_B/A$	$\text{mol m}^{-2}$	2
coeficient estequiomètric	$\nu$		1	17
avançament de la reacció, extensió	$\xi$	$n_B = n_{B,0} + \nu_B \xi$	mol	2, 18
grau de reacció	$\alpha$		1	19

- 1) L'expressió de *substància* es pot substituir per l'especificació de l'entitat de què es tracta.

#### Exemple

Quan la quantitat de  $O_2$  és igual a 3 mols,  $n(O_2) = 3$  mol, llavors la quantitat de  $\frac{1}{2}O_2$  és igual a 6 mols,  $n(\frac{1}{2}O_2) = 6$  mol. Així  $n(\frac{1}{2}O_2) = 2n(O_2)$ . Vegeu també la discussió de la p. 70.

- La definició es refereix a les entitats B, que sempre s'han d'indicar mitjançant un subíndex o entre parèntesis, per exemple,  $n_B$  o  $n(B)$ .
- Una *unitat fórmula* no és cap unitat, sinó una entitat constituïda per un grup d'àtoms tal com és escrit a la fórmula química. Vegeu-ne exemples a la p. 68.
- $m_u$  és igual a la unitat de massa atòmica unificada, de símbol u, és a dir,  $m_u = 1$  u (vegeu la secció 3.7). En bioquímica, aquesta unitat s'anomena *dalton* (pronunciat «dàlton»), de símbol Da, si bé ni el nom ni el símbol no han estat aprovats per la CGPM.
- La definició s'aplica a substàncies pures, on  $m$  és la massa total i  $V$ , el volum total. Tanmateix, hom pot definir també les magnituds corresponents d'una mescla amb  $m/n$  i  $V/n$ , on  $n = \sum_i n_i$ . Aquestes magnituds s'anomenen *massa molar mitjana* i *volum molar mitjà*, respectivament.
- Per a molècules,  $M_r$  és la massa molecular relativa o pes molecular; per a àtoms,  $M_r$  és la massa atòmica relativa o pes atòmic, i es pot usar el símbol  $A_r$ .  $M_r$  també es pot anomenar *massa molar relativa*,  $M_{r,B} = M_B/M^\circ$ , on  $M^\circ = 1 \text{ g mol}^{-1}$ . Els pesos atòmics estàndard, recomanats per la IUPAC, figuren a la taula de la secció 6.2, p. 120-122.
- La definició es refereix al component  $j$ .
- $V_j$  i  $V_i$  són els volums dels components corresponents abans de ser mesclats.
- Per a fases condensades s'usa  $x$  i per a mescles gasoses es pot usar  $y$ .
- Les pressions s'expressen sovint en la unitat bar, que no és una unitat SI (1 bar =  $10^5$  Pa). La pressió estàndard és  $p^\circ = 1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$  (vegeu les p. 79, 143 i segona de la guarda posterior). Les pressions baixes s'expressen sovint en mil·libars (1 mbar =  $10^{-3}$  bar = 100 Pa).
- El símbol i la definició es refereixen a molècules B, que cal que siguin especificades. En el cas dels gasos reals (no ideals), costa definir la pressió parcial. Alguns autors consideren que l'equació donada és una definició operacional; una opció alternativa és considerar la pressió parcial de B com la pressió exercida per les molècules B.
- $V$  és el volum de la mescla.
- En la ciència dels polímers, el símbol  $c$  s'usa freqüentment per a la concentració en massa.
- En el cas de les mescles es prefereix emprar el terme *concentració en nombre* i el símbol  $C$ .
- La unitat  $\text{mol dm}^{-3}$  és la que se sol emprar per a la concentració en quantitat. *Concentració en*

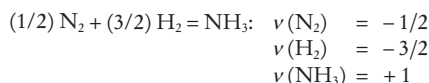
quantitat és l'escurçament de *concentració en quantitat de substància*. (La Divisió de Química Clínica de la IUPAC recomana que la concentració en quantitat de substància s'escurci a *concentració de substància*.) El mot *concentració* es pot usar sol quan no hi hagi perill de confusió. El símbol [B] es fa servir sovint per a representar la concentració d'entitats B. De vegades aquesta magnitud s'anomena també *molaritat*. Per exemple, una solució d'1 mol dm<sup>-3</sup> es diu «una solució 1 molar», indicada per «solució 1 M». Per tant, M es considera freqüentment com un símbol de mol dm<sup>-3</sup>.

- 16) En la definició,  $m_B$  indica la molalitat del solut B i  $m_A$  la massa del dissolvent A, de manera que es fa ús del mateix símbol amb dos significats diferents. Per a evitar tota confusió de notació, es pot emprar el símbol  $b$  per a la molalitat.

La solució de molalitat 1 mol/kg és anomenada ocasionalment «solució 1 molal» i es designa «solució 1  $m$ »; no obstant això, el símbol  $m$  no hauria de ser considerat com a símbol de la unitat mol kg<sup>-1</sup>.

- 17) El coeficient estequiomètric es defineix segons l'equació de la reacció. És negatiu per als reactants i positiu per als productes. Els valors dels coeficients estequiomètrics depenen de com s'escriu la reacció.

*Exemple*



Una manera simbòlica d'escriure una equació química general és

$$0 = \sum \nu_j B_j$$

on  $B_j$  designa una entitat que participa en la reacció. En el cas de sistemes amb diverses reaccions convé escriure les equacions químiques de manera matricial

$$A\mathbf{v} = \mathbf{0}$$

on  $A$  és la matriu de conservació (o fórmula) d'elements  $A_{ij}$  que representen el nombre d'àtoms de l'element  $i$  en l'entitat (reactant o producte) component de reacció  $j$ , i  $\mathbf{v}$  és la matriu dels coeficients estequiomètrics, amb elements  $\nu_{jk}$  que són els coeficients estequiomètrics de l'entitat component de reacció  $j$  en la reacció  $k$ . Quan hi ha  $N_e$  espècies reactants en un sistema format per  $N_e$  elements,  $A$  resulta ser una matriu  $N_e \times N_r$ . La nul·lilitat d'aquesta matriu,  $N(A) = N_e - \text{rang}(A)$ , dóna el nombre de reaccions químiques independents,  $N_r$ , i la matriu  $N_e \times N_r$  dels coeficients estequiomètrics,  $\mathbf{v}$ , es pot determinar com l'espai nul de  $A$ .  $\mathbf{0}$  és una matriu zero de  $N_e \times N_r$  [63].

- 18)  $n_{B,0}$  és la quantitat de B quan  $\xi = 0$ . Una definició més general seria  $\Delta\xi = \Delta n_B / \nu_B$ . L'extensió d'una reacció també depèn de com és escrita l'equació de la reacció, però és independent de l'entitat de l'equació de reacció que es pren per a la definició.

*Exemple*

Per a la reacció de la nota 17, quan  $\Delta\xi = 2$  mol, implica que  $\Delta n(\text{N}_2) = -1$  mol,  $\Delta n(\text{H}_2) = -3$  mol i  $\Delta n(\text{NH}_3) = +2$  mol.

Aquesta magnitud fou introduïda originàriament amb el nom de *degré d'avancement* ('grau d'avançament') per De Donder.

- 19) Per a determinades reaccions se solen emprar termes com *grau de dissociació*, *grau d'ionització*, etcètera.



## ALTRES SÍMBOLS I CONVENCIONS EN QUÍMICA

### I) Símbols per a partícules i reaccions nuclears

neutró	n	helió	h
protó	p	partícula alfa	$\alpha$
deuteró	d	electró	e
tritó	t	fotó	$\gamma$
muó positiu	$\mu^+$	muó negatiu	$\mu^-$

La càrrega elèctrica de les partícules es pot indicar afegint el superíndex  $+$ ,  $-$  o  $^0$ ; per exemple,  $p^+$ ,  $n^0$ ,  $e^-$ , etc. Quan el símbol p i el símbol e s'usen sense indicació de la càrrega, es refereixen al protó positiu i a l'electró negatiu, respectivament.

El significat de l'expressió simbòlica que indica una reacció nuclear ha de ser el següent:

$$\text{núclid inicial} \left( \begin{array}{c} \text{partícules o quàntums} \\ \text{entrants} \end{array}, \begin{array}{c} \text{partícules o quàntums} \\ \text{sortints} \end{array} \right) \text{núclid final}$$

#### Exemples



### II) Símbols químics dels elements

Els símbols químics dels elements són (en la major part dels casos) derivats dels seus noms llatins, i consten d'una o de dues lletres que sempre s'han d'escriure amb lletres rodones. Només per als elements de nombre atòmic més gran de 103, els símbols sistemàtics consten de tres lletres (vegeu la nota 6 de la taula de la secció 6.2, p. 123). En la taula de la secció 6.2, p. 120-122, es dona la llista completa dels símbols químics dels elements. El símbol no va seguit d'un punt, excepte al final d'una frase.

#### Exemples

I, U, Pa, C

Els símbols poden tenir significats diversos:

a) Poden representar un àtom de l'element. Per exemple, Cl pot indicar un àtom de clor amb 17 protons i 18 o 20 neutrons (que donen una massa de 35 o 37),

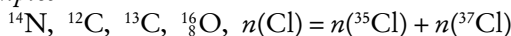
sense precisar cap diferència. La seva massa té de mitjana 35,452 7 u en les mostres terrestres.

b) El símbol, a manera taquigràfica, pot indicar una mostra de l'element. Per exemple, Fe pot indicar una mostra de ferro i He una mostra de gas heli.

El terme *núclid* implica un àtom de nombre atòmic (nombre de protons) i nombre màssic (nombre de nucleons) especificats. Els núclids que tenen el mateix nombre atòmic però diferent nombre màssic s'anomenen *núclids isotòpics* o *isòtops*. Els núclids que tenen el mateix nombre màssic però diferent nombre atòmic s'anomenen *núclids isobàrics* o *isòbars*.

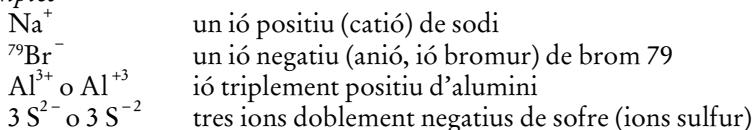
Un núclid es pot precisar col·locant el nombre màssic com a superíndex a l'esquerra del símbol de l'element. Si es vol, el nombre atòmic també es pot posar com a subíndex a l'esquerra, encara que això no és habitual. Si no hi figura cap superíndex a l'esquerra, es considera que el símbol tot sol representa la mescla natural d'isòtops.

*Exemples*



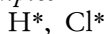
El nombre de càrrega iònica s'indica amb un superíndex a la dreta, o mitjançant el signe sol si la càrrega és igual a 1.

*Exemples*



La posició del superíndex de la dreta també es fa servir per a donar una altra informació: els estats electrònics excitats s'indiquen amb un asterisc.

*Exemples*



Els nombres d'oxidació s'assenyalen amb xifres romanes positives o negatives o amb zero (vegeu també l'apartat IV més avall).

*Exemples*



En resum, les posicions i els significats dels índexs del símbol d'un element són els següents:

superíndex a l'esquerra	nombre màssic
subíndex a l'esquerra	nombre atòmic
superíndex a la dreta	nombre de càrrega, nombre d'oxidació, símbol d'excitació
subíndex a la dreta	nombre d'àtoms per entitat (vegeu l'apartat III, més avall)

### III) Fórmules químiques

Les fórmules químiques representen entitats formades per més d'un àtom (molècules, ions complexos, grups d'àtoms, etc.).

#### Exemples

$N_2$ ,  $P_4$ ,  $C_6H_6$ ,  $CaSO_4$ ,  $PtCl_4^{2-}$ ,  $Fe_{0,91}S$

També poden indicar, de manera taquigràfica, una mostra de la substància química corresponent.

#### Exemples

$CH_3OH$  metanol  
 $\rho(H_2SO_4)$  densitat de l'àcid sulfúric

El nombre d'àtoms d'una entitat s'indica amb un subíndex a la dreta (s'omet el nombre 1). Els grups d'àtoms també es poden reunir entre parèntesis. Les entitats es poden especificar mitjançant la fórmula corresponent, sovint multiplicada per un factor. Les càrregues dels ions complexos i el símbol d'excitació s'afegeixen com a superíndexs a la dreta de la fórmula completa. Per tal de fer palesa la natura de radical lliure d'algunes entitats s'incorpora un punt al símbol.

#### Exemples

$H_2O$	una molècula d'aigua, aigua
$\frac{1}{2}O_2$	mitja molècula d'oxigen
$Zn_3(PO_4)_2$	una unitat fórmula de fosfat de zinc, fosfat de zinc
$2MgSO_4$	dues unitats fórmula de sulfat de magnesi
$\frac{1}{5}KMnO_4$	un cinquè d'una unitat fórmula de permanganat de potassi
$\frac{1}{2}SO_4^{2-}$	una meitat d'un ió sulfat
$(CH_3)^{\cdot}$	radical lliure metil
$CH_3\dot{C}HCH_3$	radical isopropil
$NO_2^*$	molècula de diòxid de nitrogen excitada electrònicament

En els exemples anteriors,  $\frac{1}{2}\text{O}_2$ ,  $\frac{1}{2}\text{KMnO}_4$  i  $\frac{1}{2}\text{SO}_4^{2-}$  són artificials, en el sentit que no poden existir aquestes fraccions de molècula. No obstant això, de vegades és convenient especificar entitats d'aquesta manera en calcular quantitats de substància; vegeu l'apartat V més avall.

Els estats electrònics específics d'entitats (àtoms, molècules, ions) es poden indicar mitjançant el símbol del terme electrònic entre parèntesis (vegeu la secció 2.6). Els estats rotacionals i vibracionals es poden especificar donant els nombres quàntics corresponents.

#### Exemples

$\text{Hg}(^3\text{P}_1)$	un àtom de mercuri a l'estat triplet P-u
$\text{HF}(v = 2, J = 6)$	una molècula de fluorur d'hidrogen a l'estat vibracional $v = 2$ i l'estat rotacional $J = 6$
$\text{H}_2\text{O}^+(^2\text{A}_1)$	un ió molecular d'aigua a l'estat doblet A-u

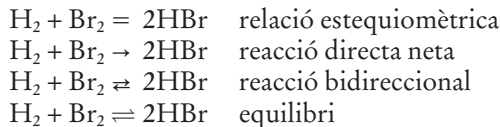
Les fórmules químiques es poden escriure de maneres diferents, d'acord amb la informació que portin, tal com s'indica a continuació:

Fórmula	Informació	Exemple per a l'àcid làctic
empírica	només la proporció estequiomètrica	$\text{CH}_2\text{O}$
molecular	d'acord amb la massa molecular	$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_3$
estructural	disposició estructural dels àtoms	$\text{CH}_3\text{CHOHCOOH}$
desenvolupada	projecció d'àtoms i enllaços	
estereoquímica	ordenació estereoquímica	

Hi ha altres convencions per a escriure les fórmules químiques que són descrites en les referències [22, 23].

#### IV) Equacions de les reaccions químiques

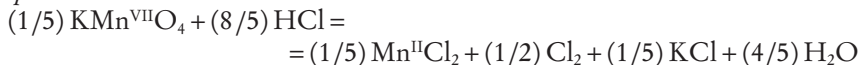
Els símbols que relacionen els reactants i els productes en l'equació d'una reacció química tenen els significats següents:



També es fa servir una sola sageta per a indicar una reacció elemental, tal com  $H \cdot + Br_2 \rightarrow HBr + Br \cdot$ . En aquest cas, per tant, cal indicar clarament que aquest és el significat atribuït al símbol.

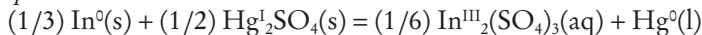
Les equacions redox sovint s'escriuen de manera que el valor absolut del coeficient estequiomètric d'electrons transferits (que normalment no figura en l'equació global) sigui igual a u.

*Exemple*



Anàlogament, la reacció d'una cel·la electroquímica se sol escriure de manera que el nombre de càrrega de la reacció de la cel·la sigui igual a u.

*Exemple*



(els símbols entre parèntesis indiquen l'estat físic; vegeu l'apartat VI més avall).

## V) Quantitat de substància i especificació d'entitats

La magnitud *quantitat de substància* o *quantitat química* (*Stoffmenge*, en alemany) ha estat emprada pels químics per molt de temps sense un nom apropiat. S'hi referien simplement com a «nombre de mols». Aquest costum s'ha d'abandonar, ja que és erroni confondre el nom d'una magnitud física amb el nom d'una unitat (de la mateixa manera que seria erroni emprar «nombre de metres» com a sinònim de *longitud*). La quantitat de substància és proporcional al nombre d'entitats elementals indicades d'aquesta substància; el factor de proporcionalitat és el mateix per a totes les substàncies i és l'invers de la constant d'Avogadro. Les entitats elementals es poden elegir tal com convingui; no necessàriament han de ser partícules individuals físicament reals. Com que la quantitat de substància, i totes les magnituds físiques que en deriven, depenen d'aquesta elecció, és essencial explicitar les entitats per tal d'evitar ambigüitats.

*Exemples*

$n_{\text{Cl}}, n(\text{Cl})$	quantitat de Cl, quantitat d'àtoms de clor
$n(\text{Cl}_2)$	quantitat de $\text{Cl}_2$ , quantitat de molècules de clor
$n(\text{H}_2\text{SO}_4)$	quantitat [d'entitats] de $\text{H}_2\text{SO}_4$
$n(\frac{1}{5}\text{KMnO}_4)$	quantitat [d'entitats] de $\frac{1}{5}\text{KMnO}_4$
$M(\text{P}_4)$	massa molar de $\text{P}_4$ (tetrafòsfor)
$c_{\text{HCl}}, c(\text{HCl}), [\text{HCl}]$	concentració en quantitat de HCl
$A(\text{MgSO}_4)$	conductivitat molar [d'entitats sulfat de magnesi] de $\text{MgSO}_4$
$A(\frac{1}{2}\text{MgSO}_4)$	conductivitat molar [d'entitats] de $\frac{1}{2}\text{MgSO}_4$
$n(\frac{1}{5}\text{KMnO}_4) = 5n(\text{KMnO}_4)$	
$\lambda(\frac{1}{2}\text{Mg}^{2+}) = \frac{1}{2}\lambda(\text{Mg}^{2+})$	
$[\frac{1}{2}\text{H}_2\text{SO}_4] = 2[\text{H}_2\text{SO}_4]$	

(Vegeu també els exemples de la [secció 3.2](#), p. 96.)

Noteu que «quantitat de sofre» és una expressió ambigua, perquè pot indicar  $n(\text{S})$ ,  $n(\text{S}_8)$  o  $n(\text{S}_2)$ , etc. En alguns casos, expressions anàlogues són menys ambigües. Així, per als compostos l'entitat generalment involucrada és la molècula o l'entitat fórmula comuna, i per als metalls sòlids ho és l'àtom.

*Exemple*

«2 mols d'aigua» significa  $n(\text{H}_2\text{O}) = 2$  mol; «0,5 mols de clorur de sodi» significa  $n(\text{NaCl}) = 0,5$  mol; «3 mil·limols de ferro» significa  $n(\text{Fe}) = 3$  mmol, però cal evitar aquestes expressions sempre que puguin comportar ambigüitat.

No obstant això, en l'equació  $pV = nRT$  i en les equacions on participen propietats col·ligatives, l'entitat implicada en la definició de  $n$  ha de ser una partícula individual capaç de translació independent (una molècula entera per a un gas), sense que tingui importància la natura d'aquesta partícula.

**VI) Estats d'agregació**

El següents símbols d'una, dues o tres lletres són emprats per a representar els estats d'agregació de les espècies químiques [1,j]. Les lletres s'afegeixen a la fórmula entre parèntesis, escrites amb lletres rodones i sense punt al final.

g	gas o vapor	fl	fase fluida
l	líquid		(p. ex., gas o líquid)
s	sòlid	cr	crystal·lí
cd	fase condensada	cl	crystal·lí líquid <sup>#</sup>
	(p. ex., sòlid o líquid)	vit	substància vítria

<sup>#</sup> En català, el símbol de cristall líquid, lc ('liquid crystal'), es pot escriure també cl. (N. de l'ed.)

a, ads	espècie adsorbida en un substrat	aq	solució aquosa
mon	forma monomèrica	aq, ∞	solució aquosa a dilució infinita
pol	forma polimèrica		
sln	solució	am	sòlid amorf

*Exemples*

HCl(g)	clorur d'hidrogen a l'estat gasós
$C_V(\text{fl})$	capacitat calorífica d'un fluid a volum constant
$V_m(\text{cl})$	volum molar d'un cristall líquid
$U(\text{cr})$	energia interna d'un sòlid cristal·lí
$\text{MnO}_2(\text{am})$	diòxid de manganès com a sòlid amorf
$\text{MnO}_2(\text{cr, I})$	diòxid de manganès en la forma cristal·lina I
$\text{NaOH}(\text{aq})$	solució aquosa d'hidròxid de sodi
$\text{NaOH}(\text{aq, } \infty)$	solució aquosa a dilució infinita
$\Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O, l})$	entalpia estàndard de formació de l'aigua líquida

Els símbols g, l, per a indicar fase gas, fase líquida, etc., de vegades també es posen com a superíndexs a la dreta; els símbols de lletres gregues  $\alpha$ ,  $\beta$ , es poden usar d'una manera similar per a indicar una fase  $\alpha$ , una fase  $\beta$ , etc., en la notació general.

*Exemples*

$V_m^l, V_m^s$	volum molar de la fase líquida, ...de la fase sòlida
$S_m^\alpha, S_m^\beta$	entropia molar de la fase $\alpha$ , ...de la fase $\beta$

**2.11. TERMODINÀMICA QUÍMICA**

Els noms i els símbols de les magnituds d'ús més general que es donen aquí són també recomanats per la IUPAP [4] i per l'ISO [5.e, 5.i]. Es pot trobar més informació a [1.d, 1.j, 24].

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
calor	$q, Q$	J	1	1
treball	$w, W$	J	J	1
energia interna	$U$	$\Delta U = q + w$	J	1
entalpia	$H$	$H = U + pV$	J	
temperatura	$T$		K	
termodinàmica				
temperatura Celsius	$\theta, t$	$\theta/^\circ\text{C} = T/\text{K} - 273,15$	$^\circ\text{C}$	2
entropia	$S$	$dS = dq_{\text{rev}}/T$	$\text{J K}^{-1}$	

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
energia de Helmholtz (funció de Helmholtz)	$A$	$A = U - TS$	J	3
energia de Gibbs (funció de Gibbs)	$G$	$G = H - TS$	J	
funció de Massieu	$J$	$J = -A/T$	J K <sup>-1</sup>	
funció de Planck	$Y$	$Y = -G/T$	J K <sup>-1</sup>	
tensió superficial	$\gamma, \sigma$	$\gamma = (\partial G/\partial A_s)_{T,p}$	J m <sup>-2</sup> , N m <sup>-1</sup>	
magnitud $X$ molar	$X_m, (\bar{X})$	$X_m = X/n$	(varia)	4, 5
magnitud $X$ específica	$x$	$x = X/m$	(varia)	4, 5
coeficient de pressió	$\beta$	$\beta = (\partial p/\partial T)_V$	Pa K <sup>-1</sup>	
coeficient de pressió relativa	$\alpha_p$	$\alpha_p = (1/p) (\partial p/\partial T)_V$	K <sup>-1</sup>	
compressibilitat				
— isotèrmica	$\kappa_T$	$\kappa_T = -(1/V) (\partial V/\partial p)_T$	Pa <sup>-1</sup>	
— isoentròpica	$\kappa_S$	$\kappa_S = -(1/V) (\partial V/\partial p)_S$	Pa <sup>-1</sup>	
coeficient de dilatació lineal	$\alpha_l$	$\alpha_l = (1/l) (\partial l/\partial T)$	K <sup>-1</sup>	
coeficient de dilatació cúbica	$\alpha, \alpha_V, \gamma$	$\alpha = (1/V) (\partial V/\partial T)_p$	K <sup>-1</sup>	6
capacitat calorífica				
— a pressió constant	$C_p$	$C_p = (\partial H/\partial T)_p$	J K <sup>-1</sup>	
— a volum constant	$C_V$	$C_V = (\partial U/\partial T)_V$	J K <sup>-1</sup>	
raó de capacitats calorífiques	$\gamma, (\kappa)$	$\gamma = C_p/C_V$	1	
coeficient de Joule-Thomson	$\mu, \mu_{JT}$	$\mu = (\partial T/\partial p)_H$	K Pa <sup>-1</sup>	
coeficient del virial				
— segon	$B$	$\left\{ \begin{array}{l} pV_m = RT(1 + B/V_m \\ \quad + C/V_m^2 + \dots) \end{array} \right.$	m <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup>	
— tercer	$C$		m <sup>6</sup> mol <sup>-2</sup>	
coeficients de Van der Waals	$a$ $b$	$(p + a/V_m^2)(V_m - b) = RT$	J m <sup>3</sup> mol <sup>-2</sup> m <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup>	7 7
factor de compressió (factor de compressibilitat)	$Z$	$Z = pV_m/RT$	1	
magnitud $X$ molar parcial	$X_B, (\bar{X}_B)$	$X_B = (\partial X/\partial n_B)_{T,p,n_{j \neq B}}$	(varia)	8
potencial químic (energia de Gibbs molar parcial)	$\mu$	$\mu_B = (\partial G/\partial n_B)_{T,p,n_{j \neq B}}$	J mol <sup>-1</sup>	9
potencial químic estàndard	$\mu^\ominus, \mu^\circ$		J mol <sup>-1</sup>	10
activitat absoluta	$\lambda$	$\lambda_B = \exp(\mu_B/RT)$	1	9



<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
activitat (relativa)	$a$	$a_B = \exp\left[\frac{\mu_B - \mu_B^\ominus}{RT}\right]$	1	9, 11
entalpia molar parcial estàndard	$H_B^\ominus$	$H_B^\ominus = \mu_B^\ominus + TS_B^\ominus$	J mol <sup>-1</sup>	9, 10
entropia molar parcial estàndard	$S_B^\ominus$	$S_B^\ominus = -(\partial\mu_B^\ominus/\partial T)_p$	J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>	9, 10
energia de Gibbs estàndard de reacció (funció)	$\Delta_r G^\ominus$	$\Delta_r G^\ominus = \sum_B \nu_B \mu_B^\ominus$	J mol <sup>-1</sup>	10, 12, 13, 14
afinitat de reacció	$A, (\mathcal{A})$	$A = -(\partial G/\partial \xi)_{p,T}$ $= -\sum_B \nu_B \mu_B$	J mol <sup>-1</sup>	13
entalpia estàndard de reacció	$\Delta_r H^\ominus$	$\Delta_r H^\ominus = \sum_B \nu_B H_B^\ominus$	J mol <sup>-1</sup>	10, 12, 13, 14
entropia estàndard de reacció	$\Delta_r S^\ominus$	$\Delta_r S^\ominus = \sum_B \nu_B S_B^\ominus$	J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>	10, 12, 13
quocient de reacció	$Q$	$Q = \prod_B a_B^{\nu_B}$	1	15
constant d'equilibri constant d'equilibri — en pressions	$K^\ominus, K$ $K_p$	$K^\ominus = \exp(-\Delta_r G^\ominus/RT)$ $K_p = \prod_B p_B^{\nu_B}$	1 Pa <sup>Σν</sup>	10, 13, 16 13, 17
— en concentracions	$K_c$	$K_c = \prod_B c_B^{\nu_B}$	(mol m <sup>-3</sup> ) <sup>Σν</sup>	13, 17
— en molalitats	$K_m$	$K_m = \prod_B m_B^{\nu_B}$	(mol kg <sup>-1</sup> ) <sup>Σν</sup>	13, 17
fugacitat	$f, \tilde{p}$	$f_B = \lambda_B \lim_{p \rightarrow 0} (p_B/\lambda_B)_T$	Pa	9
coeficient de fugacitat	$\phi$	$\phi_B = f_B/p_B$	1	
constant de la llei de Henry	$k_{H,B}$	$k_{H,B} = \lim_{x_B \rightarrow 0} (f_B/x_B)$ $= (\partial f_B/\partial x_B)_{x_B=0}$	Pa	9, 18
coeficient d'activitat referent a la llei de Raoult	$f$	$f_B = a_B/x_B$	1	9, 19
referent a la llei de Henry				
— en molalitats	$\gamma_m$	$a_{m,B} = \gamma_{m,B} m_B/m^\ominus$	1	9, 20
— en concentracions	$\gamma_c$	$a_{c,B} = \gamma_{c,B} c_B/c^\ominus$	1	9, 20
— en fraccions molars	$\gamma_x$	$a_{x,B} = \gamma_{x,B} x_B$	1	9, 20

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
força iònica				
— en molalitats	$I_m, I$	$I_m = \frac{1}{2} \sum m_B z_B^2$	$\text{mol kg}^{-1}$	
— en concentracions	$I_c, I$	$I_c = \frac{1}{2} \sum c_B z_B^2$	$\text{mol m}^{-3}$	
coeficient osmòtic				
— en molalitats	$\phi_m$	$\phi_m = \frac{\mu_A^* - \mu_A}{RT M_A \sum m_B}$	1	
— en fraccions molars	$\phi_x$	$\phi_x = \frac{\mu_A - \mu_A^*}{RT \ln x_A}$	1	
pressió osmòtica	$\Pi$	$\Pi = c_B RT$	Pa	21

- 1)  $q > 0$  i  $w > 0$  indiquen un augment d'energia del sistema:  $\Delta U = q + w$ . Aquesta equació s'escriu de vegades com  $dU = \delta q + \delta w$ , on  $\delta$  indica que no es tracta d'una diferencial exacta.
- 2) De vegades aquesta magnitud s'anomena incorrectament «temperatura centígrada».
- 3) En química de superfícies convé de vegades fer servir el símbol  $F$  per a l'energia de Helmholtz, per tal d'evitar la confusió amb el símbol  $A$  emprat per a l'àrea.
- 4) La definició s'aplica a substàncies pures. Nogensmenys, el concepte de magnituds molars i específiques (vegeu la secció 1.4, p. 23) també es pot aplicar a mescles.
- 5)  $X$  és una magnitud extensiva. La unitat depèn de la magnitud. En el cas de magnituds molars, cal especificar-ne les entitats.

*Exemple*

$$\text{volum molar de B, } V_m(\text{B}) = V/n_B$$

- 6) Aquesta magnitud també s'anomena *coeficient de dilatació tèrmica* o, per a gasos, *coeficient d'expansió tèrmica*.
- 7) Per a un gas que compleixi l'equació d'estat de Van der Waals, que es dona en la definició, el segon coeficient del virial es relaciona amb els paràmetres  $a$  i  $b$  de l'equació de Van der Waals mitjançant
 
$$B = b - a/RT$$
- 8) El símbol es refereix a entitats B que cal especificar. Quan sigui necessari es pot emprar la barra a fi de distingir  $X$  molar parcial de la magnitud  $X$ .

*Exemple*

El volum molar parcial de  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  en solució aquosa s'escriu  $\bar{V}(\text{Na}_2\text{SO}_4, \text{aq})$  per tal de distingir-lo del volum de la solució  $V(\text{Na}_2\text{SO}_4, \text{aq})$ .

- 9) La definició s'aplica a entitats B que cal especificar.
- 10) Per a indicar «estàndard», s'utilitzen els símbols  $^\circ$  o  $^\circ$ . Ambdós són igualment acceptables. Les definicions d'estat estàndard es discuteixen més endavant (p. 78-79). Sempre que s'usi un potencial químic estàndard  $\mu^\circ$  o una constant d'equilibri estàndard  $K^\circ$  o una altra magnitud estàndard, cal especificar quin és l'estat estàndard.
- 11) L'equació que es dona en aquesta definició negligeix la dependència de l'activitat respecte de la pressió, tal com es fa sovint per a les fases condensades a pressió atmosfèrica. Una definició equivalent és  $a_B = \lambda_B/\lambda_B^\circ$ , on  $\lambda_B^\circ = \exp(\mu_B^\circ/RT)$ . La definició de  $\mu^\circ$  depèn de l'estat estàndard elegit; vegeu la secció IV, p. 78-79.
- 12) El símbol  $_\tau$  indica 'reacció' en general. En casos particulars,  $_\tau$  pot ser substituït per un altre símbol adient; per exemple,  $\Delta_\tau H^\circ$  indica l'entalpia molar estàndard de formació; vegeu la llista de subíndexs més endavant, a les p. 75-76.

- 13) Cal especificar a quina reacció es refereix aquesta magnitud.
- 14) Les entalpies de reacció (i les energies de reacció en general) es donen habitualment en  $\text{kJ mol}^{-1}$ . En la bibliografia antiga també és freqüent trobar  $\text{kcal mol}^{-1}$ , on  $1 \text{ kcal} = 4,184 \text{ kJ}$  (vegeu la p. 142).
- 15) Aquesta magnitud es refereix en general a un sistema que no està en equilibri.
- 16) Aquesta magnitud és igual al valor de  $Q$  a l'equilibri, quan l'afinitat és zero. És adimensional i el valor depèn de l'estat estàndard elegit, que cal especificar. L'ISO [5.i] i la Comissió de Termodinàmica de la IUPAC [24] recomana el símbol  $K^\circ$  i el nom *constant d'equilibri estàndard*, però alguns termodinàmics prefereixen el símbol  $K$  i el nom *constant d'equilibri termodinàmic*.
- 17) Aquestes magnituds en general no són adimensionals. Hom pot definir de manera anàloga una constant d'equilibri en termes de la fugacitat,  $K_p$ , etc. A pressions baixes  $K_p$  es relaciona amb  $K^\circ$  aproximadament mitjançant l'equació  $K^\circ \approx K_p / (p^\circ)^{\sum \nu}$ , i, anàlogament, en solucions diluïdes,  $K_c$  es relaciona amb  $K^\circ$  aproximadament per  $K^\circ \approx K_c / (c^\circ)^{\sum \nu}$ . Les relacions exactes inclouen coeficients de fugacitat o coeficients d'activitat [24].  
La constant d'equilibri de solució d'un electròlit (que descriu l'equilibri entre la fase sòlida en excés i els ions solvatats) s'anomena freqüentment *producte de solubilitat*, que se simbolitza  $K_{\text{sol}}$  o  $K_s$  (o, si cal, per  $K_{\text{sol}}^\circ$  o  $K_s^\circ$ ). D'una manera semblant, la constant d'equilibri de la dissociació d'un àcid s'escriu  $K_a$ , la de la hidròlisi d'una base,  $K_b$ , i la de la dissociació de l'aigua,  $K_w$ .
- 18) De vegades, la llei de Henry s'expressa en molalitats o concentracions, i llavors les unitats corresponents de la constant de la llei de Henry són  $\text{Pa kg mol}^{-1}$  o  $\text{Pa m}^3 \text{ mol}^{-1}$ , respectivament.
- 19) Aquesta magnitud es refereix a fases pures, a mescles de substàncies o a dissolvents.
- 20) Aquesta magnitud es refereix a soluts.
- 21) L'equació de la definició es refereix a solucions diluïdes ideals. Les entitats  $B$  que es mouen individualment són molècules, ions, etc., de solut, sense tenir-ne en compte la natura. La quantitat d'aquestes entitats s'expressa de vegades en *osmols* (que significa 'mol d'entitats osmòticament actives'), però es desaconsella l'ús d'aquesta unitat.

## ALTRES SÍMBOLS I CONVENCIONS EN TERMODINÀMICA QUÍMICA

A [24] es pot trobar una descripció més extensa d'aquest tema.

### I) *Símbols emprats com a subíndexs per a indicar un procés químic o una reacció química*

Aquests símbols s'han d'escriure amb lletres rodones, sense punt final.

vaporització, evaporació (líquid $\rightarrow$ gas)	vap
sublimació (sòlid $\rightarrow$ gas)	sub
fusió (sòlid $\rightarrow$ líquid)	fus
transició (entre dues fases)	trs
mescla de fluids o mixtió de fluids	mix
solució (d'un solut en un solvent)	sol
dilució (d'una solució)	dil

adsorció	ads
desplaçament	dpl
immersió	imm
reacció en general	r
atomització	at
reacció de combustió	c
reacció de formació	f

## II) *Superíndexs recomanats*

estàndard	⊕, °
substància pura	*
dilució infinita	∞
ideal	id
complex activat, estat de transició	‡
magnitud d'excés	E

## III) *Exemples d'ús d'aquests símbols*

Els subíndexs emprats per a indicar un procés químic, llistats a l'apartat I, s'han de col·locar com a subíndexs dels símbols  $\Delta$ , per tal d'indicar que es tracta de la variació d'una magnitud termodinàmica extensiva associada al procés.

### *Exemple*

$\Delta_{\text{vap}}H = H(\text{g}) - H(\text{l})$ , per a l'entalpia de vaporització, una magnitud extensiva proporcional a la quantitat de substància vaporitzada.

En general, la magnitud més útil és el canvi dividit per la quantitat de substància transferida, que cal indicar amb un subíndex  $_m$  addicional.

### *Exemple*

$\Delta_{\text{vap}}H_m$  per a l'entalpia molar de vaporització.

Tanmateix, el subíndex  $_m$  s'omet sovint, particularment quan el lector pot deduir a partir de les unitats que es tracta d'una magnitud molar.

### *Exemple*

$\Delta_{\text{vap}}H = 40,7 \text{ kJ mol}^{-1}$  per a  $\text{H}_2\text{O}$  a 373,15 K i 1 atm.

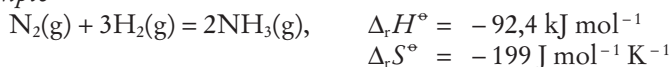
El subíndex que especifica el canvi s'escriu de vegades al costat del símbol de la magnitud en comptes de després de  $\Delta$ , de manera que la magnitud anterior s'escriuria  $\Delta H_{\text{vap}, m}$  o senzillament  $\Delta H_{\text{vap}}$ , però no es recomana aquesta forma.

El subíndex  $r$  s'usa per tal d'indicar canvis relacionats amb una *reacció química*. Encara que símbols com  $\Delta_r H$  haurien d'indicar l'entalpia integral de reacció,  $\Delta_r H = H(\xi_2) - H(\xi_1)$ , en la pràctica aquest símbol s'usa habitualment per a indicar el canvi dividit per la quantitat transferida, és a dir, el canvi per unitat d'extensió de la reacció, definit per l'equació

$$\Delta_r H = \sum_B \nu_B H_B = (\partial H / \partial \xi)_{T,p}$$

En donar valors numèrics a aquestes magnituds, és essencial especificar l'equació de la reacció estequiomètrica per tal de definir l'extensió de la reacció  $\xi$  i els valors dels coeficients estequiomètrics  $\nu_B$ .

*Exemple*



El  $\text{mol}^{-1}$  en les unitats identifica les magnituds de l'exemple com un canvi per unitat d'extensió de la reacció. Es poden anomenar *entalpia* i *entropia molar de reacció* i, si convé, es pot afegir al símbol un subíndex  $m$  per tal d'emfasitzar la diferència respecte a les magnituds integrals.

Les *magnituds estàndard de reacció* són especialment importants. S'expressen mitjançant les equacions

$$\begin{aligned} \Delta_r H^\circ & (= \Delta_r H_m^\circ = \Delta H_m^\circ) = \sum_B \nu_B H_B^\circ \\ \Delta_r S^\circ & (= \Delta_r S_m^\circ = \Delta S_m^\circ) = \sum_B \nu_B S_B^\circ \\ \Delta_r G^\circ & (= \Delta_r G_m^\circ = \Delta G_m^\circ) = \sum_B \nu_B \mu_B^\circ \end{aligned}$$

Els símbols entre parèntesis són possibles opcions. En vista de la varietat d'estils habitualment emprats, cal especificar acuradament la notació d'aquests símbols. La relació amb l'afinitat de la reacció és

$$-A = \Delta_r G = \Delta_r G^\circ + RT \ln \left( \prod_B a_B^{\nu_B} \right)$$

i la relació amb la constant d'equilibri estàndard és  $\Delta_r G^\circ = -RT \ln K^\circ$ .

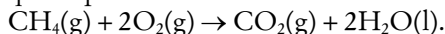
El terme *combustió* i el símbol *c* indiquen l'oxidació completa d'una substància. Per a la definició d'oxidació completa de substàncies que continguin elements diferents de C, H i O, vegeu [64]. L'equació de la reacció corresponent s'escriu de manera que el coeficient estequiomètric  $\nu$  de la substància sigui  $-1$ .

*Exemple*

L'entalpia estàndard de combustió del metà gasós és

$$\Delta_c H^\circ (\text{CH}_4, \text{g}, 298,15 \text{ K}) = -890,3 \text{ kJ mol}^{-1},$$

que implica la reacció



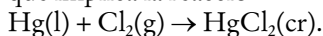
El terme *formació* i el símbol *f* indiquen la formació de la substància a partir dels elements en el seu estat de referència (generalment, l'estat més estable de cada element a la temperatura escollida i a pressió estàndard). L'equació de la reacció corresponent s'escriu de manera que el coeficient estequiomètric  $\nu$  de la substància sigui  $+1$ .

*Exemple*

L'entropia estàndard de formació del clorur de mercuri II cristal·lí és

$$\Delta_f S^\circ (\text{HgCl}_2, \text{cr}, 298,15 \text{ K}) = -154,3 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1},$$

que implica la reacció



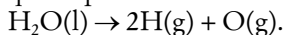
El terme *atomització*, símbol *at*, indica un procés en el qual una substància se separa en els seus àtoms constituents en l'estat fonamental en fase gasosa. L'equació de reacció corresponent s'escriu de manera que el coeficient estequiomètric  $\nu$  de la substància sigui  $-1$ .

*Exemple*

L'energia (interna) estàndard d'atomització de l'aigua líquida és

$$\Delta_{\text{at}} U^\circ (\text{H}_2\text{O}, \text{l}) = 625 \text{ kJ mol}^{-1},$$

que implica la reacció



#### IV) *Estats estàndard* [1.j, 24]

El potencial químic estàndard de la substància B a la temperatura  $T$ ,  $\mu_B^\circ(T)$ , és el valor del potencial químic en condicions estàndard, especificades tal com s'indica tot seguit. S'accepten tres estats estàndard definits de diferent manera.

*Per a una fase gasosa.* L'estat estàndard per a una substància gasosa, pura o en una mescla gasosa, és l'estat (hipotètic) de la substància pura B en fase gasosa a

la pressió estàndard  $p = p^\circ$  i que es comporta com un gas ideal. El potencial químic estàndard es defineix:

$$\mu_B^\circ(T) = \lim_{p \rightarrow 0} [\mu_B(T, p, y_B, \dots) - RT \ln (y_B p / p^\circ)]$$

*Per a una fase pura, una mescla o un dissolvent, en els estats líquid o sòlid.* L'estat estàndard per a una substància líquida o sòlida, pura o en una mescla, o per a un dissolvent, és l'estat de la substància pura B en fase líquida o sòlida a la pressió estàndard  $p = p^\circ$ . El potencial químic estàndard es defineix:

$$\mu_B^\circ(T) = \mu_B^*(T, p^\circ)$$

*Per a un solut en solució.* Per a un solut en solució líquida o sòlida, l'estat estàndard fa referència al comportament diluït ideal del solut. És l'estat (hipotètic) del solut B a la molalitat estàndard  $m^\circ$ , la pressió estàndard  $p^\circ$  i que es comporta com una solució infinitament diluïda. El potencial químic estàndard es defineix:

$$\mu_B^\circ(T) = [\mu_B(T, p^\circ, m_B, \dots) - RT \ln (m_B / m^\circ)]^\circ$$

El potencial químic del solut B en funció de la molalitat  $m_B$  a pressió constant  $p = p^\circ$  s'expressa, doncs, de la manera següent:

$$\mu_B(m_B) = \mu_B^\circ + RT \ln (m_B \gamma_{m,B} / m^\circ)$$

De vegades s'usa com a variable la concentració (quantitat de substància)  $c$  en comptes de la molalitat  $m$ ; les equacions anteriors s'escriuen amb  $c$  substituint  $m$ . Ocasionalment s'usa la fracció molar  $x$  en lloc de  $m$ ; les equacions anteriors s'escriuen llavors amb  $x$  substituint  $m$ , i  $x^\circ = 1$ . Encara que l'estat estàndard d'un solut fa sempre referència al comportament diluït ideal, la definició d'estat estàndard i el valor del potencial químic estàndard  $\mu^\circ$  són diferents segons que s'usi com a variable la molalitat  $m$ , la concentració  $c$  o la fracció molar  $x$ .

### V) Pressions, molalitats i concentracions en l'estat estàndard

En principi, hom pot escollir qualsevol valor per a la pressió estàndard  $p^\circ$ , la molalitat estàndard  $m^\circ$  i la concentració estàndard  $c^\circ$ , si bé cal especificar l'elecció. Per exemple, en tabular dades adients per a la química a alta pressió, pot ser convenient escollir un valor de  $p^\circ = 1$  kbar.

En la pràctica, tanmateix, l'elecció més comuna és

$$\begin{aligned} p^\circ &= 10^5 \text{ Pa} (= 1 \text{ bar}) \\ m^\circ &= 1 \text{ mol kg}^{-1} \\ c^\circ &= 1 \text{ mol dm}^{-3} \end{aligned}$$

Aquests valors de  $m^\circ$  i  $c^\circ$  són acceptats universalment. El valor per a  $p^\circ$ ,  $10^5$  Pa, és el recomanat per la IUPAC des del 1982 [1.j] per a tabular dades termodinàmiques. Abans del 1982 la pressió estàndard emprada habitualment era  $p^\circ = 101\,325$  Pa (= 1 atm, anomenada *pressió estàndard*). En qualsevol cas, cal especificar el valor de  $p^\circ$ .

La conversió de valors corresponents a diferents  $p^\circ$  es descriu a [65]. El valor més recent de  $p^\circ = 10^5$  Pa s'anomena de vegades *pressió de l'estat estàndard*.

## VI) Propietats termodinàmiques

Els valors de moltes magnituds termodinàmiques representen propietats químiques fonamentals de substàncies i serveixen per a càlculs posteriors. Hi ha tabulacions extenses, com per exemple [66-68]. Cal posar una cura especial en la presentació de les dades i les incerteses corresponents [25, 26].

## 2.12. CINÈTICA QUÍMICA

Les recomanacions aquí donades es basen en recomanacions prèvies de la IUPAC [1.c, 1.k, 27], que no concorden completament. Les recomanacions corresponents a fotoquímica es descriuen a [28] i per a les que afecten la presentació de dades de cinètica química vegeu també [69].

Nom	Símbol	Definició	Unitat SI	Notes
velocitat de canvi [de la magnitud $X$ ]	$\dot{X}$	$\dot{X} = dX/dt$	(varia)	1
velocitat de conversió	$\xi$	$\xi = d\xi/dt$	$\text{mol s}^{-1}$	2
velocitat de canvi de concentració (deguda a una reacció química)	$r_B, v_B$	$r_B = dc_B/dt$	$\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$	3, 4
velocitat de reacció (en concentració)	$v$	$v = \xi/V = v_B^{-1} dc_B/dt$	$\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$	2, 4
ordre parcial de reacció	$n_B, m_B$	$v = k \prod c_B^{n_B}$	1	5
ordre global de reacció	$n, m$	$n = \sum n_B$	1	
constant de velocitat, coeficient de velocitat	$k$	$v = k \prod c_B^{n_B}$	$(\text{m}^3 \text{mol}^{-1})^{n-1} \text{s}^{-1}$	6
constant de Boltzmann	$k, k_B$		$\text{J K}^{-1}$	
període de semidesintegració	$t_{1/2}$	$c(t_{1/2}) = c(0)/2$	s	
temps de relaxació	$\tau$		s	7



<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
energia d'activació [d'Arrhenius]	$E_a, E_A$	$E_a = RT^2 d \ln k / dT$	$\text{J mol}^{-1}$	8
factor preexponencial, factor de freqüència	$A$	$k = A \exp(-E_a/RT)$	$(\text{m}^3 \text{mol}^{-1})^n \text{s}^{-1}$	
volum d'activació	$\Delta^\ddagger V, \Delta V^\ddagger$	$\Delta^\ddagger V = -RT(\partial \ln k / \partial T)$	$\text{m}^3 \text{mol}^{-1}$	
radi d'esferes rígides	$r$		m	
diàmetre de col·lisió	$d$	$d_{AB} = r_A + r_B$	m	
secció eficaç de col·lisió	$\sigma$	$\sigma = \pi d_{AB}^2$	$\text{m}^2$	
velocitat relativa mitjana entre A i B	$\bar{c}_{AB}$	$\bar{c}_{AB} = (8kT/\pi\mu)^{1/2}$	$\text{m s}^{-1}$	9
freqüència de col·lisions — de A amb A	$z_A(A)$	$z_A(A) = \sqrt{2} C_A \sigma \bar{c}$	$\text{s}^{-1}$	10
— de A amb B	$z_A(B)$	$z_A(B) = C_B \sigma \bar{c}_{AB}$	$\text{s}^{-1}$	10
densitat de col·lisions, nombre de col·lisions — de A amb A	$Z_{AA}$	$Z_{AA} = C_A z_A(A)$	$\text{s}^{-1} \text{m}^{-3}$	11
— de A amb B	$Z_{AB}$	$Z_{AB} = C_A z_A(B)$	$\text{s}^{-1} \text{m}^{-3}$	11
factor de freqüència de col·lisions	$z_{AB}$	$z_{AB} = Z_{AB}/Lc_Ac_B$	$\text{m}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}$	11
recorregut lliure mitjà	$\lambda$	$\lambda = \bar{c}/z_A$	m	
paràmetre d'impacte	$b$		m	12
angle de dispersió	$\theta$		1, rad	13
secció eficaç diferencial	$I_{ji}$	$I_{ji} = d\sigma_{ji}/d\Omega$	$\text{m}^2 \text{sr}^{-1}$	14
secció eficaç total	$\sigma_{ji}$	$\sigma_{ji} = \int I_{ji} d\Omega$	$\text{m}^2$	14
matriu de dispersió	$S$		1	15
probabilitat de transició	$P_{ji}$	$P_{ji} =  S_{ji} ^2$	1	14, 15
entalpia estàndard d'activació	$\Delta^\ddagger H^\circ, \Delta H^\ddagger$		$\text{J mol}^{-1}$	16
energia interna estàndard d'activació	$\Delta^\ddagger U^\circ, \Delta U^\ddagger$		$\text{J mol}^{-1}$	16
entropia estàndard d'activació	$\Delta^\ddagger S^\circ, \Delta S^\ddagger$		$\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$	16
energia de Gibbs estàndard d'activació	$\Delta^\ddagger G^\circ, \Delta G^\ddagger$		$\text{J mol}^{-1}$	16
rendiment quàntic, rendiment fotoquímic	$\phi, \Phi$		1	17

1) Per exemple, velocitat de canvi de la pressió  $\dot{p} = dp/dt$ , per a la qual la unitat SI és  $\text{Pa s}^{-1}$ .

2) Cal especificar la reacció a la qual es refereix aquesta magnitud.

3) El símbol i la definició es refereixen a les entitats B.

4) Observeu que  $v_B$  i  $v$  es poden definir també en funció de la pressió parcial, de la concentració en nombre, de la concentració superficial, etc., amb definicions anàlogues. Si cal, les velocitats de reacció definides diferentment es poden distingir amb un subíndex, per exemple  $v_p = v_B^{-1} dp_B/dt$ ,

etcètera. Observeu que la velocitat de reacció només es pot definir per a reaccions d'estequiometria coneguda i independent del temps, en termes de llur equació de reacció, que s'ha d'explicitar. D'altra banda, la segona equació donada de la velocitat de reacció es dedueix de la primera només si el volum  $V$  és constant. Les derivades han de ser les degudes a la reacció química considerada; així, en sistemes oberts, tals com sistemes de flux, cal tenir en compte també els efectes deguts als processos d'entrada i de sortida.

- 5) El símbol es refereix al reactant B. Es pot emprar el símbol  $m$  en lloc de  $n$  quan aquest darrer pot donar lloc a confusió amb la  $n$  de quantitat de substància.
- 6) Les constants de velocitat  $k$  i els factors preexponencials  $A$  es donen habitualment en  $(\text{dm}^3 \text{ mol}^{-1})^{n-1} \text{ s}^{-1}$  o, en l'escala molecular, en  $(\text{cm}^3)^{n-1} \text{ s}^{-1}$  o bé en  $(\text{cm}^3 \text{ molècula}^{-1})^{n-1} \text{ s}^{-1}$ . Observeu que «molècula» no és una unitat, però moltes vegades s'inclou com a aclariment. Les constants de velocitat s'expressen freqüentment en logaritmes decimals.

#### Exemple

Per a una reacció de segon ordre

$$k = 10^{8.2} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1} \quad \text{o} \quad \log(k/\text{dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}) = 8,2$$

o bé

$$k = 10^{-12.6} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1} \quad \text{o} \quad \log(k/\text{cm}^3 \text{ s}^{-1}) = -12,6$$

- 7)  $\tau$  es defineix com el temps en el qual una pertorbació de la concentració disminueix fins a  $1/e$  del seu valor inicial.
- 8) Observeu que el terme *energia d'activació d'Arrhenius* només s'ha d'emprar per a la magnitud empírica definida en la [taula](#). També s'apliquen altres equacions empíriques amb «energies d'activació» diferents, com, per exemple,  $k(T) = A'T^n \exp(-E_a/RT)$ .  
El terme *energia d'activació* s'usa també per al llindar d'energia que apareix en el potencial electrònic (l'altura de la barrera d'energia electrònica). Per a aquesta «energia d'activació» és preferit el símbol  $E_0$  i el terme *energia llindar*, però comunament també s'usa  $E_a$ . A més a més,  $E_0$  pot incloure o no una correcció per a les energies de punt zero de reactants i estats de transició.  
Hom recomana, per tant, especificar exactament en cada context a quina energia d'activació es refereix i reservar el terme *energia d'activació [d'Arrhenius]* només i exactament per a la magnitud definida en la [taula](#).
- 9)  $\mu$  és la massa reduïda.
- 10)  $C$  indica la concentració numèrica.
- 11)  $Z_{AA}$  i  $Z_{AB}$  són el nombre total de col·lisions AA o AB per unitat de temps i de volum en un sistema que conté només molècules A, o bé dos tipus de molècules A i B, respectivament. Les col·lisions de tres cossos es poden tractar d'una manera semblant.
- 12) El paràmetre d'impacte  $b$  caracteritza una col·lisió individual entre dues partícules; es defineix com la distància de màxima aproximació que resultaria si les trajectòries de les partícules no fossin desviades per la col·lisió.
- 13)  $\theta = 0$  indica que no hi ha desviació.
- 14) En totes aquestes magnituds matricials, el primer índex es refereix al canal final i el segon al canal inicial;  $i$  i  $j$  indiquen els canals de reactants i de productes, respectivament, i  $\Omega$  l'angle sòlid;  $d\sigma_{ji}/d\Omega = (\text{flux de partícules dispersades per unitat d'angle sòlid})/(\text{flux de partícules incidents per unitat d'àrea})$ . La dispersió elàstica implica  $i = j$ . Tant  $I_{ji}$  com  $\sigma_{ji}$  depenen de l'energia total del moviment relatiu i es poden escriure  $I_{ji}(E)$  i  $\sigma_{ji}(E)$ .
- 15) La matriu de dispersió  $S$  s'usa en els estudis quàntics de la teoria de la dispersió;  $S_{ji}$  és igual a la relació (flux de probabilitat total dispersada en el canal  $j$ )/(flux de probabilitat total incident en el canal  $i$ ).  $S$  és una matriu unitària  $SS^\dagger = 1$ .  $P_{ji}$  és la probabilitat que els parelles de col·lisió incidents en el canal  $i$  surtin en el canal  $j$ .

- 16) Les magnituds  $\Delta^\ddagger H^\circ$ ,  $\Delta^\ddagger U^\circ$ ,  $\Delta^\ddagger S^\circ$  i  $\Delta^\ddagger G^\circ$  s'utilitzen en la teoria de l'estat de transició de la reacció química. Normalment s'utilitzen només a propòsit de reaccions elementals. L'equació que relaciona la constant de velocitat  $k$  amb aquestes magnituds és

$$k = \kappa(k_B T/h) \exp(-\Delta^\ddagger G^\circ/RT)$$

on  $k$  té les dimensions d'una constant de velocitat de primer ordre i s'obté multiplicant la constant d'ordre  $n$  per  $(c^\circ)^{n-1}$ ,  $\kappa$  és el coeficient de transmissió i  $\Delta^\ddagger G^\circ = \Delta^\ddagger H^\circ - T\Delta^\ddagger S^\circ$ . Malauradament, es prescindeix habitualment del símbol estàndard  $^\circ$  i aquestes magnituds s'acostumen a escriure  $\Delta H^\ddagger$ ,  $\Delta U^\ddagger$ ,  $\Delta S^\ddagger$  i  $\Delta G^\ddagger$ .

- 17) El rendiment quàntic  $\phi$  es defineix en general com segueix [28]:

$$\phi = \frac{\text{nombre d'esdeveniments definits}}{\text{nombre de fotons absorbits}}$$

Per a una reacció fotoquímica es pot definir:

$$\phi = \frac{\text{velocitat de conversió}}{\text{velocitat d'absorció de fotons}} = \frac{d\xi/dt}{dn_\gamma/dt}$$

### 2.13. ELECTROQUÍMICA

Els conceptes, la terminologia i els símbols electroquímics es descriuen més extensament a [1.i]. Per al camp de l'electroquímica dels semiconductors i la conversió fotoelectroquímica d'energia, vegeu [29], i per a la nomenclatura de la corrosió, vegeu [30].

Nom	Símbol	Definició	Unitat SI	Notes
càrrega elemental (càrrega del protó)	$e$		C	
constant de Faraday	$F$	$F = eL$	C mol <sup>-1</sup>	
nombre de càrrega d'un ió	$z$	$z_B = Q_B/e$	1	1
força iònica				
— en molalitats	$I_m, I$	$I_m = \frac{1}{2} \sum m_i z_i^2$	mol kg <sup>-1</sup>	
— en concentracions	$I_c, I$	$I_c = \frac{1}{2} \sum c_i z_i^2$	mol m <sup>-3</sup>	2
activitat iònica mitjana	$a_\pm$	$a_\pm = m_\pm \gamma_\pm / m^\circ$	1	3, 4
activitat d'un electròlit	$a(A_{\nu_+}, B_{\nu_-})$	$a(A_{\nu_+}, B_{\nu_-}) = a_\pm^{(\nu_+ + \nu_-)}$	1	3
molalitat iònica mitjana	$m_\pm$	$m_\pm^{(\nu_+ + \nu_-)} = m_+^{\nu_+} m_-^{\nu_-}$	mol kg <sup>-1</sup>	3
coeficient d'activitat iònica mitjana	$\gamma_\pm$	$\gamma_\pm^{(\nu_+ + \nu_-)} = \gamma_+^{\nu_+} \gamma_-^{\nu_-}$	1	3
nombre de càrrega de la reacció d'una cel·la electroquímica	$n, \nu_c, z$		1	5

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
diferència de potencial elèctric [d'una pila o cel·la galvànica] <sup>#</sup>	$\Delta V, U, E$	$\Delta V = V_D - V_E$	V	6
FEM, força electromotriu	$E$	$E = \lim_{I \rightarrow 0} \Delta V$	V	7
FEM estàndard, potencial estàndard de la reacció d'una cel·la electroquímica	$E^\circ$	$E^\circ = -\Delta_r G^\circ / nF$ $= (RT/nF) \ln K^\circ$	V	4, 8
potencial estàndard d'elèctrode	$E^\circ$		V	4, 9
FEM d'una cel·la, potencial de la reacció d'una cel·la electroquímica	$E$	$E = E^\circ - (RT/nF) \sum v_i \ln a_i$	V	10
pH	pH	$\text{pH} \approx -\log \left[ \frac{c(\text{H}^+)}{\text{mol dm}^{-3}} \right]$	1	11
potencial elèctric intern	$\phi$	$\nabla \phi = -E$	V	12
potencial elèctric extern	$\psi$	$\psi = Q/4\pi\epsilon_0 r$	V	13
potencial elèctric de superfície	$\chi$	$\chi = \phi - \psi$	V	
diferència de potencial de Galvani	$\Delta\phi$	$\Delta_a^\beta \phi = \phi^\beta - \phi^\alpha$	V	14
diferència de potencial de Volta	$\Delta\psi$	$\Delta_a^\beta \psi = \psi^\beta - \psi^\alpha$	V	15
potencial electroquímic	$\tilde{\mu}$	$\tilde{\mu}_B^\alpha = (\partial G / \partial n_B^\alpha)$	J mol <sup>-1</sup>	1, 16
corrent elèctric, intensitat de corrent elèctric	$I$	$I = dQ/dt$	A	17
densitat de corrent [elèctric]	$j$	$j = I/A$	A m <sup>-2</sup>	17
densitat de càrrega [superficial]	$\sigma$	$\sigma = Q/A$	C m <sup>-2</sup>	
constant de velocitat de la reacció d'elèctrode	$k$	$k_{\text{ox}} = I_a / (nFA \prod_i c_i^{n_i})$	(varia)	18, 19
coeficient de transferència de matèria, constant de velocitat de difusió	$k_d$	$k_{d,B} =  v_B  I_{1,B} / nFcA$	m s <sup>-1</sup>	1, 19
gruix de la capa de difusió	$\delta$	$\delta_B = D_B / k_{d,B}$	m	1
coeficient de transferència (electroquímica)	$\alpha$	$\alpha_c = \frac{- v RT}{nF} \frac{\partial \ln  I_c }{\partial E}$	1	17, 19
sobretensió, sobrepotencial	$\eta$	$\eta = E_I - E_{I=0} - IR_u$	V	19

<sup>#</sup> En la definició de diferència de potencial elèctric corresponent a la llengua anglesa,  $V_D$  i  $V_E$  (D 'dreta', E 'esquerra') es representen  $V_R$  i  $V_L$  (R 'right', L 'left'), respectivament. (Nota de l'ed.)

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Definició</i>	<i>Unitat SI</i>	<i>Notes</i>
potencial electrocinètic (potencial zeta)	$\zeta$		V	
conductivitat	$\kappa, (\sigma)$	$\kappa = j/E$	$\text{S m}^{-1}$	12, 20
constant de cel·la de conductivitat	$K_{\text{cell}}$	$K_{\text{cell}} = \kappa R$	$\text{m}^{-1}$	
conductivitat molar [d'un electròlit]	$\Lambda$	$\Lambda_{\text{B}} = \kappa/c_{\text{B}}$	$\text{S m}^2 \text{mol}^{-1}$	1, 21
mobilitat elèctrica	$u, (\mu)$	$u_{\text{B}} = v_{\text{B}}/E$	$\text{m}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	1, 22
conductivitat iònica, conductivitat molar d'un ió	$\lambda$	$\lambda_{\text{B}} =  z_{\text{B}}  F u_{\text{B}}$	$\text{S m}^2 \text{mol}^{-1}$	1, 23
nombre de transport	$t$	$t_{\text{B}} = j_{\text{B}}/\sum j_i$	1	1
radi invers de l'atmosfera iònica	$\kappa$	$\kappa = (2F^2 I_c / \epsilon R T)^{1/2}$	$\text{m}^{-1}$	24

- 1) La definició es refereix a les entitats B.
- 2) Per tal d'evitar confusions amb la intensitat del corrent catòdic, de símbol  $I_c$  (amb el subíndex en lletra rodona), per a designar la força iònica expressada en concentracions s'escriu simplement el símbol  $I$  i de vegades  $\mu$  (quan la intensitat del corrent s'indica amb  $I$ ).
- 3)  $\nu_+$  i  $\nu_-$  són els nombres de cations i d'anions per unitat fórmula d'un electròlit  $A_{\nu_+} B_{\nu_-}$ .

#### Exemple

Per a  $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$ ,  $\nu_+ = 2$  i  $\nu_- = 3$ .

$m_+$  i  $m_-$ , i  $\gamma_+$  i  $\gamma_-$  són les molalitats i els coeficients d'activitat del catió i de l'anió separatament. Si la molalitat de  $A_{\nu_+} B_{\nu_-}$  és  $m$ , llavors  $m_+ = \nu_+ m$  i  $m_- = \nu_- m$ . Per a la concentració iònica mitjana,  $c_{\pm}$ , s'aplica una definició similar en l'escala de les concentracions.

- 4) Per a indicar «estàndard» s'utilitzen els símbols ° o °. Ambdós són igualment acceptables.
- 5)  $n$  és el nombre d'electrons transferits d'acord amb la reacció de la cel·la (o reaccions de les semi-cel·les) tal com s'ha escrit;  $n$  és enter i positiu.
- 6)  $V_D$  i  $V_E$  són els potencials dels elèctrodes que figuren a la dreta i a l'esquerra, respectivament, del diagrama que representa la pila. Quan  $\Delta V$  és positiu, la càrrega positiva passa de l'esquerra a la dreta a través de la pila, i de la dreta a l'esquerra en el circuit exterior, si la pila és curtcircuitada.
- 7) La definició de FEM es discuteix més endavant, p. 88. El símbol  $E_{\text{FEM}}$  actualment no es recomana per a aquesta magnitud.<sup>#</sup>
- 8)  $\Delta_r G^\circ$  i  $K^\circ$  es refereixen a la reacció de la cel·la en la direcció en què té lloc la reducció a l'electrode de la dreta i l'oxidació a l'electrode de l'esquerra, en el diagrama que representa la pila o cel·la galvànica (vegeu més endavant, p. 86). (Recordeu l'artifici mnemònic «reducció a la dreta», consonant-consonant; «oxidació a l'esquerra», vocal-vocal.)
- 9) El *potencial estàndard d'una reacció d'electrode*, escurçat en *potencial estàndard d'electrode*, és el valor de la FEM estàndard d'una cel·la on té lloc a l'electrode de l'esquerra l'oxidació de l'hidrogen molecular a protons solvatats. Per exemple, el potencial estàndard de l'electrode  $\text{Zn}^{2+} | \text{Zn}$ , desig-

<sup>#</sup> En català, el símbol de força electromotriu,  $E_{\text{EMF}}$  ('*electromotive force*'), es pot escriure també  $E_{\text{FEM}}$ . (N. de l'ed.)

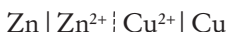
nat per  $E^\circ(\text{Zn}^{2+}|\text{Zn})$ , és la FEM de la cel·la on té lloc la reacció  $\text{Zn}^{2+}(\text{aq}) + \text{H}_2 \rightarrow 2\text{H}^+(\text{aq}) + \text{Zn}$  en condicions estàndard (vegeu la p. 87). En la referència [31] es discuteix el concepte de *potencial absolut d'electrode*.

- 10)  $\sum v_i \ln a_i$  es refereix a la reacció de la cel·la, amb  $v_i$  positiu per als productes i negatiu per als reactants; per a la reacció completa de la cel·la només intervien activitats iòniques mitjanes  $a_{\pm}$ .
- 11) La definició rigorosa de pH es discuteix més endavant, p. 88. El símbol pH és una excepció de les regles generals dels símbols de les magnituds físiques (p. 22), en la mesura que és un símbol de dues lletres i que sempre s'escriu amb lletres rodones.
- 12)  $E$  és la intensitat de camp elèctric en el si de la fase en qüestió.
- 13) Aquesta definició és un exemple concret per a una esfera conductora amb excés de càrrega  $Q$  i radi  $r$ .
- 14)  $\Delta\phi$  és la diferència de potencial elèctric entre punts en el si de les fases  $\alpha$  i  $\beta$ ; només es pot mesurar si les fases són de composició idèntica.
- 15)  $\Delta\psi$  és la diferència de potencial elèctric deguda a la càrrega present a les fases  $\alpha$  i  $\beta$ . Es pot mesurar o calcular mitjançant l'electrostàtica clàssica a partir de la distribució de càrrega.
- 16) El potencial químic està relacionat amb el potencial electroquímic per l'equació  $\mu_B^\alpha = \tilde{\mu}_B^\alpha - z_B F\phi^\alpha$ . Per a una espècie no carregada,  $z_B = 0$ , el potencial electroquímic és igual al potencial químic.
- 17)  $I, j$  i  $\alpha$  poden portar un dels subíndexs següents: <sub>a</sub> per a *anòdic*, <sub>c</sub> per a *catòdic*, <sub>e</sub> o <sub>o</sub> per a *bescanvi*, <sub>o</sub> i per a *límit*.  $I_a$  i  $I_c$  són les intensitats dels corrents parcials anòdic i catòdic. El càtode és l'electrode on té lloc la reducció i l'ànode l'electrode on té lloc l'oxidació.
- 18) Per a una reducció, la constant de velocitat  $k_{\text{red}}$  es pot definir anàlogament en funció de la intensitat del corrent catòdic  $I_c$ . Per a una reacció de primer ordre, la unitat SI és  $\text{m s}^{-1}$ .  $n_i$  és l'ordre de reacció respecte al component  $i$ .
- 19) Per a més informació sobre cinètica de reaccions d'electrode i sobre fenòmens de transport en sistemes electrolítics, vegeu [32, 33].
- 20) La *conductivitat* s'anomenava abans «conductància específica».
- 21) Per a la conductivitat molar s'utilitza sovint la unitat  $\text{S cm}^2 \text{mol}^{-1}$ .
- 22)  $v_B$  és la velocitat de les entitats B i  $E$  és la intensitat del camp elèctric dins de la fase considerada.
- 23) És important explicitar l'entitat a la qual es refereix la conductivitat molar; així, per exemple,  $\lambda(\text{Mg}^{2+}) = 2\lambda(\frac{1}{2}\text{Mg}^{2+})$ . Normalment se sol escollir l'entitat que és la fracció  $1/z_B$  d'un ió de càrrega  $z_B$  de manera que, per exemple, les conductivitats molars dels ions potassi, bari i lantani s'expressaran com  $\lambda(\text{K}^+)$ ,  $\lambda(\frac{1}{2}\text{Ba}^{2+})$  i  $\lambda(\frac{1}{3}\text{La}^{3+})$ .
- 24)  $\kappa$  apareix en la teoria de Debye-Hückel. La longitud de Debye,  $L_D = \kappa^{-1}$ , surt a la teoria de Gouy-Chapman i en la teoria de la càrrega espacial d'un semiconductor.  $I_c$  és la força iònica.

## CONVENCIONS REFERENTS ALS SIGNES DE LES DIFERÈNCIES DE POTENCIAL ELÈCTRIC, LES FORCES ELECTROMOTRIUS I EL POTENCIAL D'ELÈCTRODE<sup>1</sup>

### I) Diferència de potencial elèctric d'una pila o cel·la galvànica

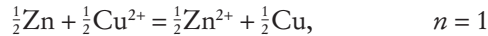
La pila s'ha de representar amb un diagrama, per exemple:



1. D'acord amb el Conveni d'Estocolm del 1953 [34].

Cal emprar una barra vertical simple (|) per a representar el límit de fase, una barra vertical discontinua (|) per a representar la unió entre líquids miscibles i una doble barra vertical discontinua (||) per a representar la unió líquida en la qual se suposa que s'ha eliminat el potencial d'unió líquida. La diferència de potencial elèctric, indicada per  $\Delta V$  o  $E$ , és igual en signe i magnitud al potencial elèctric del born conductor metàl·lic de la dreta menys el del born similar de l'esquerra. La FEM (força electromotriu), també indicada habitualment per  $E$ , és el valor límit de la diferència de potencial elèctric quan la intensitat del corrent que circula per la pila tendeix a zero i s'han establert tots els equilibris de transferència local de càrrega i els equilibris químics. Observeu que el símbol  $E$  s'utilitza sovint tant per a la diferència de potencial com per a la FEM, i això de vegades pot dur a confusió.

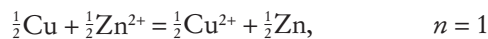
Si la reacció de la pila s'escriu:



o bé



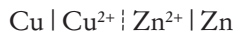
implica un diagrama de pila representat com abans, de manera que la reacció, tal com és escrita, té lloc quan l'electricitat positiva circula per la pila d'esquerra a dreta (i per tant, circula per la part exterior del circuit de dreta a esquerra). En aquest exemple, l'elèctrode de la dreta és positiu (llevat que la relació  $[\text{Cu}^{2+}]/[\text{Zn}^{2+}]$  sigui extremament petita), de manera que aquesta és la direcció del flux espontani del corrent quan els dos elèctrodes estan connectats. No obstant això, si la reacció s'escriu



o bé



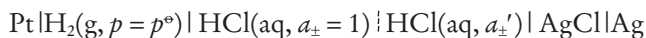
implica el diagrama



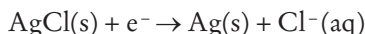
i la diferència de potencial elèctric de la pila així indicada serà negativa. Així doncs, el diagrama d'una pila es pot escriure de qualsevol de les dues maneres i, consegüentment, la diferència de potencial elèctric corresponent al diagrama podrà ser positiva o negativa.

## II) Potencial d'elèctrode (*potencial d'una reacció electròdica*)

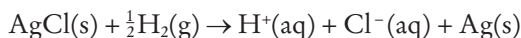
L'anomenat *potencial d'elèctrode* d'un elèctrode es defineix com la FEM d'una pila o cel·la en la qual l'elèctrode de l'esquerra és un elèctrode estàndard d'hidrogen i l'elèctrode de la dreta és l'elèctrode en qüestió. Per exemple, per a l'elèctrode plata / clorur de plata (escrit  $\text{Cl}^-(\text{aq})|\text{AgCl}|\text{Ag}$ ), la cel·la en qüestió és



En aquesta cel·la hi caldrà una unió líquida sempre que  $a_{\pm}'(\text{HCl})$  de la dreta sigui diferent de  $a_{\pm}(\text{HCl})$  de l'esquerra. La reacció que té lloc a l'elèctrode de plata / clorur de plata és



La reacció completa de la cel·la és



A l'estat estàndard de l'elèctrode d'hidrogen,  $p(\text{H}_2) = p^\circ = 10^5 \text{ Pa}$  i  $a_{\pm}(\text{HCl}) = 1$ , la FEM d'aquesta cel·la és el *potencial de l'elèctrode* de l'elèctrode de plata / clorur de plata. Si, a més, l'activitat mitjana del HCl a l'elèctrode de plata / clorur de plata  $a_{\pm}(\text{HCl}) = 1$ , llavors aquella FEM és igual a  $E^\circ$  d'aquest elèctrode. El potencial estàndard d'elèctrode per a  $\text{HCl}(\text{aq})|\text{AgCl}|\text{Ag}$  té el valor  $E^\circ = +0,22217 \text{ V}$  a 298,15 K. Per a  $p^\circ = 101325 \text{ Pa}$ , el potencial estàndard d'aquest elèctrode (i de qualsevol elèctrode que només tingui fases condensades) és incrementat en 0,17 mV; és a dir,

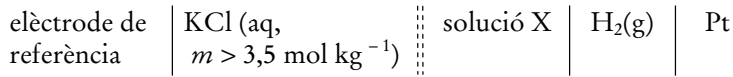
$$E^\circ(101325 \text{ Pa}) = E^\circ(10^5 \text{ Pa}) + 0,17 \text{ mV}$$

Un recull de potencials estàndard d'elèctrode, i la conversió d'aquests potencials a pressions estàndard diferents, es troba a [29]. Cal tenir en compte que en escriure una cel·la, la FEM de la qual representa un potencial d'elèctrode, és important posar sempre a l'esquerra l'elèctrode d'hidrogen.

## III) Definició operacional de pH

La definició conceptual de pH donada en la [taula](#) anterior se substitueix en la pràctica per la definició operacional següent. Per a una solució X, es mesura la FEM  $E(X)$  de la pila o cel·la galvànica



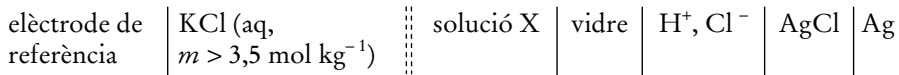


i també la FEM  $E(S)$  d'una pila que difereix d'aquesta només per la substitució de la solució X de  $\text{pH}(X)$  desconegut per una solució S de  $\text{pH}(S)$  estàndard. Aleshores, el  $\text{pH}$  desconegut es calcula mitjançant l'equació

$$\text{pH}(X) = \text{pH}(S) + (E_s - E_x)F/(RT \ln 10)$$

Definit així, el  $\text{pH}$  és adimensional. Els valors de  $\text{pH}(S)$  de diverses solucions patró a diferents temperatures es troben a [36]. L'estàndard de  $\text{pH}$  amb un valor de referència és una solució aquosa d'hidrogenftalat de potassi a una molalitat exacta de  $0,05 \text{ mol kg}^{-1}$ : a  $25^\circ\text{C}$  ( $298,15 \text{ K}$ ) té un  $\text{pH}$  de  $4,005$ .

En la pràctica, gairebé sempre es fa servir un elèctrode de vidre en lloc de l'elèctrode de  $\text{Pt} | \text{H}_2$ . Aleshores, la cel·la pren la forma



La solució de la dreta de l'elèctrode de vidre habitualment és una solució amortidora de  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  i  $\text{Na}_2\text{HPO}_4$  amb  $0,1 \text{ mol dm}^{-3}$  de  $\text{NaCl}$ . L'elèctrode de referència acostuma a ser un elèctrode de calomelans, un elèctrode de plata / clorur de plata o un elèctrode d'amalgama de tal·li / clorur de tal·li(I). La FEM d'aquesta cel·la depèn de la  $a(\text{H}^+)$  a la solució X de la mateixa manera que la de la cel·la amb l'elèctrode  $\text{Pt} | \text{H}_2$ , i per tant se segueix el mateix procediment.

En l'interval restringit de les solucions aquoses diluïdes que tenen una concentració inferior a  $0,1 \text{ mol dm}^{-3}$  i que no són ni fortament àcides ni alcalines ( $2 < \text{pH} < 12$ ), la definició anterior es pot escriure

$$\begin{aligned} \text{pH} &= -\log[\gamma_{\pm} c(\text{H}^+)/\text{mol dm}^{-3}] \pm 0,02 \\ &= -\log[\gamma_{\pm} m(\text{H}^+)/\text{mol kg}^{-1}] \pm 0,02 \end{aligned}$$

En aquesta fórmula,  $c(\text{H}^+)$  és la concentració en quantitat d'ió hidrogen  $\text{H}^+$ ,  $m(\text{H}^+)$  la molalitat corresponent i  $\gamma_{\pm}$  és el coeficient d'activitat iònica mitjana d'un electròlit uni-univalent típic en la solució, expressat en concentracions o en molalitats, segons calgui. Per a informació addicional sobre la definició de  $\text{pH}$ , vegeu [36].

## 2.14. QUÍMICA COL·LOÏDAL DE SUPERFÍCIES

Les recomanacions que es donen aquí estan basades en recomanacions més extenses de la IUPAC [1.e-1.h] i [37-39]. La caracterització dels catalitzadors és descrita a [40] i les magnituds relacionades amb macromolècules, a [41].

Nom	Símbol	Definició	Unitat SI	Notes
àrea superficial específica	$a, a_s, s$	$a = A/m$	$\text{m}^2 \text{kg}^{-1}$	
quantitat superficial de B, quantitat adsorbida de B	$n_B^s, a_B^s$		mol	1
excés superficial de B	$n_B^\sigma$		mol	2
concentració superficial d'excés de B	$\Gamma_B, (\Gamma_B^\sigma)$	$\Gamma_B = n_B^\sigma/A$	$\text{mol m}^{-2}$	2
concentració superficial total d'excés	$\Gamma, (\Gamma^\sigma)$	$\Gamma = \sum_i \Gamma_i$	$\text{mol m}^{-2}$	
àrea per molècula	$a, \sigma$	$a_B = A/N_B^\sigma$	$\text{m}^2$	3
àrea per molècula en una monocapa completa	$a_m, \sigma_m$	$a_{m,B} = A/N_{m,B}$	$\text{m}^2$	3
recobriment superficial	$\theta$	$\theta = N_B^\sigma/N_{m,B}$	1	3
angle de contacte	$\theta$		1, rad	
gruix d'una pel·lícula	$t, h, \delta$		m	
gruix d'una capa (superficial o interfacial)	$\tau, \delta, t$		m	
tensió superficial, tensió interfacial	$\gamma, \sigma$	$\gamma = (\partial G/\partial A)_{T,p}$	$\text{N m}^{-1}, \text{J m}^{-2}$	
tensió d'una pel·lícula	$\Sigma_i$	$\Sigma_i = 2\gamma_i$	$\text{N m}^{-1}$	4
gruix invers de la doble capa	$\kappa$	$\kappa = (2F^2 I_c / \epsilon RT)^{1/2}$	$\text{m}^{-1}$	
massa molar mitjana				
— en nombre	$M_n$	$M_n = \sum n_i M_i / \sum n_i$	$\text{kg mol}^{-1}$	
— en massa	$M_m$	$M_m = \sum n_i M_i^2 / \sum n_i M_i$	$\text{kg mol}^{-1}$	
— Z	$M_z$	$M_z = \sum n_i M_i^3 / \sum n_i M_i^2$	$\text{kg mol}^{-1}$	
coeficient de sedimentació	$s$	$s = v/a$	s	5
constant de Van der Waals	$\lambda$		J	
constant de Van der Waals retardada	$\beta, B$		J	
constant de Van der Waals-Hamaker	$A_H$		J	
pressió superficial	$\pi^s, \pi$	$\pi^s = \gamma^\sigma - \gamma$	$\text{N m}^{-1}$	6

1) El valor de  $n_B^s$  depèn del gruix assignat a la capa superficial.

2) Els valors de  $n_B^\sigma$  i  $\Gamma_B$  depenen del conveni emprat per a definir la posició de la superfície de Gibbs.

Corresponents a la quantitat d'excés de B o la concentració superficial de B respecte als valors que

s'aplicarien si cada una de les dues fases fos completament homogènia fins a la superfície de Gibbs. Vegeu [1.e] i també les recomanacions addicionals de més avall.

- 3)  $N_B^\sigma$  és el nombre de molècules adsorbides ( $N_B^\sigma = Ln_B^\sigma$ ) i  $N_{m,B}$  és el nombre de molècules adsorbides en una monocapa completa. Aquesta definició es refereix a les entitats B.
- 4) La definició s'aplica només a una pel·lícula simètrica, per a la qual les dues fases a ambdós costats de la pel·lícula són idèntiques, i  $\gamma_i$  és la tensió superficial d'una interfície pel·lícula/fase.
- 5) En la definició,  $v$  és la velocitat de sedimentació i  $a$  és l'acceleració de caiguda lliure o de centrifugació. El símbol del coeficient de sedimentació límit és  $[s]$ , el del coeficient de sedimentació reduït,  $s^\circ$ , i el del coeficient de sedimentació límit reduït,  $[s^\circ]$ . Per a més detalls, vegeu [1.e].
- 6) En la definició,  $\gamma^\circ$  és la tensió superficial de la superfície neta i  $\gamma$  la de la superfície recoberta.

### RECOMANACIONS ADDICIONALS

El superíndex  $^s$  indica les propietats d'una superfície o una capa interfacial. En el cas d'adsorció cal reemplaçar-lo pel superíndex  $^a$ .

#### Exemples

Energia de Helmholtz de la capa interfacial	$A^s$
quantitat de substància adsorbida	$n^a, n^s$
quantitat de $O_2$ adsorbit	$n^a(O_2), n^s(O_2)$ , o $n(O_2, a)$

El subíndex  $_m$  indica les propietats d'una monocapa.

#### Exemple

Àrea per molècula B d'una monocapa	$a_m(B)$
------------------------------------	----------

El superíndex  $^\sigma$  s'usa per a indicar una propietat superficial d'excés relativa a la superfície de Gibbs.

#### Exemple

quantitat superficial d'excés (o excés superficial de Gibbs de B)	$n_B^\sigma$
--	--------------

En general, els valors de  $\Gamma_A$  i  $\Gamma_B$  depenen de la posició elegida per a la superfície divisòria de Gibbs. Això no obstant, es poden definir dues magnituds  $\Gamma_B^{(A)}$  i  $\Gamma_B^{(n)}$  (i les corresponents  $n_B^{\sigma(A)}$  i  $n_B^{\sigma(n)}$ ) de manera que siguin independents d'aquesta elecció (vegeu [1.e]).  $\Gamma_B^{(A)}$  s'anomena *concentració superficial d'excés relativa de B respecte a A*, o simplement *adsorció relativa de B*; és el valor de  $\Gamma_B$  quan s'elegeix la superfície de manera que  $\Gamma_A = 0$ .  $\Gamma_B^{(n)}$  s'anomena *concentració superficial d'excés reduïda de B*, o simplement *adsorció reduïda de B*; és el valor de  $\Gamma_B$  quan s'elegeix la superfície de manera que la concentració superficial total d'excés  $\Gamma = \sum_i \Gamma_i = 0$ .

Les propietats de les fases ( $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ) es poden indicar mitjançant els superíndexs corresponents.

*Exemples*

tensió superficial de la fase $\alpha$	$\gamma^\alpha$
tensió interfacial entre les fases $\alpha$ i $\beta$	$\gamma^{\alpha\beta}$

Per als símbols de les magnituds termodinàmiques dividides per l'àrea superficial s'usen habitualment les minúscules corresponents; com a alternativa es pot usar un accent circumflex ( $\hat{\phantom{x}}$ ).

*Exemple*

entropia interfacial per unitat d'àrea	$s^s (= \hat{s}^s) = S^s/A$
--	-----------------------------

En química col·loidal s'usen les abreviatures següents (vegeu les sigles recomanades corresponents a les p. 161, 164 i 167):

c. c. c.	concentració crítica de coagulació ( <i>critical coagulation concentration</i> )
c. m. c.	concentració miscel·lar crítica ( <i>critical micellization concentration</i> )
p. i.	punt isoelèctric ( <i>isoelectric point</i> )
p. c. z.	punt de càrrega zero ( <i>point of zero charge</i> )

## 2.15. PROPIETATS DE TRANSPORT

Els noms i els símbols recomanats aquí estan d'acord amb els recomanats per la IUPAP [4] i l'ISO [5.n]. Es pot trobar més informació sobre fenòmens de transport en sistemes electroquímics a [32].

Nom	Símbol	Definició	Unitat SI	Notes
flux (d'una magnitud $X$ )	$J_X, J$	$J_X = A^{-1}dX/dt$	(varia)	<b>1</b>
velocitat de flux en volum	$q_v, \dot{V}$	$q_v = dV/dt$	$\text{m}^3 \text{s}^{-1}$	
velocitat de flux en massa	$q_m, \dot{m}$	$q_m = dm/dt$	$\text{kg s}^{-1}$	
coeficient de transferència de matèria	$k_d$		$\text{m s}^{-1}$	
velocitat de flux de calor	$\Phi$	$\Phi = dq/dt$	W	
flux de calor	$J_q$	$J_q = \Phi/A$	$\text{W m}^{-2}$	
conductància tèrmica	$G$	$G = \Phi/\Delta T$	$\text{W K}^{-1}$	
resistència tèrmica	$R$	$R = 1/G$	$\text{K W}^{-1}$	
conductivitat tèrmica	$\lambda, k$	$\lambda = J_q/(dT/dl)$	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	
coeficient de transferència de calor	$h, (k, K, \alpha)$	$h = J_q/\Delta T$	$\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$	
difusivitat tèrmica	$a$	$a = \lambda/\rho c_p$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	
coeficient de difusió	$D$	$D = -J_n/(dc/dl)$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	

En les definicions de les magnituds adimensionals s'utilitzen els símbols següents: massa ( $m$ ), temps ( $t$ ), volum ( $V$ ), àrea ( $A$ ), densitat ( $\rho$ ), velocitat ( $v$ ), longitud ( $l$ ), viscositat ( $\eta$ ), pressió ( $p$ ), acceleració de caiguda lliure ( $g$ ), coeficient de dilatació cúbica ( $\alpha$ ), temperatura ( $T$ ), tensió superficial ( $\gamma$ ), velocitat del so ( $c$ ), recorregut lliure mitjà ( $\lambda$ ), freqüència ( $f$ ), difusibilitat tèrmica ( $a$ ), coeficient de transferència de calor ( $h$ ), conductivitat tèrmica ( $k$ ), capacitat calorífica específica a pressió constant ( $c_p$ ), coeficient de difusió ( $D$ ), fracció molar ( $x$ ), coeficient de transferència de matèria ( $k_d$ ), permeabilitat ( $\mu$ ), conductivitat elèctrica ( $\kappa$ ) i densitat de flux magnètic ( $B$ ).

Nom	Símbol	Definició	Unitat SI	Notes
nombre de Reynolds	$Re$	$Re = \rho v l / \eta$	1	
nombre d'Euler	$Eu$	$Eu = \Delta p / \rho v^2$	1	
nombre de Froude	$Fr$	$Fr = v / (lg)^{1/2}$	1	
nombre de Grashof	$Gr$	$Gr = l^3 g \alpha \Delta T \rho^2 / \eta^2$	1	
nombre de Weber	$We$	$We = \rho v^2 l / \gamma$	1	
nombre de Mach	$Ma$	$Ma = v / c$	1	
nombre de Knudsen	$Kn$	$Kn = \lambda / l$	1	
nombre de Strouhal	$Sr$	$Sr = lf / v$	1	
nombre de Fourier	$Fo$	$Fo = at / l^2$	1	
nombre de Péclet	$Pe$	$Pe = vl / a$	1	
nombre de Rayleigh	$Ra$	$Ra = l^3 g \alpha \Delta T \rho / \eta a$	1	
nombre de Nusselt	$Nu$	$Nu = hl / k$	1	
nombre de Stanton	$St$	$St = h / \rho v c_p$	1	
nombre de Fourier per a transferència de matèria	$Fo^*$	$Fo^* = Dt / l^2$	1	2
nombre de Péclet per a transferència de matèria	$Pe^*$	$Pe^* = vl / D$	1	2
nombre de Grashof per a transferència de matèria	$Gr^*$	$Gr^* = l^3 g \left( \frac{\partial \rho}{\partial x} \right)_{T,P} \left( \frac{\Delta x \rho}{\eta} \right)$	1	2
nombre de Nusselt per a transferència de matèria	$Nu^*$	$Nu^* = k_d l / D$	1	2, 3
nombre de Stanton per a transferència de matèria	$St^*$	$St^* = k_d / v$	1	2
nombre de Prandtl	$Pr$	$Pr = \eta / \rho a$	1	
nombre de Schmidt	$Sc$	$Sc = \eta / \rho D$	1	
nombre de Lewis	$Le$	$Le = a / D$	1	
nombre de Reynolds magnètic	$Rm, Re_m$	$Rm = v \mu \kappa l$	1	
nombre d'Alfvén	$Al$	$Al = v (\rho \mu)^{1/2} / B$	1	
nombre de Hartmann	$Ha$	$Ha = Bl (\kappa / \eta)^{1/2}$	1	
nombre de Cowling	$Co$	$Co = B^2 / \mu \rho v^2$	1	

- 1) El flux de molècules cap a una superfície,  $J_N$ , determina tant la velocitat a la qual seria recoberta si cada molècula s'hi immobilitzés, com la velocitat d'efusió per un forat de la superfície. En estudiar l'exposició,  $\int J_N dt$ , d'una superfície a un gas, els especialistes de superfícies consideren útil emprar el producte pressió per temps com a mesura de l'exposició, ja que aquest producte és proporcional al flux en nombre,  $J_N$ , multiplicat pel temps,  $J_N t = (1/4) C \bar{v} t = (\bar{v}/4kT) p t$ , on  $C$  és la densitat en nombre de molècules,  $\bar{v}$  la seva velocitat mitjana,  $k$  la constant de Boltzmann i  $T$  la temperatura termodinàmica. La unitat *langmuir* (de símbol L) correspon a l'exposició d'una superfície a un gas a la pressió de  $10^{-6}$  torr durant 1 segon.
- 2) Aquesta magnitud s'aplica al transport de matèria en mescles binàries.
- 3) Per a aquesta magnitud s'ha emprat generalment el nom *nombre de Sherwood* i el símbol *Sh*.

## 3. DEFINICIONS I SÍMBOLS DE LES UNITATS

### 3.1. EL SISTEMA INTERNACIONAL D'UNITATS (SI)

El Sistema Internacional d'unitats (SI) fou adoptat per la Conferència General de Pesos i Mesures (CGPM) el 1960 [3]. És un sistema coherent d'unitats establert a partir de set *unitats SI de base*, una per a cadascuna de les set magnituds bàsiques dimensionalment independents (vegeu la [secció 1.2](#)), que són: metre, kilogram, segon, ampere, kelvin, mol i candela, per a les dimensions longitud, massa, temps, intensitat de corrent elèctric, temperatura termodinàmica, quantitat de substància i intensitat lluminosa, respectivament. Les definicions de les unitats SI de base es donen en la [secció 3.2](#). Les *unitats SI derivades* s'expressen com a producte de potències de les unitats de base, anàlogament a com ho expressen les relacions corresponents entre les magnituds físiques, però amb factors numèrics iguals a la unitat [3].

En el sistema internacional hi ha només una unitat SI per a cada magnitud física. Aquesta és la mateixa unitat SI de base (vegeu la taula de la [secció 3.3](#)) o bé la unitat SI derivada apropiada (vegeu les taules de les seccions [3.4](#) i [3.5](#)). No obstant això, és permès d'usar qualsevol del prefixos decimals aprovats, anomenats *prefixos SI*, per a construir múltiples o submúltiples de les unitats SI (vegeu la taula de la [secció 3.6](#)).

Hom recomana que en ciència i en tecnologia s'usin només unitats SI (amb els prefixos SI quan calgui). Quan hi hagi raons especials per a fer excepcions a aquesta regla, hom recomana definir sempre les unitats usades en funció de les unitats SI.

### 3.2. DEFINICIONS DE LES UNITATS SI DE BASE [3]

**metre.** El metre és la longitud del camí recorregut per la llum en el buit durant un interval de temps d' $1/299\,792\,458$  de segon (17a CGPM, 1983).

**kilogram.** El kilogram és la unitat de massa; és igual a la massa del prototip internacional del kilogram (3a CGPM, 1901).

**segon.** El segon és la durada de 9 192 631 770 períodes de la radiació corresponent a la transició entre els dos nivells hiperfins de l'estat fonamental de l'àtom de cesi 133 (13a CGPM, 1967).

**ampere.** L'ampere (pronunciat «amper») és la intensitat constant del corrent que, si es fa circular per dos conductors rectes i paral·lels de longitud infinita i de secció negligible, col·locats en el buit a 1 m de distància l'un de l'altre, produeix entre aquests conductors una força igual a  $2 \times 10^{-7}$  newtons per metre de longitud (9a CGPM, 1948).

**kelvin.** El kelvin, unitat de temperatura termodinàmica, és la fracció  $1/273,16$  de la temperatura termodinàmica del punt triple de l'aigua (13a CGPM, 1967).

**mol.** El mol és la quantitat de substància d'un sistema que conté tantes entitats elementals com àtoms hi ha en 0,012 kilograms de carboni 12. Quan s'usa la unitat mol cal especificar de quines entitats elementals es tracta, les quals poden ser àtoms, molècules, ions, electrons, altres partícules o grups especificats d'aquestes partícules (14a CGPM, 1971).

#### *Exemples de l'ús del mol*

1 mol de  $H_2$  conté unes  $6,022 \times 10^{23}$  molècules de  $H_2$  o  $12,044 \times 10^{23}$  àtoms de H

1 mol de  $HgCl$  té una massa de 236,04 g

1 mol de  $Hg_2Cl_2$  té una massa de 472,08 g

1 mol de  $Hg_2^{2+}$  té una massa de 401,18 g i una càrrega de 192,97 kC

1 mol de  $Fe_{0,91}S$  té una massa de 82,88 g

1 mol de  $e^-$  té una massa de 548,60  $\mu g$  i una càrrega de  $-96,49$  kC

1 mol de fotons de freqüència  $5 \times 10^{14}$  Hz té aproximadament una energia de 199,5 kJ

(Vegeu també la [secció 2.10](#), p. 70.)

**candela.** La candela és la intensitat lluminosa, en una direcció donada, d'un focus que emet radiació monocromàtica de freqüència  $540 \times 10^{12}$  hertz i que té una intensitat radiant en l'esmentada direcció d' $1/683$  watts per estereoradian (16a CGPM, 1979).

### 3.3. NOMS I SÍMBOLS DE LES UNITATS SI DE BASE

Els símbols recollits en la [taula](#) que segueix són acceptats internacionalment i no haurien d'ésser modificats en els altres llenguatges o alfabetes. Vegeu les seccions [1.3](#) i [1.4](#) pel que fa a la tipografia dels símbols de les unitats. A [\[7\]](#) es poden trobar les representacions d'aquests símbols recomanades per a ús en sistemes que tenen conjunts limitats de caràcters.



<i>Magnitud física</i>	<i>Nom de la unitat SI</i>	<i>Símbol de la unitat SI</i>
longitud	metre	m
massa	kilogram	kg
temps	segon	s
intensitat de corrent elèctric	ampere	A
temperatura termodinàmica	kelvin	K
quantitat de substància	mol	mol
intensitat lluminosa	candela	cd

### 3.4. UNITATS SI DERIVADES QUE TENEN NOMS I SÍMBOLS ESPECIALS

<i>Magnitud física</i>	<i>Nom de la unitat SI</i>	<i>Símbol de la unitat SI</i>	<i>Expressió en funció de les unitats SI de base</i>
freqüència <sup>1</sup>	hertz	Hz	$s^{-1}$
força	newton	N	$m\ kg\ s^{-2}$
pressió, esforç	pascal	Pa	$N\ m^{-2} = m^{-1}\ kg\ s^{-2}$
energia, treball, calor	joule	J	$N\ m = m^2\ kg\ s^{-2}$
potència, flux radiant	watt	W	$J\ s^{-1} = m^2\ kg\ s^{-3}$
càrrega elèctrica	coulomb	C	A s
potencial elèctric, força electromotriu	volt	V	$J\ C^{-1} = m^2\ kg\ s^{-3}\ A^{-1}$
resistència elèctrica	ohm	$\Omega$	$V\ A^{-1} = m^2\ kg\ s^{-3}\ A^{-2}$
conductància elèctrica	siemens	S	$\Omega^{-1} = m^{-2}\ kg^{-1}\ s^3\ A^2$
capacitat elèctrica	farad	F	$C\ V^{-1} = m^{-2}\ kg^{-1}\ s^4\ A^2$
inducció magnètica, densitat de flux magnètic	tesla	T	$V\ s\ m^{-2} = kg\ s^{-2}\ A^{-1}$
flux magnètic	weber	Wb	$V\ s = m^2\ kg\ s^{-2}\ A^{-1}$
inductància	henry	H	$V\ A^{-1}\ s = m^2\ kg\ s^{-2}\ A^{-2}$
temperatura Celsius <sup>2</sup>	grau Celsius	$^{\circ}C$	K
flux lluminós	lumen	lm	cd sr
il·luminància	lux	lx	cd sr m <sup>-2</sup>
activitat (radioactiva) <sup>3</sup>	becquerel	Bq	$s^{-1}$
dosi absorbida (de radiació) <sup>3</sup>	gray	Gy	$J\ kg^{-1} = m^2\ s^{-2}$
dosi equivalent (índex de dosi equivalent) <sup>3</sup>	sievert	Sv	$J\ kg^{-1} = m^2\ s^{-2}$
angle pla <sup>4</sup>	radian	rad	1 = m m <sup>-1</sup>
angle sòlid <sup>4</sup>	estereoradian	sr	1 = m <sup>2</sup> m <sup>-2</sup>

- 1) La *frequència radial* (angular) i la *velocitat angular* tenen per unitat el  $\text{rad s}^{-1}$  o simplement el  $\text{s}^{-1}$ , i aquesta *no* es pot simplificar a Hz. La unitat Hz *només* es pot emprar per a la freqüència en el sentit de ‘cicles per segon’.
- 2) La temperatura Celsius  $\theta$  és definida per l’equació

$$\theta/^{\circ}\text{C} = T/\text{K} - 273,15$$

La unitat SI de temperatura Celsius és el *grau Celsius*,  $^{\circ}\text{C}$ , el qual és igual al *kelvin*, K. Cal que  $^{\circ}\text{C}$  sigui tractat com un sol símbol, sense deixar espai entre el signe  $^{\circ}$  i la lletra C. (El símbol  $^{\circ}\text{K}$  i el símbol  $^{\circ}$  no s’han de fer servir.)

- 3) Les unitats becquerel, gray i sievert han estat admeses per raons de protecció de la salut humana [3].
- 4) Les unitats radian i estereoradian es consideren «unitats SI suplementàries» [3]. Malgrat això, en química, i també en física [4], es tracten habitualment com a unitats derivades adimensionals, i això fou reconegut per la CIPM el 1980. Atès que tenen, doncs, dimensió 1, resta oberta la possibilitat d’incloure-les o d’ometre-les en les expressions de les unitats SI derivades. En la pràctica, això significa que el rad i el sr es poden emprar quan sigui adequat i es poden ignorar si fer-ho no provoca confusió.

### 3.5. UNITATS SI DERIVADES PER A ALTRES MAGNITUDS

Aquesta taula conté exemples d’altres unitats SI derivades; la llista és simplement il·lustrativa.

<i>Magnitud física</i>	<i>Expressió en funció de les unitats de base</i>	
àrea	$\text{m}^2$	
volum	$\text{m}^3$	
rapidesa, velocitat	$\text{m s}^{-1}$	
velocitat angular	$\text{s}^{-1}$ , $\text{rad s}^{-1}$	
acceleració	$\text{m s}^{-2}$	
moment d’una força	N m	$= \text{m}^2 \text{kg s}^{-2}$
nombre d’ona	$\text{m}^{-1}$	
densitat, densitat en massa	$\text{kg m}^{-3}$	
volum específic	$\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$	
concentració en quantitat <sup>1</sup>	$\text{mol m}^{-3}$	
volum molar	$\text{m}^3 \text{mol}^{-1}$	
capacitat calorífica, entropia	$\text{J K}^{-1}$	$= \text{m}^2 \text{kg s}^{-2} \text{K}^{-1}$
capacitat calorífica molar, entropia molar	$\text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1}$	$= \text{m}^2 \text{kg s}^{-2} \text{K}^{-1} \text{mol}^{-1}$
capacitat calorífica específica, entropia específica	$\text{J K}^{-1} \text{kg}^{-1}$	$= \text{m}^2 \text{s}^{-2} \text{K}^{-1}$
energia molar	$\text{J mol}^{-1}$	$= \text{m}^2 \text{kg s}^{-2} \text{mol}^{-1}$
energia específica	$\text{J kg}^{-1}$	$= \text{m}^2 \text{s}^{-2}$
densitat d’energia	$\text{J m}^{-3}$	$= \text{m}^{-1} \text{kg s}^{-2}$
tensió superficial	$\text{N m}^{-1} = \text{J m}^{-2}$	$= \text{kg s}^{-2}$
densitat de flux de calor, irradiància	$\text{W m}^{-2}$	$= \text{kg s}^{-3}$

<i>Magnitud física</i>	<i>Expressió en funció de les unitats de base</i>	
conductivitat tèrmica	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	$= \text{m kg s}^{-3} \text{K}^{-1}$
viscositat cinemàtica, coeficient de difusió	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	
viscositat dinàmica	$\text{N s m}^{-2} = \text{Pa s}$	$= \text{m}^{-1} \text{kg s}^{-1}$
densitat de càrrega elèctrica	$\text{C m}^{-3}$	$= \text{m}^{-3} \text{s A}$
densitat de corrent elèctric	$\text{A m}^{-2}$	
conductivitat	$\text{S m}^{-1}$	$= \text{m}^{-3} \text{kg}^{-1} \text{s}^3 \text{A}^2$
conductivitat molar	$\text{S m}^2 \text{mol}^{-1}$	$= \text{kg}^{-1} \text{mol}^{-1} \text{s}^3 \text{A}^2$
permitivitat	$\text{F m}^{-1}$	$= \text{m}^{-3} \text{kg}^{-1} \text{s}^4 \text{A}^2$
permeabilitat	$\text{H m}^{-1}$	$= \text{m kg s}^{-2} \text{A}^{-2}$
intensitat de camp elèctric	$\text{V m}^{-1}$	$= \text{m kg s}^{-3} \text{A}^{-1}$
intensitat de camp magnètic	$\text{A m}^{-1}$	
luminància	$\text{cd m}^{-2}$	
exposició (raigs X i $\gamma$ )	$\text{C kg}^{-1}$	$= \text{kg}^{-1} \text{s A}$
taxa de dosi absorbida	$\text{Gy s}^{-1}$	$= \text{m}^2 \text{s}^{-3}$

1) Els mots *concentració en quantitat* són l'abreujament de *concentració en quantitat de substància*. Quan no hi ha risc d'ambigüitat, aquesta magnitud es pot anomenar senzillament *concentració*.

### 3.6. PREFIXOS DEL SISTEMA INTERNACIONAL (PREFIXOS SI)

Per a indicar els múltiples i submúltiples decimals de les unitats SI es poden emprar les formes prefixades (dites, convencionalment, *prefixos*) següents [3].

<i>Submúltiple</i>	<i>Prefix</i>	<i>Símbol</i>	<i>Múltiple</i>	<i>Prefix</i>	<i>Símbol</i>
$10^{-1}$	deci	d	10	deca	da
$10^{-2}$	centi	c	$10^2$	hecto	h
$10^{-3}$	mil·li	m	$10^3$	kilo	k
$10^{-6}$	micro	$\mu$	$10^6$	mega	M
$10^{-9}$	nano	n	$10^9$	giga	G
$10^{-12}$	pico	p	$10^{12}$	tera	T
$10^{-15}$	femto	f	$10^{15}$	peta	P
$10^{-18}$	atto	a	$10^{18}$	exa	E
$10^{-21}$	zepto	z	$10^{21}$	zetta	Z
$10^{-24}$	yocto	y	$10^{24}$	yotta	Y

Els símbols dels prefixos s'han d'escriure amb lletres rodones, sense deixar cap espai entre el prefix i el símbol de la unitat.

*Exemple*

kilòmetre, km

En afegir un prefix al símbol d'una unitat, la combinació es considera com un nou símbol que pot ser elevat a una potència qualsevol sense necessitat de cap parèntesi.

#### Exemples

$$1 \text{ cm}^3 = (0,01 \text{ m})^3 = 10^{-6} \text{ m}^3$$

$$1 \text{ } \mu\text{s}^{-1} = (10^{-6} \text{ s})^{-1} = 10^6 \text{ s}^{-1}$$

$$1 \text{ V/cm} = 100 \text{ V/m}$$

$$1 \text{ mmol/dm}^3 = 1 \text{ mol m}^{-3}$$

Un prefix no es pot emprar mai sobre si mateix. Els prefixos no es poden combinar per a formar prefixos compostos.

#### Exemple

pm, no  $\mu\mu\text{m}$

Els noms i els símbols dels múltiples i submúltiples decimals de la unitat SI de base de la massa, el kg, que ja conté un prefix, es formen afegint el prefix corresponent a la paraula *gram* i al símbol g.

#### Exemples

mg, no  $\mu\text{kg}$ ; Mg, no kkg

Els prefixos SI no s'han d'utilitzar amb la unitat °C.

L'ISO ha recomanat representacions estàndard dels símbols dels prefixos per a poder-los usar en conjunts limitats de caràcters [7].

### 3.7. UNITATS QUE S'UTILITZEN CONJUNTAMENT AMB LES DE L'SI

Aquestes unitats no formen part de l'SI, però s'accepta que es continuïn utilitzant en contextos adequats. Els prefixos SI es poden unir a algunes d'aquestes unitats, com ara mil·lilitre, ml; mil·libar, mbar; megaelectró-volt, MeV; kilotona, kt. En el [capítol 7](#) es dona una llista més extensa d'unitats que no pertanyen a l'SI, amb els factors de conversió a les unitats SI corresponents.

Magnitud física	Nom de la unitat	Símbol de la unitat	Valor en unitats SI
temps	minut	min	60 s
temps	hora	h	3 600 s
temps	dia	d	86 400 s

<i>Magnitud física</i>	<i>Nom de la unitat</i>	<i>Símbol de la unitat</i>	<i>Valor en unitats SI</i>
angle pla	grau	°	$(\pi/180)$ rad
angle pla	minut	'	$(\pi/10\,800)$ rad
angle pla	segon	"	$(\pi/648\,000)$ rad
longitud	àngstrom <sup>1</sup>	Å	$10^{-10}$ m
àrea	barn	b	$10^{-28}$ m <sup>2</sup>
volum	litre	l, L	dm <sup>3</sup> = $10^{-3}$ m <sup>3</sup>
massa	tona	t	Mg = $10^3$ kg
pressió	bar <sup>1</sup>	bar	$10^5$ Pa = $10^5$ N m <sup>-2</sup>
energia	electró-volt <sup>2</sup>	eV (= $e \times V$ )	$\approx 1,602\,18 \times 10^{-19}$ J
massa	unitat de massa atòmica unificada <sup>2,3</sup>	u (= $m_a(^{12}\text{C})/12$ )	$\approx 1,660\,54 \times 10^{-27}$ kg

- 1) L'àngstrom i el bar foren aprovats per la CIPM [3] per a «ús provisional amb les unitats SI», fins que la CIPM faci una nova recomanació. Tanmateix, no s'han d'introduir en contextos on no s'usen actualment.
- 2) Els valors d'aquestes unitats en funció de les unitats SI corresponents no són exactes, ja que depenen dels valors de les constants físiques  $e$  (per a l'electró-volt) i  $N_A$  (per a la unitat de massa atòmica unificada), que són determinats experimentalment. Vegeu el [capítol 5](#).
- 3) La unitat de massa atòmica unificada també s'anomena de vegades *dalton*, de símbol Da, encara que aquest nom i aquest símbol no han estat aprovats per la CGPM.

### 3.8. UNITATS ATÒMIQUES [9] (vegeu també la [secció 7.3, p. 153](#))

Per a càlculs mecanoquàntics de funcions d'ona electròniques, convé considerar certes constants fonamentals (i llurs combinacions) com si fossin unitats. S'acostuma a anomenar-les *unitats atòmiques* (abreujadament, ua), i es pot considerar que formen un sistema coherent d'unitats per al càlcul de les propietats electròniques en química teòrica, encara que no hi ha autorització de la CGPM per a tractar-les com a unitats. Es comentaran una altra vegada, en relació amb les unitats electromagnètiques, en el capítol 7, [p. 153-155](#). Les cinc primeres unitats atòmiques de la [taula](#) que es dona a continuació tenen noms i símbols especials. Només quatre d'aquestes són independents; totes les altres es poden derivar per multiplicació o divisió de la manera usual, i la [taula](#) en dona uns quants exemples.

La relació entre les unitats atòmiques i les unitats SI corresponents implica els valors de les constants físiques fonamentals i, per tant, no és exacta. Els valors numèrics de la [taula](#) estan basats en els valors estimats de les constants fonamentals que figuren en el [capítol 5](#). Els resultats numèrics dels càlculs de química teòrica es donen freqüentment en unitats atòmiques o com a valors numèrics en la forma (*magnitud física*)/(unitat atòmica), per tal que el lector pugui fer la conversió amb les millors estimacions de les constants físiques de què disposa.

<i>Magnitud física</i>	<i>Nom de la unitat</i>	<i>Símbol</i>	<i>Valor de la unitat en l'SI</i>
massa	massa de l'electró en repòs	$m_e$	$9,109\,389\,7(54) \times 10^{-31}$ kg
càrrega	càrrega elemental	$e$	$1,602\,177\,33(49) \times 10^{-19}$ C
acció	constant de Planck/ $2\pi$ <sup>1</sup>	$\hbar$	$1,054\,572\,66(63) \times 10^{-34}$ J s
longitud	bohr <sup>1</sup>	$a_0$	$5,291\,772\,49(24) \times 10^{-11}$ m
energia	hartree <sup>1</sup>	$E_h$	$4,359\,748\,2(26) \times 10^{-18}$ J
temps		$\hbar/E_h$	$2,418\,884\,334\,1(29) \times 10^{-17}$ s
velocitat <sup>2</sup>		$a_0 E_h/\hbar$	$2,187\,691\,42(10) \times 10^6$ m s <sup>-1</sup>
força		$E_h/a_0$	$8,238\,729\,5(25) \times 10^{-8}$ N
quantitat de moviment [lineal]		$\hbar/a_0$	$1,992\,853\,4(12) \times 10^{-24}$ N s
[intensitat de] corrent elèctric		$eE_h/\hbar$	$6,623\,621\,1(20) \times 10^{-3}$ A
[intensitat de] camp elèctric		$E_h/ea_0$	$5,142\,208\,2(15) \times 10^{11}$ V m <sup>-1</sup>
moment dipolar elèctric		$ea_0$	$8,478\,357\,9(26) \times 10^{-30}$ C m
inducció magnètica, densitat de flux magnètic		$\hbar/ea_0^2$	$2,350\,518\,08(71) \times 10^5$ T
moment dipolar magnètic <sup>3</sup>		$e\hbar/m_e$	$1,854\,803\,08(62) \times 10^{-23}$ J T <sup>-1</sup>

1)  $\hbar = h/2\pi$ ;  $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2$ ;  $E_h = \hbar^2/m_e a_0^2$ .

2) El valor numèric de la velocitat de la llum, quan s'expressa en unitats atòmiques, és igual a la inversa de la constant d'estructura fina  $\alpha$ ;  $c/(\text{ua de velocitat}) = c\hbar/a_0 E_h = \alpha^{-1} \approx 137,035\,989\,5(61)$ .

3) La unitat atòmica de moment dipolar magnètic és el doble del magnetó de Bohr  $\mu_B$ .

### 3.9. MAGNITUDS ADIMENSIONALS

Els valor de les magnituds físiques adimensionals, més pròpiament anomenades *magnituds de dimensió u*, s'expressen sovint en funció de valors definits exactament en termes matemàtics, indicats per símbols especials, tals com % ('per cent') i ppm ('part per milió'). Aquests símbols es tracten, doncs, com a unitats i s'usen així en els càlculs.

#### FRACCIONS (VALORS RELATIUS, RENDIMENTS, EFICIÈNCIES)

Fraccions tals com la incertesa relativa, la fracció molar  $x$  (anomenada també *fracció de quantitat* o *fracció en nombre*), fracció en massa  $w$  i la fracció en volum  $\phi$  (vegeu la p. 62 per a totes aquestes magnituds), s'expressen de vegades mitjançant els símbols recollits en la [taula](#) següent.

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Valor</i>	<i>Exemples</i>
per cent	%	$10^{-2}$	L'abundància isotòpica del carboni 13 expressada com a fracció molar $x = 1,1\%$
part per milió	ppm	$10^{-6}$	La incertesa relativa de la constant de Plack $h$ ( $= 6,626\,075\,5(40) \times 10^{-34}$ J s) és 0,60 ppm La fracció en massa d'impureses en una mostra de coure ha resultat inferior a 3 ppm, $w < 3$ ppm

Aquests múltiples de la unitat no formen part de l'SI, i l'ISO recomana que aquests símbols no es facin servir mai. També s'usen freqüentment com a unitats de «concentració» sense una indicació clara del tipus de fracció involucrada (per exemple, fracció molar, fracció en massa o fracció en volum). Per tal d'evitar equívocs, tan sols es poden usar en contextos on el significat de la magnitud sigui acuradament definida. Fins i tot en aquests casos és preferible emprar una relació adequada d'unitats SI.

#### *Altres exemples*

- I) La fracció en massa  $w = 1,5 \times 10^{-6} = 1,5$  ppm, o  $w = 1,5$  mg/kg.
- II) La fracció molar  $x = 3,7 \times 10^{-2} = 3,7\%$  o  $x = 37$  mmol/mol.
- III) L'espectroscòpia d'absorció atòmica mostra que la solució aquosa té una concentració en massa de níquel  $\rho(\text{Ni}) = 2,6$  mg dm<sup>-3</sup>, que és aproximadament equivalent a la fracció en massa  $w(\text{Ni}) = 2,6 \times 10^{-6} = 2,6$  ppm.

Noteu la importància d'emprar el nom i el símbol recomanats per a la magnitud en cadascun dels exemples de dalt. Expressions tals com «la concentració de níquel era 2,6 ppm» són ambigües i cal evitar-les.

L'exemple III il·lustra l'equivalència aproximada de ( $\rho/\text{mg dm}^{-3}$ ) i ( $w/\text{ppm}$ ) en una solució aquosa, atès que la densitat en massa d'una solució aquosa diluïda és sempre aproximadament 1,0 g cm<sup>-3</sup>. Les solucions diluïdes es mesuren o calibren freqüentment respecte a una concentració massica coneguda en mg dm<sup>-3</sup>, i llavors és preferible usar aquesta unitat en comptes de ppm per especificar una fracció molar.

#### USOS NO RECOMANABLES

Cal evitar afegir altres índexs a ppm i símbols similars, tals com ppmv (per a indicar 'ppm en volum'). Hom pot incorporar índexs qualificatius als símbols de magnituds físiques, però mai a les unitats.

*Exemples*

Una fracció en volum  $\phi = 2$  ppm, però no una concentració de 2 ppmv.

Una fracció en massa de  $w = 0,5$  %, però no 0,5 % en pes.

Els símbols % i ppm no s'han d'utilitzar en combinació amb altres unitats. A les capçaleres de les taules i als rètols del eixos dels gràfics s'ha d'evitar l'ús de % i ppm en el denominador. Encara que s'escrigui  $x(^{13}\text{C}) = 1,1$  %, la notació 100  $x$  és preferible a  $x/\%$  en les taules i els gràfics (vegeu, per exemple, la taula de la [secció 6.3, p. 124](#)).

Els altres símbols que dona la taula següent es troben també en la bibliografia, però no és recomanable usar-los. Els símbols que dona la taula per a  $10^{-9}$ ,  $10^{-12}$  i  $10^{-15}$  es basen en el sistema de nomenclatura nord-americà: ppb (*part per billion*, 'part per mil milions'), ppt (*part per trillion*, 'part per bilió'), ppq (*part per quadrillion*, 'part per mil bilions'). Fixeu-vos també que el símbol ppt s'usa unes vegades per a part per mil i d'altres per a part per trilió.

Per tal d'evitar ambigüitats, cal evitar els símbols ppb, ppt i pphm.

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Valor</i>	<i>Exemples</i>
part per cent	pph	$10^{-2}$	(Equival exactament al tant per cent, %)
part per mil	ppt	$10^{-3}$	La fracció en massa de carboni 13 en el diòxid de carboni de l'atmosfera està reduïda en 7 ‰ (o 7 ppt) respecte a l'aigua de mar
per mil	‰	$10^{-3}$	
part per cent milions	pphm	$10^{-8}$	La fracció en massa d'impureses en el metall era inferior a 5 pphm
part per mil milions	ppb	$10^{-9}$	La qualitat estàndard de l'aire pel que fa a l'ozó és un fracció de volum de $\phi = 120$ ppb
part per bilió	ppt	$10^{-12}$	La fracció en volum natural de NO a l'aire va resultar de $\phi = 140$ ppt
part per mil bilions	ppq	$10^{-15}$	

## UNITATS DE MAGNITUDS LOGARÍTIQUES: NEPER, BEL I DECIBEL

En alguns camps, especialment en l'acústica, es donen noms especials al nombre 1 quan s'expressen magnituds físiques definides a partir del logaritme d'una funció. Per a una oscil·lació lineal amortida, l'amplitud d'una magnitud en funció del temps és donada per

$$F(t) = Ae^{-\delta t} \cos \omega t = A \operatorname{Re}\{\exp[(-\delta + i\omega)t]\}$$

D'aquesta relació és evident que la unitat SI coherent per al coeficient d'amortiment  $\delta$  i per a la freqüència angular  $\omega$  és l'invers del segon ( $s^{-1}$ ). Això no obs-



tant, s'usen el noms especials *neper*, Np, i *radian*, rad (vegeu la p. 28 i la p. 97) per a les unitats del productes adimensionals  $\delta t$  i  $\omega t$ , respectivament. D'una manera similar, les magnituds  $\delta$  i  $\omega$  es poden expressar en les unitats Np/s i rad/s, respectivament. Emprats d'aquesta manera, el neper, Np, i el radian, rad, poden ser considerats com a noms especials del nombre 1.

En el camp de l'acústica i la transmissió de senyals, els *nivells de potència dels senyals* i els *nivells d'amplitud dels senyals* (o *nivells de camp*) s'expressen generalment com el logaritme decimal o neperià de la relació entre la potència  $P$  i una potència de referència  $P_0$ , o entre un camp  $F$  i un camp de referència  $F_0$ . Atès que la potència és freqüentment proporcional al quadrat del camp o de l'amplitud (quan el camp actua sobre impedàncies iguals), convé definir el nivell de potència i el nivell de camp perquè siguin iguals. Això s'aconsegueix definint el nivell de potència i el nivell de camp mitjançant les relacions

$$L_F = \ln(F/F_0) \quad \text{i} \quad L_P = \frac{1}{2} \ln(P/P_0)$$

de manera que si  $(P/P_0) = (F/F_0)^2$ , aleshores  $L_P = L_F$ . Les equacions anteriors es poden escriure de la manera següent:

$$L_F = \ln(F/F_0) \text{ Np} \quad \text{i} \quad L_P = \frac{1}{2} \ln(P/P_0) \text{ Np}$$

El bel, B, i el seu submúltiple emprat més freqüentment, el decibel, dB, s'usen quan els nivells de camp i de potència es calculen mitjançant logaritmes decimals, d'acord amb les relacions

$$L_P = \log(P/P_0) \text{ B} = 10 \log(P/P_0) \text{ dB}$$

i

$$L_F = 2 \log(F/F_0) \text{ B} = 20 \log(F/F_0) \text{ dB}$$

La relació entre el bel i el neper s'obté en comparar aquestes equacions amb les precedents. Resulta

$$L_F = \ln(F/F_0) \text{ Np} = 2 \log(F/F_0) \text{ B} = \ln(10) \log(F/F_0) \text{ Np}$$

i dóna

$$\text{B} = 10 \text{ dB} = \frac{1}{2} \ln(10) \text{ Np} = 1,151\,293 \text{ Np}$$

Això no obstant, el bel i el decibel s'han d'usar solament quan els nivells de potència s'expressen com un logaritme decimal, i el neper quan els nivells de camp s'expressen en funció del logaritme neperià. En la pràctica, el neper i el bel gairebé

no s'usen. Tan sols s'utilitza el decibel per a representar el logaritme decimal d'una relació de potències, especialment en acústica, i per a caracteritzar els controls dels amplificadors de potència. Així tenim que la relació  $L_p = n$  dB significa que  $10 \log (P/P_0) = n$ .

Les magnituds nivell de potència i nivell de camp, i les unitats bel, decibel i neper són resumides en la taula i en les notes següents.

<i>Nom</i>	<i>Expressió</i>	<i>Valor numèric × unitat</i>	<i>Notes</i>
nivell de potència	$L_p = \frac{1}{2} \ln(P/P_0)$	$= \frac{1}{2} \ln(P/P_0) N_p = \log(P/P_0) B = 10 \log(P/P_0) dB$	1-3
nivell de camp	$L_F = \ln(F/F_0)$	$= \ln(F/F_0) N_p = 2 \log(F/F_0) B = 20 \log(F/F_0) dB$	4-6

- 1)  $P_0$  és una potència de referència que cal especificar. El factor  $\frac{1}{2}$  s'inclou en la definició per tal que  $L_p \approx L_F$ .
- 2) En acústica, el nivell de potència s'anomena *nivell de potència* del so, símbol  $L_w$ , i la potència de referència és  $P_0 = 1$  pW.
- 3) Per exemple, quan  $L_p = 1$  B = 10 dB, es compleix  $P/P_0 = 10$ , i quan  $L_p = 2$  B = 20 dB, és  $P/P_0 = 100$ , etcètera.
- 4)  $F_0$  és un camp de referència que cal especificar.
- 5) En acústica, el nivell de camp s'anomena *nivell de posició* del so, de símbol  $L_p$ , i la pressió de referència és  $p_0 = 20$  µPa.
- 6) Per exemple, quan  $L_F = 1$  Np, es compleix que  $F/F_0 = e = 2,718 281 \dots$

## 4. SÍMBOLS MATEMÀTICS RECOMANATS

### 4.1. TIPOGRAFIA DELS NOMBRES I DELS SÍMBOLS MATEMÀTICS [5.a]

I) Els nombres en general s'han d'imprimir en rodona. El signe decimal d'un nombre ha de ser un punt (per exemple, «2.3») o una coma (per exemple, «2,3»). L'ISO [5.a] recomana l'ús de la coma, amb preferència al punt, per al signe decimal. Per tal de facilitar la lectura d'un nombre llarg, les xifres es poden agrupar de tres en tres a l'entorn del signe decimal, però sense posar-hi punts o comes, excepte per al signe decimal.<sup>#</sup> Quan el signe decimal estigui col·locat davant de la primera xifra significativa d'un nombre, ha d'anar precedit sempre per un zero.

*Exemples*

2 573.421 736   o   2 573,421 736   o   0.257 3 × 10<sup>4</sup>   o   0,257 3 × 10<sup>4</sup>

II) Els valors numèrics de les magnituds físiques determinats experimentalment presenten normalment una certa incertesa, que sempre cal especificar. La magnitud de la incertesa es pot assenyalar tal com s'indica a continuació.

*Exemples*

$l = (5,347\ 8 \pm 0,006\ 5)\text{ cm}$    o    $5,347\ 8\text{ cm} \pm 0,006\ 5\text{ cm}$

$l = 5,347\ 8\ (32)\text{ cm}$

$l = 5,34_8\text{ cm}$

---

<sup>#</sup> Si es volen agrupar les xifres, tot i que és habitual de veure-les escrites totes juntes quan només n'hi ha quatre —tal com fa en general l'edició anglesa d'aquest manual—, és preferible mantenir estrictament les agrupacions ternàries, sense excepcions, sobretot si cal disposar alineades verticalment diverses quantitats: «0,352 8» és millor que «0,3528». (Nota de l'ed.)

En el primer exemple, l'interval d'incertesa s'indica directament  $a \pm b$ . Hom recomana usar aquesta notació tan sols amb el significat que l'interval  $a \pm b$  conté el valor vertader amb un alt grau de certesa, tal que  $b \geq 2\sigma$ , on  $\sigma$  és la incertesa estàndard o desviació estàndard.

En el segon exemple,  $a(b)$ , hom suposa que l'interval d'incertesa  $b$  indicat entre parèntesis s'aplica a les xifres menys significatives de  $a$ . Es recomana reservar aquesta notació per a indicar que  $b$  representa 1  $\sigma$  en les xifres finals de  $a$ . El tercer exemple comporta una estimació menys precisa de la incertesa, que s'ha d'entendre continguda entre 1 i 9 en la xifra que hi ha com a subíndex. En qualsevol cas, cal establir clarament el conveni emprat per a especificar l'incertesa.

III) Les lletres emprades com a símbols de constants matemàtiques (per exemple,  $e$ ,  $\pi$ ,  $i = \sqrt{-1}$ ) s'han d'escriure en rodona, però les que s'usen com a símbols d'altres nombres, i que no són aquestes constants (per exemple, els nombres quàntics), s'han d'escriure en cursiva, tal com les magnitud físiques.

IV) Els símbols de les funcions matemàtiques especials (per exemple,  $\log$ ,  $\lg$ ,  $\exp$ ,  $\sin$ ,  $\cos$ ,  $d$ ,  $\delta$ ,  $\Delta$ ,  $\nabla \dots$ ) s'han d'escriure en rodona, però els símbols de funcions generals (per exemple,  $f(x)$ ,  $F(x, y) \dots$ ) s'han d'escriure en cursiva.

V) Els símbols de les espècies de simetria en la teoria de grups (per exemple,  $S$ ,  $P$ ,  $D \dots$ ,  $s$ ,  $p$ ,  $d \dots$ ,  $\Sigma$ ,  $\Pi$ ,  $\Delta \dots$ ,  $A_{1g}$ ,  $B_2'' \dots$ ) s'han d'escriure en rodona quan representen el símbol de l'estat d'un àtom o una molècula, encara que sovint s'escriuin en cursiva quan representen les espècies de simetria d'un grup puntual.

VI) Els vectors i les matrius s'han d'escriure només en negreta cursiva.

*Exemples*

força  $\mathbf{F}$ , camp elèctric  $\mathbf{E}$ , vector coordenada  $\mathbf{r}$

El mòdul del vector corresponent s'indica només en cursiva.

*Exemple*

$$r = |\mathbf{r}|$$

Les magnituds tensorials es poden escriure en negreta cursiva de pal sec.

*Exemples*

$\mathbf{S}$ ,  $\mathbf{T}$

## 4.2. SÍMBOLS, OPERADORS I FUNCIONS [5.m]

igual a	=	més petit que	<
diferent de	≠	més gran que	>
idèntic a	≡	més petit o igual que	≤
igual, per definició, a	$\stackrel{\text{def}}{=}$	més gran o igual que	≥
aproximadament igual a	≈	molt més petit que	≪
asimptòticament igual a	≈	molt més gran que	≫
correspon a	≐	més	+
proporcional a	∝, ~	menys	-
tendeix a	→	més o menys	±
infinít	∞	menys o més	∓
$a$ multiplicat per $b$ (nota 1)		$a b, ab, a \cdot b, a \times b$	
$a$ dividit per $b$		$a/b, ab^{-1}, \frac{a}{b}$	
valor absolut de $a$		$ a $	
$a$ elevat a $n$		$a^n$	
arrel quadrada de $a$ i de $a^2 + b^2$		$\sqrt{a}, a^{1/2}, \sqrt{a^2 + b^2}, (a^2 + b^2)^{1/2}$	
arrel $n$ -èsima de $a$		$a^{1/n}, \sqrt[n]{a}$	
valor mitjà de $a$		$\langle a \rangle, \bar{a}$	
signe de $a$ (igual a $a/ a $ )		$\text{sgn } a$	
factorial de $n$		$n!$	
coeficient binòmic = $n!/p!(n-p)!$		$C_p^n, \binom{n}{p}$	
suma de $a_i$		$\sum a_i, \sum_i a_i, \sum_{i=1}^n a_i$	
producte de $a_i$		$\prod a_i, \prod_i a_i, \prod_{i=1}^n a_i$	
sinus de $x$		$\sin x$	
cosinus de $x$		$\cos x$	
tangent de $x$		$\tan x$	
cotangent de $x$		$\cot x$	
arcsinus de $x$		$\arcsin x$	
arccosinus de $x$		$\arccos x$	
arctangent de $x$		$\arctan x$	
sinus hiperbòlic de $x$		$\sinh x$	
cosinus hiperbòlic de $x$		$\cosh x$	
tangent hiperbòlica de $x$		$\tanh x$	
cotangent hiperbòlica de $x$		$\coth x$	
base dels logaritmes neperians		$e$	
exponencial de $x$		$\exp x, e^x$	
logaritme neperià de $x$		$\ln x, \log_e x$	
logaritme en base $a$ de $x$		$\log_a x$	

logaritme decimal de $x$	$\lg x, \log x, \log_{10} x$
logaritme en base 2 de $x$	$\text{lb } x, \log_2 x$
arrel quadrada de menys u	$i$
part real de $z = a + ib$	$\text{Re } z = a$
part imaginària de $z = a + ib$	$\text{Im } z = b$
mòdul de $z = a + ib$ ,	$ z  = (a^2 + b^2)^{1/2}$
valor absolut de $z = a + ib$	
argument de $z = a + ib$	$\arg z = \arctan(b/a)$
complex conjugat de $z = a + ib$	$z^* = a - ib$
màxim enter de $\leq x$	ent $x$ , int $x$
divisió entera, ent( $n/m$ )	$n \text{ div } m$
residu d'una divisió entera, $n/m - \text{ent}(n/m)$	$n \text{ mod } m$
increment de $x$	$\Delta x = x(\text{final}) - x(\text{inicial})$
increment infinitesimal de $f$	$\delta f$
límit de $f(x)$ quan $x$ tendeix a $a$	$\lim_{x \rightarrow a} f(x)$
derivada primera de $f$	$df/dx, \partial_x f, D_x f, f'$
derivada $n$ -èsima de $f$	$d^n f/dx^n, f'' \dots$
derivada parcial de $f$	$\partial f/\partial x$
diferencial total de $f$	$df$
derivada inexacta de $f$ (nota 2)	$\check{d}f$
derivada primera de $x$ respecte al temps	$\dot{x}, \partial x/\partial t$
integral de $f(x)$	$\int f(x) dx, \int dx f(x)$
delta de Kronecker	$\delta_{ij} = 1 \text{ si } i = j,$ $= 0 \text{ si } i \neq j$
símbol de Levi-Civita	$\epsilon_{ijk} = 1 \text{ si } i, j, k \text{ és una permutació cíclica,}$ $= -1 \text{ si } i, j, k \text{ és anticíclic,}$ $= 0 \text{ en altres casos}$
funció (de distribució) delta de Dirac	$\delta(x), \int f(x)\delta(x) dx = f(0)$
funció esglaonada unitària, funció de Heaviside	$\epsilon(x), H(x) \quad \epsilon(x) = 1 \text{ per a } x > 0$ $= 0 \text{ per a } x < 0$
funció gamma	$\Gamma(x) = \int t^{x-1} e^{-t} dt$ $= (x-1)! \text{ per a valors enters de } x$
convolució de funcions $f$ i $g$	$f * g = \int f(x-x')g(x') dx'$
<b>Vectors</b>	
vector $a$	$\mathbf{a}, (\vec{a})$
components cartesianes de $a$	$a_x, a_y, a_z$
vectors unitaris en eixos cartesianes	$\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ , o $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$
producte escalar	$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$
producte vectorial	$\mathbf{a} \times \mathbf{b}, \mathbf{a} \wedge \mathbf{b}$
operador nabla	$\nabla = i\partial/\partial x + j\partial/\partial y + k\partial/\partial z$

---

operador laplacià	$\nabla^2, \Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$
gradient d'un camp escalar $V$	$\text{grad } V, \nabla V$
divergència d'un camp vectorial $A$	$\text{div } A, \nabla \cdot A$
rotacional d'un camp vectorial $A$	$\text{curl } A, \text{rot } A, \nabla \times A$

**Matrius**

matriu d'elements $A_{ij}$	$A$
producte de matrius $A$ i $B$	$AB, (AB)_{ik} = \sum_j A_{ij}B_{jk}$
producte escalar [doble] de $A$ i $B$	$A : B = \sum_{i,j} A_{ij}B_{ji}$
matriu unitat	$E, I$
inversa d'una matriu quadrada $A$	$A^{-1}$
transposada de la matriu $A$	$A^T, \tilde{A}, A'$
conjugada complexa de la matriu $A$	$A^*$
transposada conjugada de $A$ (conjugada hermítica de $A$ )	$A^\dagger, (A^\dagger)_{ij} = A_{ji}^*$
traça de la matriu quadrada $A$	$\text{tr } A, \text{Tr}(A), \sum_i A_{ii}$
determinant de la matriu quadrada $A$	$\det A,  A $

**Operadors lògics**

$A$ està contingut en $B$	$A \subset B$
unió de $A$ i $B$	$A \cup B$
intersecció de $A$ i $B$	$A \cap B$
$p$ i $q$ (signe de conjunció)	$p \wedge q$
$p$ o $q$ o ambdós (signe de disjunció)	$p \vee q$
$x$ pertany a $A$	$x \in A$
$x$ no pertany a $A$	$x \notin A$
el conjunt $A$ conté $x$	$A \ni x$
diferència de $A$ i $B$	$A \setminus B$

---

- 1) Quan la multiplicació s'indica mitjançant un punt, aquest ha de ser volat:  $a \cdot b$ .
- 2) Per a la notació emprada en termodinàmica, vegeu la [p. 74, nota 1](#).





## 5. CONSTANTS FÍSİQUES FONAMENTALS

Els valors següents van ser recomanats el 1986 pel Grup de Treball sobre Constants Fonamentals del Comitè de Dades per a la Ciència i la Tecnologia, CODATA, [70]. La desviació estàndard de la incertesa de les últimes xifres significatives de cada constant figura entre parèntesis a continuació del valor numèric corresponent.

<i>Magnitud</i>	<i>Símbol</i>	<i>Valor</i>
permeabilitat del buit <sup>1</sup>	$\mu_0$	$4\pi \times 10^{-7} \text{ H m}^{-1}$ (definit)
velocitat de la llum al buit	$c_0$	299 792 458 m s <sup>-1</sup> (definit)
permitivitat del buit	$\epsilon_0 = 1/\mu_0 c_0^2$	$8,854 187 816 \dots \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$
constant de Planck	$h$	$6,626 075 5 (40) \times 10^{-34} \text{ J s}$
	$\hbar = h/2\pi$	$1,054 572 66 (63) \times 10^{-34} \text{ J s}$
càrrega elemental	$e$	$1,602 177 33 (49) \times 10^{-19} \text{ C}$
massa de l'electró en repòs	$m_e$	$9,109 389 7 (54) \times 10^{-31} \text{ kg}$
massa del protó en repòs	$m_p$	$1,672 623 1 (10) \times 10^{-27} \text{ kg}$
massa del neutró en repòs	$m_n$	$1,674 928 6 (10) \times 10^{-27} \text{ kg}$
constant de massa atòmica (unitat de massa atòmica unificada)	$m_u = 1 \text{ u}$	$1,660 540 2 (10) \times 10^{-27} \text{ kg}$
constant d'Avogadro	$L, N_A$	$6,022 136 7 (36) \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
constant de Boltzmann	$k$	$1,380 658 (12) \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
constant de Faraday	$F$	$9,648 530 9 (29) \times 10^4 \text{ C mol}^{-1}$
constant dels gasos	$R$	$8,314 510 (70) \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
zero de l'escala Celsius		273,15 K (definit)
volum molar, gas ideal, $p = 1 \text{ bar}$ , $\theta = 0 \text{ }^\circ\text{C}$		22,711 08 (19) L mol <sup>-1</sup>
atmosfera estàndard	atm	101 325 Pa (definit)
constant d'estructura fina	$\alpha = \mu_0 e^2 c_0 / 2h$ $\alpha^{-1}$	$7,297 353 08 (33) \times 10^{-3}$ 137,035 989 5 (61)

<i>Magnitud</i>	<i>Símbol</i>	<i>Valor</i>
radi de Bohr	$a_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2/m_e e^2$	$5,291\,772\,49\,(24) \times 10^{-11}\text{ m}$
energia de Hartree	$E_h = \hbar^2/m_e a_0^2$	$4,359\,748\,2\,(26) \times 10^{-18}\text{ J}$
constant de Rydberg	$R_\infty = E_h/2hc_0$	$1,097\,373\,153\,4\,(13) \times 10^7\text{ m}^{-1}$
magnetó de Bohr	$\mu_B = e\hbar/2m_e$	$9,274\,015\,4\,(31) \times 10^{-24}\text{ J T}^{-1}$
moment magnètic de l'electró	$\mu_e$	$9,284\,770\,1\,(31) \times 10^{-24}\text{ J T}^{-1}$
factor <i>g</i> de Landé de l'electró lliure	$g_e = 2\mu_e/\mu_B$	2,002 319 304 386 (20)
magnetó nuclear	$\mu_N = (m_e/m_p)\mu_B$	$5,050\,786\,6\,(17) \times 10^{-27}\text{ J T}^{-1}$
moment magnètic del protó	$\mu_p$	$1,410\,607\,61\,(47) \times 10^{-26}\text{ J T}^{-1}$
raó giromagnètica del protó	$\gamma_p$	$2,675\,221\,28\,(81) \times 10^8\text{ s}^{-1}\text{ T}^{-1}$
moment magnètic dels protons en H <sub>2</sub> O, $\mu_p'$	$\mu_p'/\mu_B$	$1,520\,993\,129\,(17) \times 10^{-3}$
freqüència de ressonància del protó per unitat de camp en H <sub>2</sub> O	$\gamma_p'/2\pi$	42,576 375 (13) MHz T <sup>-1</sup>
constant de Stefan-Boltzmann	$\sigma = 2\pi^5 k^4/15h^3 c_0^2$	$5,670\,51\,(19) \times 10^{-8}\text{ W m}^{-2}\text{ K}^{-4}$
primera constant de radiació	$c_1 = 2\pi h c_0^2$	$3,741\,774\,9\,(22) \times 10^{-16}\text{ W m}^2$
segona constant de radiació	$c_2 = hc_0/k$	$1,438\,769\,(12) \times 10^{-2}\text{ m K}$
constant gravitacional	$G$	$6,672\,59\,(85) \times 10^{-11}\text{ m}^3\text{ kg}^{-1}\text{ s}^{-2}$
acceleració estàndard de caiguda lliure	$g_n$	9,806 65 m s <sup>-2</sup> (definit)

1)  $\text{H m}^{-1} = \text{N A}^{-2} = \text{N s}^2 \text{C}^{-2}$ ;  $\text{F m}^{-1} = \text{C}^2 \text{J}^{-1} \text{m}^{-1}$ ;  $\epsilon_0$  es pot calcular exactament a partir dels valors definits de  $\mu_0$  i  $c_0$ .

## VALORS DE CONSTANTS MATEMÀTIQUES COMUNES

<i>Constant matemàtica</i>	<i>Símbol</i>	<i>Valor</i>
raó entre la circumferència i el diàmetre d'un cercle <sup>2</sup>	$\pi$	3,141 592 653 59
base dels logaritmes neperians	$e$	2,718 281 828 46
logaritme neperià de 10	$\ln 10$	2,302 585 092 99

2) L'escriptor i periodista científic Xavier Duran ha confegit una frase mnemònica per a la constant  $\pi$ , basada en el nombre de lletres de cada mot (3,141 592 653 589 793 238 46):

*Com a gran i tenaç matemàtic, tu penses, sense cap pausa, enumerar, lentament, números camuflats amb el més constant, ferm, enginyer.*<sup>#</sup>

Hi ha una frase mnemònica similar en anglès:

*How I like a drink, alcoholic of course,  
after the heavy lectures involving quantum mechanics!*

<sup>#</sup> Cf. Màrius SERRA, *Verbàlia: Jocs de paraules i esforços de l'enginyer literari*, Barcelona, Empúries, 2000, p. 443. (Nota de l'ed.)

I també en francès, en forma de poema rimat:

*Que j'aime à faire apprendre ce nombre utile aux sages!  
Immortel Archimède, artiste ingénieur,  
Qui de ton jugement peut priser la valeur?  
Pour moi, ton problème eut de pareils avantages.*

I així també en alemany:

*Wie? O! Dies  $\pi$   
Macht ernstlich so vielen viele Müh'!  
Lernt immerhin, Jünglinge, leichte Verselein,  
Wie so zum Beispiel dies dürfte zu merken sein!*

Vegeu, finalment, les edicions japonesa [2.d] i russa [2.b] per a les frases mnemòniques corresponents.



## 6. PROPIETATS DE PARTÍCULES, ELEMENTS I NÚCLIDS

Els símbols de partícules, elements químics i núclids han estat discutits en la [secció 2.10](#). En la nota 6 de la taula de la [secció 6.2](#) expliquem breument la nomenclatura sistemàtica i el simbolisme recomanats recentment per als elements químics de nombre atòmic superior a 110.

### 6.1. PROPIETATS D'ALGUNES PARTÍCULES

Les dades de la [taula](#) de la pàgina següent han estat agafades de les recopilacions de Cohen i Taylor [70], del Grup de Dades de Partícules [71] i de Wapstra i Audi [72].

En la física i en la química nuclears, les masses de les partícules s'expressen sovint en el seus equivalents en energia (habitualment, en megaelectró-volts). La unitat de massa atòmica unificada correspon a 931,494 32 (28) MeV [70].

Algunes parelles formades per una partícula positiva i un electró de vegades són prou estables per a ser tractades com a entitats individuals amb noms especials.

#### *Exemples*

$$\begin{aligned} \text{positroni (e}^+\text{e}^-) \quad m(\text{e}^+\text{e}^-) &= 1,097\,152\,503\,(26) \times 10^{-3} \text{ u} \\ \text{muoni (}\mu^+\text{e}^-; \text{Mu)} \quad m(\text{Mu}) &= 0,113\,977\,478\,(17) \text{ u} \end{aligned}$$

El signe positiu o negatiu del moment magnètic d'una partícula significa que l'orientació del dipol magnètic respecte al moment angular correspon a la rotació d'una càrrega positiva o negativa, respectivament.

Nom	Símbol <sup>a</sup>	Espín	Nombre de càrrega z	Massa en repòs		Moment magnètic	Vida mitjana
				m / u	mc <sup>2</sup> /MeV		
fotó	$\gamma$	1	0	0	0		
neutrí	$\nu_e$	1/2	0	0	0		
electró <sup>b</sup>	e	1/2	-1	5,485 799 03 (13) × 10 <sup>-4</sup>	0,510 999 06 (15)	1,001 159 652 193 (10) <sup>c</sup>	
muó	$\mu^\pm$	1/2	±1	0,113 428 913 (17)	105,658 389 (34)	1,001 165 923 (8) <sup>d</sup>	2,197 03 (4) × 10 <sup>-6</sup>
pió	$\pi^\pm$	1	±1	0,149 832 3 (8)	139,567 9 (7)		2,603 0 (24) × 10 <sup>-8</sup>
pió	$\pi^0$	1	0	0,144 900 8 (9)	134,974 3 (8)		8,4 (6) × 10 <sup>-17</sup>
protó	p	1/2	1	1,007 276 470 (12)	938,272 31 (28)	2,792 847 386 (63)	
neutró	n	1/2	0	1,008 664 904 (14)	939,565 63 (28)	-1,913 042 75 (45)	889,1 (21)
deuteró	d	1	1	2,013 553 214 (24)	1 875,613 39 (53)	0,857 437 6 (1)	
tritó	t	1/2	1	3,015 500 71 (4)	2 808,921 78 (85)	2,978 960 (1)	
helió	h	1/2	2	3,014 932 23 (4)	2 808,392 25 (85)	-2,127 624 (1)	
partícula $\alpha$	$\alpha$	0	2	4,001 506 170 (50)	3 727,380 3 (11)	0	

<sup>a</sup>) El Grup de Dades de Partícules recomana emprar símbols en cursiva per a les partícules, tal com han adoptat nombrosos físics [71].

<sup>b</sup>) L'electró, com a partícula  $\beta$  que és, s'indica de vegades  $\beta$ .

<sup>c</sup>) Aquest valor s'expressa en magnetons de Bohr  $\mu / \mu_B = eh/2m_e$ .

<sup>d</sup>) Aquest valor s'expressa  $\mu / \mu_N$ , on  $\mu_N = eh/2m_p$ .

## 6.2. PESOS ATÒMICS ESTÀNDAR DELS ELEMENTS (2007)

Tal com va acordar la Comissió de Pesos Atòmics i Abundància Isotòpica de la IUPAC el 1979 [42.b], la massa atòmica relativa (pes atòmic) d'un element E es pot definir per a qualsevol mostra específica. És la massa mitjana dels seus àtoms en la mostra dividida per la unitat de massa atòmica unificada<sup>1</sup> o, alternativament, la massa molar dels seus àtoms dividida per la massa molar estàndard  $M^\circ = Lm_u = 1 \text{ g mol}^{-1}$ :

$$A_r(E) = \bar{m}_a(E)/u = M(E)/M^\circ$$

Les variacions de la composició isotòpica de molts elements en mostres d'origen diferent limiten la precisió amb la qual es pot donar una massa atòmica relativa. Els pesos atòmics estàndard, revisats cada dos anys per la Comissió de Pesos Atòmics i Abundància Isotòpica de la IUPAC, són en principi aplicables només a materials normals. Això significa que, amb un elevat grau de confiança, la massa atòmica relativa d'un element en qualsevol mostra normal estarà dintre dels límits d'incertesa del valor tabulat. Per «normal» s'entén aquí que el material és una font d'origen raonadament possible de l'element o dels seus compostos disponibles en el mercat per a la indústria i la recerca, i que no ha estat sotmès a modificacions significatives de la seva composició isotòpica en un període de temps geològicament breu [43]. Això, naturalment, exclou els materials que s'estudien justament per a tenir una composició isotòpica molt anòmala.

La [taula](#) d'aquesta secció recull les masses atòmiques relatives dels elements per ordre alfabètic de símbols químics. El valors són els recomanats per la Comissió de Pesos Atòmics i Abundància Isotòpica de la IUPAC el 2001 [44.d], esmenats els anys 2005 i 2007 (vegeu les notes *ad hoc* al peu de la [taula](#)), i corresponen als elements tal com existeixen naturalment a la Terra. El nom i el símbol de l'element 110, adoptats pel Consell de la IUPAC l'any 2003 [44.e], hi són inclosos.

Les masses atòmiques relatives de molts elements depenen de l'origen i tractament dels materials [45]. Les notes de la [taula](#) indiquen els tipus de variació que es pot esperar per a cada element específic. Emprant els valors d'acord amb les notes, hom considera fiable en  $\pm$  el nombre que apareix entre parèntesis aplicat a l'última xifra. No es recomana un pes atòmic estàndard per als elements sense una composició isotòpica terrestre no característica. En la [taula](#) de la [secció 6.3](#) apareix la massa atòmica de l'isòtop més estable.

1. Tingueu en compte que la constant de massa atòmica,  $m_u$ , és igual a la unitat de massa atòmica unificada,  $u$ , i es defineix en funció de la massa de l'àtom de carboni 12:  $m_u = 1 \text{ u} = m_{12}({}^{12}\text{C})/12$ .

<i>Símbol</i>	<i>Nombre atòmic</i>	<i>Nom</i>	<i>Massa atòmica relativa (pes atòmic)</i>	<i>Notes</i>
Ac	89	actini	[227]	5
Ag	47	plata (o argent)	107,868 2 (2)	1
Al	13	alumini	26,981 538 6 (8)*	
Am	95	americ	[243]	5
Ar	18	argó	39,948 (1)	1, 2
As	33	arsènic	74,921 60 (2)	
At	85	àstat	[210]	5
Au	79	or	196,966 569 (4)*	
B	5	bor	10,811 (7)	1, 2, 3
Ba	56	bari	137,327 (7)	
Be	4	beril·li	9,012 182 (3)	
Bh	107	bohri	[264]	5, 6
Bi	83	bismut	208,980 40 (1)*	
Bk	97	berkeli	[247]	5
Br	35	brom	79,904 (1)	
C	6	carboni	12,010 7 (8)	1, 2
Ca	20	calci	40,078 (4)	1
Cd	48	cadmi	112,411 (8)	1
Ce	58	ceri	140,116 (1)	1
Cf	98	californi	[251]	5
Cl	17	clor	35,453 (2)	3
Cm	96	curi	[247]	5
Co	27	cobalt	58,933 195 (5)*	
Cr	24	crom	51,996 1 (6)	
Cs	55	cesi	132,905 451 9 (2)*	
Cu	29	coure	63,546 (3)	2
Db	105	dubni	[262]	5, 6
Ds	110	darmstadt	[281]	5, 6
Dy	66	disprosi	162,500 (1)	1
Er	68	erbi	167,259 (3)	1
Es	99	einsteini	[252]	5
Eu	63	europi	151,964 (1)	1
F	9	fluor	18,998 403 2 (5)	
Fe	26	ferro	55,845 (2)	
Fm	100	fermi	[257]	5
Fr	87	franci	[229]	5
Ga	31	gal·li	69,723 (1)	
Gd	64	gadolini	157,25 (3)	1
Ge	32	germani	72,64 (1)	
H	1	hidrogen	1,007 94 (7)	1, 2, 3
He	2	heli	4,002 602 (2)	1, 2
Hf	72	hafni	178,49 (2)	



<i>Símbol</i>	<i>Nombre atòmic</i>	<i>Nom</i>	<i>Massa atòmica relativa (pes atòmic)</i>	<i>Notes</i>
Hg	80	mercuri	200,59 (2)	
Ho	67	holmi	164,930 32 (2)	
Hs	108	hassi	[277]	5, 6
I	53	iode	126,904 47 (3)	
In	49	indi	114,818 (3)	
Ir	77	iridi	192,217 (3)	
K	19	potassi	39,098 3 (1)	1
Kr	36	criptó	83,798 (2)	1, 3
La	57	lantani	138,905 47 (7)*	1
Li	3	liti	[6,941 (2)]	1, 2, 3, 4
Lr	103	laurenci	[262]	5
Lu	71	luteci	174,968 (1)**	1
Md	101	mendelevi	[258]	5
Mg	12	magnesi	24,305 0 (6)	
Mn	25	manganès	54,938 045 (5)*	
Mo	42	molibdè	95,96 (2)**	1
Mt	109	meitneri	[268]	5, 6
N	7	nitrogen	14,006 7 (2)	1, 2
Na	11	sodi	22,989 769 28 (2)*	
Nb	41	niobi	92,906 38 (2)	
Nd	60	neodimi	144,242 (3)*	1
Ne	10	neó	20,179 7 (6)	1, 3
Ni	28	níquel	58,693 (4)**	
No	102	nobeli	[259]	5
Np	93	neptuni	[237]	5
O	8	oxigen	15,999 4 (3)	1, 2
Os	76	osmi	190,23 (3)	1
P	15	fòsfor	30,973 762 (2)*	
Pa	91	protoactini	231,035 88 (2)	5
Pb	82	plom	207,2 (1)	1, 2
Pd	46	pal·ladi	106,42 (1)	1
Pm	61	prometi	[145]	5
Po	84	poloni	[209]	5
Pr	59	praseodimi	140,907 65 (2)	
Pt	78	platí	195,078 (2)	
Pu	94	plutoni	[244]	5
Ra	88	radi	[226]	5
Rb	37	rubidi	85,467 8 (3)	1
Re	75	reni	186,207 (1)	
Rf	104	rutherfordi	[261]	5, 6
Rg	111	roentgeni	[272]	5, 6
Rh	45	rodi	102,905 50 (2)	

<i>Símbol</i>	<i>Nombre atòmic</i>	<i>Nom</i>	<i>Massa atòmica relativa (pes atòmic)</i>	<i>Notes</i>
Rn	86	radó	[222]	5
Ru	44	ruteni	101,07 (2)	1
S	16	sofre	32,065 (5)	1, 2
Sb	51	antimoni	121,760 (1)	1
Sc	21	escandi	44,955 912 (6)*	
Se	34	seleni	78,96 (3)	
Sg	106	seaborgi	[266]	5, 6
Si	14	silici	28,085 5 (3)	2
Sm	62	samari	150,36 (2)*	1
Sn	50	estany	118,710 (7)	1
Sr	38	estronci	87,62 (1)	1, 2
Ta	73	tàntal	180,947 88 (2)*	
Tb	65	terbi	158,925 35 (2)*	
Tc	43	tecneci	[98]	5
Te	52	tel·luri	127,60 (3)	1
Th	90	tori	232,038 06 (2)*	1, 5
Ti	22	titani	47,867 (1)	
Tl	81	tal·li	204,383 3 (2)	
Tm	69	tuli	168,934 21 (2)	
U	92	urani	238,028 91 (3)	1, 3, 5
Uub	112	ununbi	[285]	5, 6
Uuh	116	ununhexi		6
[Uuo	118	ununocti		6]
Uuq	114	ununquadi	[289]	5, 6
V	23	vanadi	50,941 5 (1)	
W	74	tungstè	183,84 (1)	
Xe	54	xenó	131,293 (6)	1, 3
Y	39	itri	88,905 85 (2)	
Yb	70	iterbi	173,054 (5)**	1
Zn	30	zinc	65,38 (2)**	
Zr	40	zirconi	91,224 (2)	1

\* Aquestes noves masses atòmiques relatives han estat anunciades per la Comissió d'Abundàncies Isotòpiques i Pesos Atòmics de la IUPAC durant el mes d'agost del 2005 ([http://www.iupac.org/news/archives/2005/atomic-weights\\_revised05.html](http://www.iupac.org/news/archives/2005/atomic-weights_revised05.html)).

\*\* Aquestes noves masses atòmiques relatives han estat anunciades per la Comissió d'Abundàncies Isotòpiques i Pesos Atòmics de la IUPAC durant el mes d'agost del 2007 ([http://www.iupac.org/news/archives/2007/atomic-weights\\_revised07.html](http://www.iupac.org/news/archives/2007/atomic-weights_revised07.html)).

- 1) Hom coneix espècimens geològics on l'element té una composició isotòpica fora dels límits dels materials normals. La diferència entre la massa atòmica relativa de l'element en aquests espècimens i la donada a la taula pot superar el valor de la incertesa establerta.
- 2) L'interval de composició isotòpica dels materials terrestres normals impedeix donar una massa atòmica relativa més precisa; el valor  $A_r(E)$  ha de ser aplicable a qualsevol material normal.

- 3) Hom pot trobar composicions isotòpiques modificades en els materials comercials per haver estat sotmesos a un fraccionament isotòpic inadvertit o indesxifrabable. Hi pot haver desviacions substancials entre la massa atòmica relativa d'un element i la de la taula.
- 4) Els materials de liti comercials tenen masses atòmiques relatives que varien entre 6,939 i 6,996; si hom necessita que el valor sigui més precís, aquest ha de ser determinat pels materials específics (l'interval esmentat a la taula del 1995 [44.b] era 6,94-6,99).
- 5) L'element no té núclids estables. El valor entre claudàtors —per exemple, «[209]»— indica el nombre màssic de l'isòtop de vida més llarga de l'element. No obstant això, tres d'aquests elements (Th, Pa i U) tenen una composició isotòpica terrestre característica, i per a aquests hem recollit una massa atòmica relativa.
- 6) Els noms dels elements 101-109 es varen acordar l'any 1997 [44.c], el de l'element 110, l'any 2002 [44.e], i el de l'element 111, l'any 2003 (recomanació provisional) [44.f]; s'estan revisant els noms i els símbols dels elements 112-118. Els noms i els símbols que es donen aquí són sistemàtics i es basen en els nombres atòmics dels elements, tal com recomana la Comissió de Nomenclatura de Química Inorgànica de la IUPAC des del 1978 [22 i 42.a]. Els noms es componen amb les arrels següents, que representen les xifres del nombre atòmic:

1	un	2	bi	3	tri	4	quad	5	pen
6	hex	7	sept	8	oct	9	enn	0	nil

El nom acaba amb el sufix *-i*, que s'afegeix al conjunt format per les tres arrels (les coincidències *-nmn-* i *-ii* queden reduïdes a *-nm-* i *-i*, respectivament). Els símbols de tres lletres es corresponen amb la primera lletra de les arrels corresponents.

### 6.3. PROPIETATS DELS NÚCLIDS

La taula següent conté les propietats detallades a continuació dels núclids existents de manera natural i d'alguns núclids inestables.

#### Columna

- 1  $Z$  és el nombre atòmic (nombre de protons) del núclid.
- 2 Símbols de l'element.
- 3  $A$  és el nombre de massa del núclid. El símbol \* indica un núclid inestable (per a elements sense isòtops existents en la natura es tracta del núclid més estable) i el símbol # indica un núclid de temps de vida suficientment llarga per a permetre'n determinar l'abundància isotòpica.
- 4 La massa atòmica s'expressa en unitats de massa atòmica unificada,  $u = m_a(^{12}\text{C})/12$ , junt amb els errors estàndard entre parèntesis, aplicables a les últimes xifres donades. Les dades han estat tretes d'una llista exhaustiva del *The 1983 Atomic Mass Evaluation*, de Wapstra i Audi [72].
- 5 Les abundàncies isotòpiques es donen en fraccions molars,  $x$ , dels àtoms corresponents en tants per cent. Foren recomanades el 1989 per la Comissió de Pesos Atòmics i Abundància Isotòpica de la IUPAC [45] i són coherents amb els pesos atòmics estàndard de la taula de pesos atòmics fixada el 1991 [44.a]. Les incerteses que apareixen entre pa-

rèntesis són aplicables a les últimes xifres que s'indiquen, i cobreixen l'interval de les variacions probables en els diferents materials, així com els errors experimentals.

- 6  $I$  és el nombre quàntic d'espín nuclear.
- 7 Com a moment magnètic es dona el valor de la màxima esperança del component  $z$  del moment dipolar magnètic,  $m$ , en magnetons nuclears. El signe positiu o negatiu indica que l'orientació del dipol magnètic respecte al moment angular correspon a la rotació d'una càrrega positiva o negativa, respectivament. Les dades han estat preses de la recopilació de P. Raghavan [73]. L'asterisc \* indica que hi ha més d'un valor en la recopilació original. Aquí es dona el valor de precisió més alta o de data més recent.
- 8 Com a moment quadrupolar es dona l'àrea del moment quadrupolar elèctric (vegeu la nota 12 de la p. 39), en unitats de femtòmetres quadrats,  $\text{fm}^2 = 10^{-30} \text{ m}^2$ , encara que la major part de les taules el donen en barns ( $1 \text{ barn} = 10^{-28} \text{ m}^2 = 100 \text{ fm}^2$ ). El signe positiu indica un nucli allargat, el signe negatiu indica un nucli aplanat. Les dades per a  $Z \leq 20$  foren preses de la recopilació de P. Pyykkö [74], amb valors per al Cl i el Ca corregits per D. Sundholm (comunicació particular), i la resta s'han pres de P. Raghavan [73]. L'asterisc indica que en la recopilació original hi ha més d'un valor.

Z	Símbol	A	Massa atòmica $m_a/u$	Abundància isotòpica 100 $x$	Espín nuclear $I$	Moment magnètic $m/\mu_N$	Moment quadrupolar $Q/\text{fm}^2$
1	H	1	1,007 825 035 (12)	99,985 (1)	1/2	+ 2,792 847 386 (63)	
	(D)	2	2,014 101 779 (24)	0,015 (1)	1	+ 0,857438 230 (24)	+ 0,2860 (15)
	(T)	3*	3,016 049 27 (4)		1/2	+ 2,978 962 479 (68)	
2	He	3	3,016 029 31 (4)	0,000 137 (3)	1/2	- 2,127 624 848 (66)	
		4	4,002 603 24 (5)	99,999 863 (3)	0	0	
3	Li	6	6,015 121 4 (7)	7,5 (2)	1	+ 0,822 056 67 (26)*	- 0,082 (4)
		7	7,016 003 0 (9)	92,5 (2)	3/2	+ 3,256 462 53 (40)*	- 4,01
4	Be	9	9,012 182 2 (4)	100	3/2	- 1,177 492 (17)*	+ 5,288 (38)
5	B	10	10,012 936 9 (3)	19,9 (2)	3	+ 1,800 644 75 (57)	+ 8,459 (24)
		11	11,009 305 4 (4)	80,1 (2)	3/2	+ 2,688 648 9 (10)	+ 4,059 (10)
6	C	12	12 (per definició)	98,90 (3)	0	0	
		13	13,003 354 826 (17)	1,10 (3)	1/2	+ 0,702 411 8 (14)	
		14*	14,003 241 982 (27)		0	0	
7	N	14	14,003 074 002 (26)	99,634 (9)	1	+ 0,403 761 00 (6)	+ 2,01 (2)
		15	15,000 108 97 (4)	0,366 (9)	1/2	- 0,283 188 842 (45)	

Z	Símbol	A	Massa atòmica $m_a/u$	Abundància isotòpica 100 x	Espín nuclear I	Moment magnètic $m/\mu_N$	Moment quadrupolar Q/fm <sup>2</sup>
8	O	16	15,994 914 63 (5)	99,762 (15)	0	0	
		17	16,999 131 2 (4)	0,038 (3)	5/2	-1,893 80	-2,558 (22)
		18	17,999 160 3 (9)	0,200 (12)	0	0	
9	F	19	18,998 403 22 (15)	100	1/2	+2,628 868 (8)	
10	Ne	20	19,992 435 6 (22)	90,48 (3)	0	0	
		21	20,993 842 8 (21)	0,27 (1)	3/2	-0,661 797 (5)	+10,155 (75)
		22	21,991 383 1 (18)	9,25 (3)	0	0	
11	Na	23	22,989 767 7 (10)	100	3/2	+2,217 655 6 (6)*	+10,06 (20)
12	Mg	24	23,985 042 3 (8)	78,99 (3)	0	0	
		25	24,985 837 4 (8)	10,00 (1)	5/2	-0,855 465 (8)	+19,94 (20)
		26	25,982 593 7 (8)	11,01 (2)	0	0	
13	Al	27	26,981 538 6 (8)	100	5/2	+3,641 504 687 (65)	+14,03 (10)
14	Si	28	27,976 927 1 (7)	92,23 (1)	0	0	
		29	28,976 494 9 (7)	4,67 (1)	1/2	-0,555 29 (3)	
		30	29,973 770 7 (7)	3,10 (1)	0	0	
15	P	31	30,973 762 0 (6)	100	1/2	+1,131 60 (3)	
16	S	32	31,972 070 70 (25)	95,02 (9)	0	0	
		33	32,971 458 43 (23)	0,75 (1)	3/2	+0,643 821 2 (14)	-6,78 (13)
		34	33,967 866 65 (22)	4,21 (8)	0	0	
		36	35,967 080 62 (27)	0,02 (1)	0	0	
17	Cl	35	34,968 852 721 (69)	75,77 (5)	3/2	+0,821 874 3 (4)	-8,11 (8)
		37	36,965 902 62 (11)	24,23 (5)	3/2	+0,684 123 6 (4)	-6,39 (6)
18	Ar	36	35,967 545 52 (29)	0,337 (3)	0	0	
		38	37,962 732 5 (9)	0,063 (1)	0	0	
		40	39,962 383 7 (14)	99,600 (3)	0	0	
19	K	39	38,963 707 4 (12)	93,258 1 (44)	3/2	+0,391 507 31(12)*	+5,9 (6)
		40	39,963 999 2 (12)	0,011 7 (1)	4	-1,298 100 3 (34)	-7,3 (7)
		41	40,961 825 4 (12)	6,730 2 (44)	3/2	+0,214 870 09 (22)	+7,2 (7)
20	Ca	40	39,962 590 6 (13)	96,941 (18)	0	0	
		42	41,958 617 6 (13)	0,647 (9)	0	0	
		43	42,958 766 2 (13)	0,135 (6)	7/2	-1,317 643 (7)	-4,09 (8)
		44	43,955 480 6 (14)	2,086 (12)	0	0	
		46	45,953 689 (4)	0,004 (4)	0	0	
		48	47,952 533 (4)	0,187 (4)	0	0	
21	Sc	45	44,955 910 0 (14)	100	7/2	+4,756 486 6 (18)	-22 (1)*

Z	Símbol	A	Massa atòmica $m_a/u$	Abundància isotòpica 100 x	Espín nuclear I	Moment magnètic $m/\mu_N$	Moment quadrupolar $Q/\text{fm}^2$
22	Ti	46	45,952 629 4 (14)	8,0 (1)	0	0	
		47	46,951 764 0 (11)	7,3 (1)	5/2	-0,788 48 (1)	+29 (1)
		48	47,947 947 3 (11)	73,8 (1)	0	0	
		49	48,947 871 1 (11)	5,5 (1)	7/2	-1,104 17 (1)	+24 (1)
		50	49,944 792 1 (12)	5,4 (1)	0	0	
23	V	50#	49,947 160 9 (17)	0,250 (2)	6	+3,345 688 9 (14)	20,9 (40)*
		51	50,943 961 7 (17)	99,750 (2)	7/2	+5,148 705 73 (18)	-5,2 (10)*
24	Cr	50	49,946 046 4 (17)	4,345 (13)	0	0	
		52	51,940 509 8 (17)	83,789 (18)	0	0	
		53	52,940 651 3 (17)	9,501 (17)	3/2	-0,474 54 (3)	-15 (5)*
		54	53,938 882 5 (17)	2,365 (7)	0	0	
25	Mn	55	54,938 047 1 (16)	100	5/2	+3,468 719 0 (9)	+33 (1)*
26	Fe	54	53,939 612 7 (15)	5,8 (1)	0	0	
		56	55,934 939 3 (16)	91,72 (30)	0	0	
		57	56,935 395 8 (16)	2,2 (1)	1/2	+0,090 623 00 (9)*	
		58	57,933 277 3 (16)	0,28 (1)	0	0	
27	Co	59	58,933 197 6 (16)	100	7/2	+4,627 (9)	+40,4 (40)*
28	Ni	58	57,935 346 2 (16)	68,077 (9)	0	0	
		60	59,930 788 4 (16)	26,223 (8)	0	0	
		61	60,931 057 9 (16)	1,140 (1)	3/2	-0,750 02 (4)	+16,2 (15)
		62	61,928 346 1 (16)	3,634 (2)	0	0	
		64	63,927 967 9 (17)	0,926 (1)	0	0	
29	Cu	63	62,929 598 9 (17)	69,17 (3)	3/2	+2,227 345 6 (14)*	-21,1 (4)*
		65	64,927 792 9 (20)	30,83 (3)	3/2	+2,381 61 (19)*	-19,5 (4)
30	Zn	64	63,929 144 8 (19)	48,6 (3)	0	0	
		66	65,926 034 7 (17)	27,9 (2)	0	0	
		67	66,927 129 1 (17)	4,1 (1)	5/2	+0,875 204 9 (11)*	+15,0 (15)
		68	67,924 845 9 (18)	18,8 (4)	0	0	
		70	69,925 325 (4)	0,6 (1)	0	0	
31	Ga	69	68,925 580 (3)	60,108 (9)	3/2	+2,016 589 (44)	+16,8*
		71	70,924 700 5 (25)	39,892 (9)	3/2	+2,562 266 (18)	+10,6*

Z	Símbol	A	Massa atòmica $m_a/u$	Abundància isotòpica 100 x	Espín nuclear I	Moment magnètic $m/\mu_N$	Moment quadropolar Q/fm <sup>2</sup>
32	Ge	70	69,924 249 7 (16)	21,23 (4)	0	0	
		72	71,992 078 9 (16)	27,66 (3)	0	0	
		73	72,923 462 6 (16)	7,73 (1)	9/2	-0,879 467 7 (2)	-17,3 (26)
		74	73,921 177 4 (15)	35,94 (2)	0	0	
		76	75,921 401 6 (17)	7,44 (2)	0	0	
33	As	75	74,921 5942 (17)	100	3/2	+1,439 475 (65)	+31,4 (6)*
34	Se	74	73,922 474 6 (16)	0,89 (2)	0	0	
		76	75,919 212 0 (16)	9,36 (1)	0	0	
		77	76,919 912 5 (16)	7,63 (6)	1/2	+0,535 074 24 (28)*	
		78	77,917 307 6 (16)	23,78 (9)	0	0	
		80	79,916 519 6 (19)	49,61 (10)	0	0	
		82	81,916 697 8 (23)	8,73 (6)	0	0	
35	Br	79	78,918 336 1 (26)	50,69 (7)	3/2	+2,106 400 (4)	+33,1 (4)
		81	80,916 289 (6)	49,31 (7)	3/2	+2,270 562 (4)	+27,6 (4)
36	Kr	78	77,920 396 (9)	0,35 (2)	0	0	
		80	79,916 380 (9)	2,25 (2)	0	0	
		82	81,913 482 (6)	11,6 (1)	0	0	
		83	82,914 135 (4)	11,5 (1)	9/2	-0,970 669 (3)	+25,3 (5)
		84	83,911 507 (4)	57,0 (3)	0	0	
		86	85,910 616 (5)	17,3 (2)	0	0	
37	Rb	85	84,911 794 (3)	72,165 (20)	5/2	+1,353 351 5 (8)*	+22,8 (43)*
		87#	86,909 187 (3)	27,835 (20)	3/2	+2,751 818 (2)	+13,2 (1)
38	Sr	84	83,913 430 (4)	0,56 (1)	0	0	
		86	85,909 267 2 (28)	9,86 (1)	0	0	
		87	86,908 884 1 (28)	7,00 (1)	9/2	-1,093 603 0 (13)*	+33,5 (20)
		88	87,905 618 8 (28)	82,58 (1)	0	0	
39	Y	89	88,905 849 (3)	100	1/2	-0,137 415 42 (34)*	
40	Zr	90	89,904 702 6 (26)	51,45 (3)	0	0	
		91	90,905 643 9 (26)	11,22 (4)	5/2	-1,303 62 (2)	-20,6 (10)
		92	91,905 038 6 (26)	17,15 (2)	0	0	
		94	93,906 314 8 (28)	17,38 (4)	0	0	
		96	95,908 275 (4)	2,80 (2)	0	0	
41	Nb	93	92,906 377 2 (27)	100	9/2	+6,170 5 (3)	-32 (2)*

Z	Símbol	A	Massa atòmica $m_a/u$	Abundància isotòpica 100 x	Espín nuclear I	Moment magnètic $m/\mu_N$	Moment quadrupolar $Q/\text{fm}^2$
42	Mo	92	91,906 809 (4)	14,84 (4)	0	0	
		94	93,905 085 3 (26)	9,25 (3)	0	0	
		95	94,905 841 1 (22)	15,92 (5)	5/2	-0,914 2 (1)	-2,2 (1)*
		96	95,904 678 5 (22)	16,68 (5)	0	0	
		97	96,906 020 5 (22)	9,55 (3)	5/2	-0,933 5 (1)	+25,5 (13)*
		98	97,905 407 3 (22)	24,13 (7)	0	0	
		100	99,907 477 (6)	9,63 (3)	0	0	
43	Tc	98*	97,907 215 (4)		6		
44	Ru	96	95,907 599 (8)	5,52 (6)	0	0	
		98	97,905 287 (7)	1,88 (6)	0	0	
		99	98,905 938 9 (23)	12,7 (1)	5/2	-0,641 3 (51)*	+7,9 (4)
		100	99,904 219 2 (24)	12,6 (1)	0	0	
		101	100,905 581 9 (24)	17,0 (1)	5/2	-0,718 8 (60)*	+45,7 (23)
		102	101,904 348 5 (25)	31,6 (2)	0	0	
		104	103,905 424 (6)	18,7 (2)	0	0	
45	Rh	103	102,905 500 (4)	100	1/2	-0,0884 0 (2)	
46	Pd	102	101,905 634 (5)	1,02 (1)	0	0	
		104	103,904 029 (6)	11,14 (8)	0	0	
		105	104,905 079 (6)	22,33 (8)	5/2	-0,642 (3)	+66,0 (11)*
		106	105,903 478 (6)	27,33 (3)	0	0	
		108	107,903 895 (4)	26,46 (9)	0	0	
		110	109,905 167 (20)	11,72 (9)	0	0	
47	Ag	107	106,905 092 (6)	51,839 (7)	1/2	-0,113 679 65 (15)*	
		109	108,904 756 (4)	48,161 (7)	1/2	-0,130 690 62 (22)*	
48	Cd	106	105,906 461 (7)	1,25 (4)	0	0	
		108	107,904 176 (6)	0,89 (2)	0	0	
		110	109,903 005 (4)	12,49 (12)	0	0	
		111	110,904 182 (3)	12,80 (8)	1/2	-0,594 886 07 (84)*	
		112	111,902 757 (3)	24,13 (28)	0	0	
		113#	112,904 400 (3)	12,22 (8)	1/2	-0,622 300 92 (87)	
		114	113,903 357 (3)	28,73 (28)	0	0	
		116	115,904 755 (4)	7,49 (12)	0	0	
49	In	113	112,904 061 (4)	4,3 (2)	9/2	+5,528 9 (2)	+79,9
		115#	114,903 882 (4)	95,7 (2)	9/2	+5,540 8 (2)	+81,0*



<i>Z</i>	<i>Símbol</i>	<i>A</i>	<i>Massa atòmica</i> <i>m<sub>a</sub>/u</i>	<i>Abundància</i> <i>isotòpica</i> 100 <i>x</i>	<i>Espín</i> <i>nuclear</i> <i>I</i>	<i>Moment</i> <i>magnètic</i> <i>m/μ<sub>N</sub></i>	<i>Moment</i> <i>quadrupolar</i> <i>Q/fm<sup>2</sup></i>
50	Sn	112	111,904 826 (5)	0,97 (1)	0	0	
		114	113,902 784 (4)	0,65 (1)	0	0	
		115	114,903 348 (3)	0,34 (1)	1/2	-0,918 83 (7)	
		116	115,901 747 (3)	14,53 (11)	0	0	
		117	116,902 956 (3)	7,68 (7)	1/2	-1,001 04 (7)	
		118	117,901 609 (3)	24,23 (11)	0	0	
		119	118,903 311 (3)	8,59 (4)	1/2	-1,047 28 (7)	
		120	119,902 199 1 (29)	32,59 (10)	0	0	
		122	121,903 440 4 (30)	4,63 (3)	0	0	
		124	123,905 274 3 (17)	5,79 (5)	0	0	
51	Sb	121	120,903 821 2 (29)	57,36 (8)	5/2	+3,363 4 (3)	-36 (4)*
		123	122,904 216 0 (24)	42,64 (8)	7/2	+2,549 8 (2)	-49 (5)
52	Te	120	119,904 048 (21)	0,096 (2)	0	0	
		122	121,903 050 (3)	2,603 (4)	0	0	
		123	122,904 271 0 (22)	0,908 (2)	1/2	-0,736 947 8 (8)	
		124	123,902 818 0 (18)	4,816 (6)	0	0	
		125	124,904 428 5 (25)	7,139 (6)	1/2	-0,888 505 13 (43)*	
		126	125,903 309 5 (25)	18,95 (1)	0	0	
		128	127,904 463 (4)	31,69 (1)	0	0	
		130	129,906 229 (5)	33,80 (1)	0	0	
53	I	127	126,904 473 (5)	100	5/2	+2,813 273 (84)	-78,9
54	Xe	124	123,905 894 2 (22)	0,10 (1)	0	0	
		126	125,904 281 (8)	0,09 (1)	0	0	
		128	127,903 531 2 (17)	1,91 (3)	0	0	
		129	128,904 780 1 (21)	26,4 (6)	1/2	-0,777 976 3 (84)	
		130	129,903 509 4 (17)	4,1 (1)	0	0	
		131	130,905 072 (5)	21,2 (4)	3/2	+0,691 861 9 (39)	-12,0 (12)
		132	131,904 144 (5)	26,9 (5)	0	0	
		134	133,905 395 (8)	10,4 (2)	0	0	
		136	135,907 214 (8)	8,9 (1)	0	0	
55	Cs	133	132,905 429 (7)	100	7/2	+2,582 024 6 (34)*	-0,371 (14)*
56	Ba	130	129,906 282 (8)	0,106 (2)	0	0	
		132	131,905 042 (9)	0,101 (2)	0	0	
		134	133,904 486 (7)	2,417 (27)	0	0	
		135	134,905 665 (7)	6,592 (18)	3/2	+0,837 943 (17)*	+16,0 (3)*
		136	135,904 553 (7)	7,854 (36)	0	0	
		137	136,905 812 (6)	11, 23 (4)	3/2	+0,937 365 (20)*	+24,5 (4)*
		138	137,905 232 (6)	71,70 (7)	0	0	

Z	Símbol	A	Massa atòmica $m_a/u$	Abundància isotòpica 100 x	Espín nuclear I	Moment magnètic $m/\mu_N$	Moment quadrupolar $Q/\text{fm}^2$
57	La	138 #	137,907 105 (6)	0,090 2 (2)	5	+3,713 646 (7)	+45 (2)*
		139	138,906 347 (5)	99,909 8 (2)	7/2	+2,783 045 5 (9)	+20 (1)
58	Ce	136	135,907 140 (50)	0,19 (1)	0	0	
		138	137,905 985 (12)	0,25 (1)	0	0	
		140	139,905 433 (4)	88,48 (10)	0	0	
		142	141,909 241 (4)	11,08 (10)	0	0	
59	Pr	141	140,907 647 (4)	100	5/2	+4,275 4 (5)	-5,89 (42)
60	Nd	142	141,907 719 (4)	27,13 (12)	0	0	
		143	142,909 810 (4)	12,18 (6)	7/2	-1,065 (5)	-63 (6)
		144	143,910 083 (4)	23,80 (12)	0	0	
		145	144,912 570 (4)	8,30 (6)	7/2	-0,656 (4)	-33 (3)
		146	145,913 113 (4)	17,19 (9)	0	0	
		148	147,916 889 (4)	5,76 (3)	0	0	
		150	149,920 887 (4)	5,64 (3)	0	0	
61	Pm	145*	144,912 743 (4)		5/2		
62	Sm	144	143,911 998 (4)	3,1 (1)	0	0	
		147 #	146,914 894 (4)	15,0 (2)	7/2	-0,814 8 (7)	-25,9 (26)
		148	147,914 819 (4)	11,3 (1)	0	0	
		149	148,917 180 (4)	13,8 (1)	7/2	-0,671 7 (7)*	+7,5 (8)*
		150	149,917 273 (4)	7,4 (1)	0	0	
		152	151,919 728 (4)	26,7 (2)	0	0	
		154	153,922 205 (4)	22,7 (2)	0	0	
63	Eu	151	150,919 702 (8)	47,8 (15)	5/2	+3,471 7 (6)	+90,3 (10)*
		153	152,921 225 (4)	52,2 (15)	5/2	+1,533 0 (8)*	+241,2 (21)*
64	Gd	152	151,919 786 (4)	0,20 (1)	0	0	
		154	153,920 861 (4)	2,18 (3)	0	0	
		155	154,922 618 (4)	14,80 (5)	3/2	-0,257 23 (35)*	+130 (2)*
		156	155,922 118 (4)	20,47 (4)	0	0	
		157	156,923 956 (4)	15,65 (3)	3/2	-0,337 26 (55)*	+136 (2)*
		158	157,924 019 (4)	24,84 (12)	0	0	
		160	159,927 049 (4)	21,86 (4)	0	0	
65	Tb	159	158,925 342 (4)	100	3/2	+2,014 (4)	+143,2 (8)

Z	Símbol	A	Massa atòmica $m_a/u$	Abundància isotòpica 100 x	Espín nuclear I	Moment magnètic $m/\mu_N$	Moment quadrupolar $Q/\text{fm}^2$
66	Dy	156	155,924 277 (8)	0,06 (1)	0	0	
		158	157,924 403 (5)	0,10 (1)	0	0	
		160	159,925 193 (4)	2,34 (6)	0	0	
		161	160,926 930 (4)	18,9 (2)	5/2	-0,480 3 (25)*	+250,7 (20)*
		162	161,926 795 (4)	25,5 (2)	0	0	
		163	162,928 728 (4)	24,9 (2)	5/2	+0,672 6 (35)	+264,8 (21)
		164	163,929 171 (4)	28,2 (2)	0	0	
67	Ho	165	164,930 319 (4)	100	7/2	+4,173 (27)	+349 (3)*
68	Er	162	161,928 775 (4)	0,14 (1)	0	0	
		164	163,929 198 (4)	1,61 (1)	0	0	
		166	165,930 290 (4)	33,6 (2)	0	0	
		167	166,932 046 (4)	22,95 (15)	7/2	-0,563 85 (12)	+356,5 (29)
		168	167,932 368 (4)	26,8 (2)	0	0	
		170	169,935 461 (4)	14,9 (2)	0	0	
69	Tm	169	168,934 212 (4)	100	1/2	-0,231 6 (15)	
70	Yb	168	167,933 894 (5)	0,13 (1)	0	0	
		170	169,934 759 (4)	3,05 (6)	0	0	
		171	170,936 323 (3)	14,3 (2)	1/2	+0,493 67 (1)*	
		172	171,936 378 (3)	21,9 (3)	0	0	
		173	172,938 208 (3)	16,12 (21)	5/2	-0,679 89 (3)*	+280 (4)
		174	173,938 859 (3)	31,8 (4)	0	0	
		176	175,942 564 (4)	12,7 (2)	0	0	
71	Lu	175	174,940 770 (3)	97,41 (2)	7/2	+2,232 7 (11)*	+349 (2)*
		176#	175,942 679 (3)	2,59 (2)	7	+3,169 2 (45)*	+492 (3)*
72	Hf	174	173,940 044 (4)	0,162 (3)	0	0	
		176	175,941 406 (4)	5,206 (5)	0	0	
		177	176,943 217 (3)	18,606 (4)	7/2	+0,793 5 (6)	+336,5 (29)*
		178	177,943 696 (3)	27,297 (4)	0	0	
		179	178,945 812 2 (29)	13,629 (6)	9/2	-0,640 9 (13)	+379,3 (33)*
		180	179,946 545 7 (30)	35,100 (7)	0	0	
73	Ta	180	179,947 462 (4)	0,012 (2)	8		
		181	180,947 992 (3)	99,988 (2)	7/2	+2,370 5 (7)	+328 (6)*
74	W	180	179,946 701 (5)	0,13 (4)	0	0	
		182	181,948 202 (3)	26,3 (2)	0	0	
		183	182,950 220 (3)	14,3 (1)	1/2	+0,117 784 76 (9)	
		184	183,950 928 (3)	30,67 (15)	0	0	
		186	185,954 357 (4)	28,6 (2)	0	0	

Z	Símbol	A	Massa atòmica $m_a/u$	Abundància isotòpica 100 x	Espín nuclear I	Moment magnètic $m/\mu_N$	Moment quadrupolar $Q/\text{fm}^2$
75	Re	185	184,952 951 (3)	37,40 (2)	5/2	+3,187 1 (3)	+218 (2)*
		187#	186,955 744 (3)	62,60 (2)	5/2	+3,219 7 (3)	+207 (2)*
76	Os	184	183,952488 (4)	0,02 (1)	0	0	
		186	185,953 830 (4)	1,58 (30)	0	0	
		187	186,955 741 (3)	1,6 (3)	1/2	+0,064 651 89 (6)	
		188	187,955 830 (3)	13,3 (7)	0	0	
		189	188,958 137 (4)	16,1 (8)	3/2	+0,659 933 (4)	+85,6 (28)
		190	189,958 436 (4)	26,4 (12)	0	0	
		192	191,961 467 (4)	41,0 (8)	0	0	
77	Ir	191	190,960 584 (4)	37,3 (5)	3/2	+0,150 7 (6)*	+81,6 (9)*
		193	192,962 917 (4)	62,7 (5)	3/2	+0,163 7 (6)*	+75,1 (9)*
78	Pt	190	189,959 917 (7)	0,01 (1)	0	0	
		192	191,961 019 (5)	0,79 (6)	0	0	
		194	193,962 655 (4)	32,9 (6)	0	0	
		195	194,964 766 (4)	33,8 (6)	1/2	+0,609 52 (6)	
		196	195,964 926 (4)	25,3 (6)	0	0	
		198	197,967 869 (6)	7,2 (2)	0	0	
79	Au	197	196,966 543 (4)	100	3/2	+0,148 158 (8)*	+54,7 (16)*
80	Hg	196	195,965 807 (5)	0,15 (1)	0	0	
		198	197,966 743 (4)	9,97 (8)	0	0	
		199	198,968 254 (4)	16,87 (10)	1/2	+0,505 885 49 (85)	
		200	199,968 300 (4)	23,10 (16)	0	0	
		201	200,970 277 (4)	13,18 (8)	3/2	-0,560 225 7 (14)*	+38,5 (40)*
		202	201,970 617 (4)	29,86 (20)	0	0	
81	Tl	203	202,972 320 (5)	29,524 (14)	1/2	+1,622 257 87 (12)	
		205	204,974 401 (5)	70,476 (14)	1/2	+1,638 214 61 (12)	
82	Pb	204	203,973 020 (5)	1,4 (1)	0	0	
		206	205,974 440 (4)	24,1 (1)	0	0	
		207	206,975 872 (4)	22,1 (1)	1/2	+0,582 583 (9)*	
		208	207,976 627 (4)	52,4 (1)	0	0	
83	Bi	209	208,980 374 (5)	100	9/2	+4,110 6 (2)	-37,0 (26)*
84	Po	209*	208,982 404 (5)		1/2		
85	At	210*	209,987 126 (12)				
86	Rn	222*	222,017 571 (3)		0	0	

<i>Z</i>	<i>Símbol</i>	<i>A</i>	<i>Massa atòmica</i> <i>m<sub>a</sub>/u</i>	<i>Abundància</i> <i>isotòpica</i> 100 <i>x</i>	<i>Espín</i> <i>nuclear</i> <i>I</i>	<i>Moment</i> <i>magnètic</i> <i>m/μ<sub>N</sub></i>	<i>Moment</i> <i>quadrupolar</i> <i>Q/fm<sup>2</sup></i>
87	Fr	223*	223,019 733 (4)		3/2	+1,17 (2)	+117 (1)
88	Ra	226*	226,025 403 (3)		0	0	
89	Ac	227*	227,027 750 (3)		3/2	+1,1 (1)	+170 (20)
90	Th	232 #	232,038 050 8 (23)	100	0	0	
91	Pa	231*	231,035 880 (3)		3/2	2,01 (2)	-172 (5)
92	U	233*	233,039 628 (3)		5/2	0,59 (5)	+366,3 (8)
		234 #	234,040 946 8 (24)	0,005 5 (5)	0	0	
		235 #	235,043 924 2 (24)	0,720 0 (12)	7/2	-0,38 (3)*	+455 (9)*
		238 #	238,050 784 7 (23)	99,274 5 (60)	0	0	
93	Np	237*	237,048 167 8 (23)		5/2	+3,14 (4)	+388,6 (6)
94	Pu	244*	244,064 199 (5)		0		
95	Am	243*	243,061 375 (3)		5/2	+1,61 (4)	+420 (130)
96	Cm	247*	247,070 347 (5)				
97	Bk	247*	247,070 300 (6)				
98	Cf	251*	251,079 580 (5)				
99	Es	252*	252,082 944 (23)				
100	Fm	257*	257,095 099 (8)				
101	Md	258*	258,098 57 (22)				
102	No	259*	259,100 931 (12)				
103	Lr	260*	260,105 320 (60)				
104	Rf	261*	261,108 69 (22)				
105	Db	262*	262,113 76 (16)				
106	Sg	263*	263,118 22 (13)				
107	Bh	262*	262,122 93 (45)				
108	Hs	265*	265,130 16 (99)				

<i>Z</i>	<i>Símbol</i>	<i>A</i>	<i>Massa atòmica</i> <i>m<sub>a</sub>/u</i>	<i>Abundància</i> <i>isotòpica</i> 100 <i>x</i>	<i>Espín</i> <i>nuclear</i> <i>I</i>	<i>Moment</i> <i>magnètic</i> <i>m/μ<sub>N</sub></i>	<i>Moment</i> <i>quadrupolar</i> <i>Q/fm<sup>2</sup></i>
109	Mt	266*	266,137 64 (45)				
110	Ds	281*					
111	Rg	272*					
112	Uub	285*					
114	Uuq	289*					
116	Uuh	289*					
[118	Uuo]						

## 7. LA CONVERSIÓ D'UNITATS

Les unitats SI són recomanades per a ús general en ciència i tecnologia. Tanmateix, de vegades s'empren unitats que no són del sistema internacional i, en alguns casos, és probable que continuïn així durant molts anys. És més, en les publicacions científiques s'utilitzen extensament altres unitats. Per això cal convertir freqüentment els valors de les magnituds físiques entre unitats SI i unitats d'altra mena. Aquest capítol procura facilitar aquest procés.

La [secció 7.1](#) presenta exemples que il·lustren l'ús del càlcul de magnituds per a la conversió dels valors de magnituds físiques entre diferents unitats. La taula de la [secció 7.2](#) recull un conjunt d'unitats que no són del sistema internacional emprades en la química i els factors de conversió a les unitats SI corresponents. A la guarda posterior hi ha també dues [taules](#) de factors de conversió: una per a les unitats de pressió (segona pàgina), i una altra per a unitats d'energia i magnituds relacionades —nombre d'ona, freqüència, temperatura i energia molar— (tercera pàgina).

La major part de les dificultats que es presenten a l'hora de convertir unitats entre diferents sistemes té a veure amb les unitats electromagnètiques o amb les unitats atòmiques i llur dependència respecte a les unitats electromagnètiques. En les seccions [7.3](#) i [7.4](#) es desenvolupen amb més detall les relacions entre unitats electromagnètiques i unitats atòmiques, i s'hi forneixen els fonaments dels factors de conversió de la taula de la [secció 7.2](#).

### 7.1. L'ÚS DEL CÀLCUL DE MAGNITUDS

El càlcul de magnituds és un sistema de l'àlgebra en el qual els símbols s'usen de manera coherent per a representar magnituds físiques en comptes de les mesures corresponents, és a dir, llurs valors numèrics en certes unitats. D'aquesta manera, hom considera que el valor de la magnitud física és igual al producte d'un valor nu-

mèric i una unitat (vegeu la [secció 1.1](#)) i que els símbols de les magnituds físiques, els valors numèrics i les unitats es poden tractar segons les regles ordinàries de l'àlgebra.<sup>1</sup> Aquest sistema és el recomanat per a ús general en ciència. El càlcul de magnituds presenta particulars avantatges perquè facilita la resolució dels problemes de conversió entre diferents unitats i diferents sistemes d'unitats, tal com mostren els exemples següents. En tots aquests exemples, els valors numèrics són aproximats.

### Exemple 1

La longitud d'ona  $\lambda$  d'una de les ratlles grogues del sodi és donada per

$$\lambda = 5,896 \times 10^{-7} \text{ m} \quad \text{o} \quad \lambda/m = 5,896 \times 10^{-7}$$

L'àngstrom es defineix per l'equació (vegeu la [taula 7.2](#), sota l'epígraf «longitud»)

$$1 \text{ \AA} = \overset{\circ}{\text{A}} = 10^{-10} \text{ m} \quad \text{o} \quad \text{m}/\overset{\circ}{\text{A}} = 10^{10}$$

En substituir en la primera equació, s'obté el valor de  $\lambda$  en unitats àngstrom:

$$\lambda/\overset{\circ}{\text{A}} = (\lambda/\text{m})(\text{m}/\overset{\circ}{\text{A}}) = (5,896 \times 10^{-7})(10^{10}) = 5\,896$$

o

$$\lambda = 5\,896 \text{ \AA}$$

### Exemple 2

La pressió de vapor de l'aigua a 20 °C és

$$p(\text{H}_2\text{O}, 20 \text{ °C}) = 17,5 \text{ Torr}$$

El torr, el bar i l'atmosfera es defineixen mitjançant les equacions següents (vegeu la taula de la [secció 7.2](#), sota l'epígraf «pressió»):

$$\begin{aligned} \text{Torr} &\approx 133,3 \text{ Pa} \\ \text{bar} &= 10^5 \text{ Pa} \\ \text{atm} &= 101\,325 \text{ Pa} \end{aligned}$$

1. Un nom més adequat per al càlcul de magnituds seria *àlgebra de magnituds*, atès que es basa en els principis de l'àlgebra i no en els del càlcul.



Per tant,

$$\begin{aligned} p(\text{H}_2\text{O}, 20\text{ }^\circ\text{C}) &= 17,5 \times 133,3 \text{ Pa} = 2,33 \text{ kPa} \\ &= (2,33 \times 10^3 / 10^5) \text{ bar} = 23,3 \text{ mbar} \\ &= (2,33 \times 10^3 / 101\,325) \text{ atm} = 2,30 \times 10^{-2} \text{ atm} \end{aligned}$$

### Exemple 3

Les mesures espectroscòpiques mostren que per al radical metilè,  $\text{CH}_2$ , l'estat excitat  $\tilde{a}^1\text{A}_1$  es troba en un nombre d'ona  $3\,156 \text{ cm}^{-1}$  per damunt de l'estat fonamental  $\tilde{\text{X}}^3\text{B}_1$

$$\tilde{\nu}(\tilde{a} - \tilde{\text{X}}) = T_0(\tilde{a}) - T_0(\tilde{\text{X}}) = 3\,156 \text{ cm}^{-1}$$

L'energia d'excitació des de l'estat triplet fonamental fins a l'estat singlet excitat és, per tant,

$$\begin{aligned} \Delta E &= hc\tilde{\nu} = (6,626 \times 10^{-34} \text{ J s})(2,998 \times 10^8 \text{ m s}^{-1})(3\,156 \text{ cm}^{-1}) \\ &= 6,269 \times 10^{-22} \text{ J m cm}^{-1} \\ &= 6,269 \times 10^{-20} \text{ J} = 6,269 \times 10^{-2} \text{ aJ} \end{aligned}$$

on els valors de  $h$  i de  $c$  s'han tret de les constants físiques fonamentals del capítol 5 i s'ha emprat la relació  $\text{m} = 100 \text{ cm}$  o  $\text{m cm}^{-1} = 100$ . Atès que l'electró-volt és donat per les equacions (taula de la [secció 7.2](#), sota l'epígraf «energia»)  $\text{eV} \approx 1,602\,2 \times 10^{-19} \text{ J}$  o  $\text{aJ} \approx (1/0,160\,22) \text{ eV}$

$$\Delta E = (6,269 \times 10^{-2} / 0,160\,22) \text{ eV} = 0,391\,3 \text{ eV}$$

D'una manera semblant, mitjançant l'energia de Hartree (taula de la [secció 7.3](#)),  $E_h = \hbar^2 / m_e a_0^2 \approx 4,359\,8 \text{ aJ}$ , o  $\text{aJ} \approx (1/4,359\,8) E_h$ , l'energia d'excitació en unitats atòmiques és donada per

$$\Delta E = (6,269 \times 10^{-2} / 4,359\,8) E_h = 1,438\,0 \times 10^{-2} E_h$$

Finalment, l'energia d'excitació molar es pot escriure

$$\begin{aligned} \Delta E_m &= L\Delta E \\ &= (6,022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1})(6,269 \times 10^{-2} \text{ aJ}) \\ &= 37,75 \text{ kJ mol}^{-1} \end{aligned}$$

i atès que  $\text{kcal} = 4,184 \text{ kJ}$  o  $\text{kJ} = (1/4,184) \text{ kcal}$ ,

$$\Delta E_m = (37,75 / 4,184) \text{ kcal mol}^{-1} = 9,023 \text{ kcal mol}^{-1}$$

Cal notar que, en l'exemple, els factors de conversió no són nombres purs, sinó que tenen dimensions i inclouen les constants físiques fonamentals  $h$ ,  $c$ ,  $e$ ,  $m_e$ ,  $a_0$  i  $L$ . També, en aquest exemple es podrien haver emprat directament els factors de conversió de la taula de la tercera pàgina de la guarda posterior.

#### Exemple 4

La conductivitat molar,  $\Lambda$ , d'un electròlit és definida per l'equació (vegeu la p. 85)

$$\Lambda = \kappa / c$$

on  $\kappa$  és la conductivitat de la solució de l'electròlit menys la conductivitat del dissolvent pur, i  $c$  és la concentració de l'electròlit. Les conductivitats dels electròlits s'expressen habitualment en  $\text{S cm}^{-1}$  i les concentracions, en  $\text{mol dm}^{-3}$ ; per exemple,  $\kappa(\text{KCl}) = 7,39 \times 10^{-5} \text{ S cm}^{-1}$  per a  $c(\text{KCl}) = 0,000\,500 \text{ mol dm}^{-3}$ . La conductivitat molar es pot calcular, doncs, de la manera següent:

$$\begin{aligned} \Lambda &= (7,39 \times 10^{-5} \text{ S cm}^{-1}) / (0,000\,500 \text{ mol dm}^{-3}) \\ &= 0,147\,8 \text{ S mol}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ dm}^3 = 147,8 \text{ S mol}^{-1} \text{ cm}^2 \end{aligned}$$

atès que  $\text{dm}^3 = 1\,000 \text{ cm}^3$ . La relació anterior s'havia escrit freqüentment, i encara de vegades es fa, d'una altra manera:

$$\Lambda = 1\,000 \kappa / c$$

Tanmateix, d'aquesta manera els símbols *no* representen magnituds físiques sinó *valors numèrics* de magnituds físiques en certes unitats. En particular, l'última equació només és correcta si  $\Lambda$  és la conductivitat molar en  $\text{S mol}^{-1} \text{ cm}^2$ ,  $\kappa$  la conductivitat en  $\text{S cm}^{-1}$  i  $c$  la concentració en  $\text{mol dm}^{-3}$ . Cal evitar aquesta formació, ja que no segueix les regles de càlcul de magnituds. L'equació  $\Lambda = \kappa / c$ , on els símbols representen magnituds físiques, és vàlida per a qualsevol unitat. Si es vol escriure la relació entre valors numèrics cal emprar l'equació

$$\Lambda / (\text{S mol}^{-1} \text{ cm}^2) = \frac{1\,000 \kappa / (\text{S cm}^{-1})}{c / (\text{mol dm}^{-3})}$$

#### Exemple 5

Una solució de  $0,125 \text{ mol}$  d'un solut B en  $953 \text{ g}$  del dissolvent S té una molaritat  $m_B$  donada per<sup>2</sup>

2. Fixeu-vos en la confusió de notació:  $m_B$  indica molaritat i  $m_s$  indica massa. Tanmateix, gairebé sempre s'usen aquests símbols. Vegeu la nota 16, p. 64.

$$m_B = n_B/m_S = (0,125/953) \text{ mol g}^{-1} = 0,131 \text{ mol kg}^{-1}$$

La fracció molar del solut es pot calcular aproximadament amb l'equació

$$x_B = n_B/(n_S + n_B) \approx n_B/n_S = m_B M_S$$

on se suposa que  $n_B \ll n_S$ .

Si el dissolvent és aigua, amb una massa molar de  $18,015 \text{ g mol}^{-1}$ , aleshores

$$x_B \approx (0,131 \text{ mol kg}^{-1})(18,015 \text{ g mol}^{-1}) = 2,36 \text{ g/kg} = 0,00236$$

Les equacions anteriors apareixen de vegades sota la forma  $m_B = 1000 n_B/m_S$  i  $x_B \approx m_B M_S/1000$ . Tanmateix, aquest *no* és un ús correcte del càlcul de magnituds físiques en certes unitats; concretament, s'ha suposat que  $m_B$ ,  $m_S$  i  $M_S$  indiquen valors numèrics en  $\text{mol kg}^{-1}$ ,  $\text{g}$  i  $\text{g mol}^{-1}$ , respectivament. Una manera correcta d'escriure la segona equació seria, per exemple,

$$x_B = (m_B/\text{mol kg}^{-1})(M_S/\text{g mol}^{-1})/1000$$

### Exemple 6

La susceptibilitat magnètica dels materials paramagnètics es pot determinar experimentalment i es pot usar per a obtenir informació sobre el moment dipolar magnètic molecular  $i$ , per tant, sobre l'estructura electrònica de les molècules en el material. La contribució paramagnètica a la susceptibilitat magnètica molar d'un material,  $\chi_m$ , està relacionada amb el moment dipolar magnètic molecular,  $m$ , mitjançant la relació de Curie

$$\chi_m = \chi V_m = \mu_0 N_A m^2 / 3kT$$

Expressada en funció de la susceptibilitat no racionalitzada,  $\chi^{(nr)}$ ,<sup>#</sup> que és emprada freqüentment en relació amb els sistemes d'unitats ues, uem i gaussià (vegeu la [secció 7.3](#) més endavant), aquesta equació esdevé

$$\chi_m^{(nr)} = \chi^{(nr)} V_m = (\mu_0 / 4\pi) N_A m^2 / 3kT$$

En resoldre aquesta equació per a  $m$  i expressant el resultat en funció del magnetó de Bohr  $\mu_B$ , tenim

$$m/\mu_B = (3k/\mu_0 N_A)^{1/2} \mu_B^{-1} (\chi_m T)^{1/2}$$

<sup>#</sup> En anglès, el superíndex <sup>(nr)</sup> ('no racionalitzat') es representa <sup>(ir)</sup> ('irrational'). (Nota de l'ed.)

Finalment, substituint els valors de les constants fonamentals  $\mu_B$ ,  $k$ ,  $\mu_0$  i  $N_A$ , donades en el [capítol 5](#), resulta

$$\begin{aligned} m/\mu_B &= 0,797\,7[\chi_m/(\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1})]^{1/2}[T/\text{K}]^{1/2} \\ &= 2,828[\chi_m^{(\text{nr})}/(\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1})]^{1/2}[T/\text{K}]^{1/2} \end{aligned}$$

Aquestes equacions són útils per a càlculs pràctics. El resultat final s'expressa habitualment de la manera següent:

$$m/\mu_B = 2,828(\chi_m T)^{1/2}$$

on se suposa, en contra dels convenis del càlcul de magnituds, que  $\chi_m$  i  $T$  representen els *valors numèrics* de la susceptibilitat molar i la temperatura en unitats  $\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1}$  i K, respectivament, i on també s'ha suposat (encara que rarament s'indica) que la susceptibilitat és definida emprant equacions electromagnètiques no racionalitzades (vegeu la [secció 7.3](#) més endavant).

## 7.2. TAULES DE CONVERSIÓ D'UNITATS

La [taula](#) següent recull els factors de conversió de diverses unitats en la corresponent unitat SI. En la secció anterior ja s'han donat exemples d'aplicació d'aquesta taula. De cada magnitud física se'n dona el nom, seguit pel símbol o els símbols recomanats. És dona la unitat SI, seguida per la ues, la uem, la unitat gaussiana (Gau), la unitat atòmica (ua) i altres unitats d'ús habitual, amb els factors de conversió a l'SI. La constant  $\zeta$  que apareix en alguns dels factors de conversió electromagnètics és el nombre pur (exacte)  $2,997\,924\,58 \times 10^{10} = c_0/(\text{cm s}^{-1})$ .

El fet de recollir unitats que no són del sistema internacional en aquesta taula no vol dir que s'en pretengui fomentar l'ús. Amb poques excepcions, les unitats SI s'han de preferir sempre a les que no ho són. No obstant això, com que moltes d'aquestes unitats es troben sovint en la bibliografia científica, és convenient tabular la relació que tenen amb les de l'SI.

Per conveniència, les unitats dels sistemes ues i gaussià es donen en funció de les quatre dimensions *longitud*, *massa*, *temps* i *càrrega elèctrica*, amb la inclusió del franklin (Fr) com a abreviació de la unitat electrostàtica de càrrega i  $4\pi\epsilon_0$  com una constant de dimensions  $(\text{càrrega})^2/(\text{energia} \times \text{longitud})$ . D'aquesta manera, cada magnitud física té les mateixes dimensions en tots els sistemes, i tots els factors de conversió són nombres purs. Els factors  $4\pi\epsilon_0$  i el Fr es poden eliminar escrivint  $\text{Fr} = \text{ues de càrrega} = \text{erg}^{1/2} \text{cm}^{1/2} = \text{cm}^{3/2} \text{g}^{1/2} \text{s}^{-1}$  i  $4\pi\epsilon_0 = \epsilon_0^{(\text{nr})} = 1 \text{Fr}^2 \text{erg}^{-1} \text{cm}^{-1} = 1$ , per tal de recuperar expressions ues en funció de tres unitats de base (vegeu la [secció 7.3](#), més endavant). Cal considerar el símbol Fr com una representació condensada de «(ues de càrrega)».

Els valors dels factors de conversió es donen exactes (i aleshores es posa el signe =) o amb l'aproximació amb què es coneixen les constants físiques corresponents (i es posa el signe ≈). En aquest últim cas, la incertesa és sempre inferior a ± 5 de l'última xifra donada.

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Relació amb l'SI</i>
<i>longitud, l</i>		
metre (unitat SI)	m	
centímetre (unitat cgs)	cm	= $10^{-2}$ m
bohr (ua)	$a_0, b$	= $4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2 \approx 5,291\ 77 \times 10^{-11}$ m
àngstrom	Å	= $10^{-10}$ m
micra, micròmetre	μ	= μm = $10^{-6}$ m
mil·limicra	mμ	= nm = $10^{-9}$ m
unitat X	X	≈ $1,002 \times 10^{-13}$ m
fermi	f, fm	= fm = $10^{-15}$ m
polzada	in	= $2,54 \times 10^{-2}$ m
peu	ft	= 12 in = 0,304 8 m
iarda	yd	= 3 ft = 0,914 4 m
milla	mi	= 1 760 yd = 1 609,344 m
milla nàutica		= 1 852 m
unitat astronòmica <sup>#</sup>	AU, UA	= $1,496\ 00 \times 10^{11}$ m
parsec	pc	≈ $3,085\ 68 \times 10^{16}$ m
any llum <sup>##</sup>	l. y., a. ll.	≈ $9,460\ 528 \times 10^{15}$ m
segon llum		= 299 792 458 m
<i>superfície, A</i>		
metre quadrat (unitat SI)	m <sup>2</sup>	
barn	b	= $10^{-28}$ m <sup>2</sup>
acre		≈ 4 046,856 m <sup>2</sup>
àrea	a	= 100 m <sup>2</sup>
hectàrea	ha	= $10^4$ m <sup>2</sup>
<i>volum, V</i>		
metre cúbic (unitat SI)	m <sup>3</sup>	
litre	l, L	= dm <sup>3</sup> = $10^{-3}$ m <sup>3</sup>
lambda	λ	= μl = $10^{-6}$ dm <sup>3</sup>
barril (EUA)		≈ 158,987 dm <sup>3</sup>
galó (EUA)	gal (EUA)	= 3,785 41 dm <sup>3</sup>
galó (RU)	gal (RU)	= 4,546 09 dm <sup>3</sup>
<i>massa, m</i>		
kilogram (unitat SI)	kg	
gram (unitat cgs)	g	= $10^{-3}$ kg

<sup>#</sup> En català el símbol d'unitat astronòmica, AU ('*astronomic unit*'), es pot escriure també UA. (N. de l'ed.)

<sup>##</sup> En català el símbol d'any llum, l. y. ('*light year*'), es pot escriure també a. ll. (N. de l'ed.)

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Relació amb l'SI</i>
massa de l'electró (ua)	$m_e$	$\approx 9,109\,39 \times 10^{-31}$ kg
unitat de massa atòmica unificada, dalton	u, Da	$= m_a(^{12}\text{C})/12 \approx 1,660\,540 \times 10^{-27}$ kg
gamma	$\gamma$	= $\mu\text{g}$
tona	t	= $\text{Mg} = 10^3$ kg
lliura ( <i>avoirdupois</i> )	lb	= 0,453 592 37 kg
unça ( <i>avoirdupois</i> )	oz	$\approx 28,349\,5$ g
unça ( <i>troy</i> )	oz ( <i>troy</i> )	$\approx 31,103\,5$ g
gra	gr	= 64,798 91 mg
<i>temps, t</i>		
segon (unitat SI i cgs)	s	
ua <sup>#</sup> de temps	$\hbar/E_h$	$\approx 2,418\,88 \times 10^{-17}$ s
minut	min	= 60 s
hora	h	= 3 600 s
dia <sup>1</sup>	d	= 86 400 s
any <sup>2</sup>	a	$\approx 31\,556\,592$ s
svedberg	S, Sv	= $10^{-13}$ s
<i>acceleració, a</i>		
unitat SI	$\text{m s}^{-2}$	
acceleració estàndard de caiguda lliure	$g_n$	= 9,806 65 $\text{ms}^{-2}$
gal, galileu	Gal	= $10^{-2}$ $\text{m s}^{-2}$
<i>força, F</i>		
newton (unitat SI) <sup>3</sup>	N	= $\text{kg m s}^{-2}$
dina (unitat cgs)	dyn	= $\text{g cm s}^{-2} = 10^{-5}$ N
ua de força	$E_h/a_0$	$\approx 8,238\,73 \times 10^{-8}$ N
kilogram-força	kgf	= 9,806 65 N
<i>energia, U</i>		
joule (unitat SI)	J	= $\text{kg m}^2 \text{s}^{-2}$
erg (unitat cgs)	erg	= $\text{g cm}^2 \text{s}^{-2} = 10^{-7}$ J
hartree (ua)	$E_h$	= $\hbar^2/m_e a_0^2 \approx 4,359\,75 \times 10^{-18}$ J
rydberg	Ry	= $E_h/2 \approx 2,179\,87 \times 10^{-18}$ J
electró-volt	eV	= $e \times V \approx 1,602\,18 \times 10^{-19}$ J
caloria termoquímica	cal <sub>th</sub>	= 4,184 J
caloria internacional	cal <sub>IT</sub>	= 4,186 8 J
caloria a 15 °C	cal <sub>15</sub>	$\approx 4,185\,5$ J
atmosfera litre	l atm	= 101,325 J
unitat tèrmica britànica	Btu	= 1 055,06 J

# En català, el símbol d'unitat atòmica, au ('atomic unit'), es pot escriure també ua. (N. de l'ed.)

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Relació amb l'SI</i>
<i>pressió, p</i>		
pascal (unitat SI)	Pa	= $\text{N m}^{-2} = \text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$
atmosfera	atm	= 101 325 Pa
bar	bar	= $10^5$ Pa
torr	Torr	= (101 325/760) Pa $\approx 133,322$ Pa
mil·límetre de mercuri (convencional)	mmHg	= $13,595 1 \times 980,665 \times 10^{-2}$ Pa $\approx 133,322$ Pa
lliures per polzada quadrada	psi	$\approx 6,894 757 \times 10^3$ Pa
<i>potència, P</i>		
watt (unitat SI)	W	= $\text{kg m}^2 \text{s}^{-3}$
cavall de vapor	hp	= 745,7 W
<i>acció, L, J (moment angular)</i>		
unitat SI	J s	= $\text{kg m}^2 \text{s}^{-1}$
unitat cgs	erg s	= $10^{-7}$ J s
ua d'acció	$\hbar$	= $\hbar/2\pi \approx 1,054 57 \times 10^{-34}$ J s
<i>viscositat dinàmica, <math>\eta</math></i>		
unitat SI	Pa s	= $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$
poise	P	= $10^{-1}$ Pa s
centipoise	cP	= mPa s
<i>viscositat cinemàtica, <math>\nu</math></i>		
unitat SI	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	
stokes	St	= $10^{-4}$ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
<i>temperatura termodinàmica, T</i>		
kelvin (unitat SI)	K	
grau Rankine <sup>4</sup>	°R	= (5/9) K
<i>entropia, S</i>		
<i>capacitat calorífica, C</i>		
unitat SI	J K <sup>-1</sup>	
clàusius	Cl	= $\text{cal}_{\text{th}}/\text{K} = 4,184$ J K <sup>-1</sup>
<i>entropia molar, S<sub>m</sub></i>		
<i>capacitat calorífica molar, C<sub>m</sub></i>		
unitat SI	J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup>	
unitat d'entropia	u. e.	= $\text{cal}_{\text{th}} \text{K}^{-1} \text{mol}^{-1} = 4,184$ J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup>

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Relació amb l'SI</i>
<i>volum molar, <math>V_m</math></i>		
unitat SI	$\text{m}^3 \text{mol}^{-1}$	
amagat <sup>5</sup>	amagat	= $V_m$ de gas real a 1 atm i 273,15 K $\approx 22,4 \times 10^{-3} \text{m}^3 \text{mol}^{-1}$
<i>densitat en quantitat de substància, <math>1/V_m</math></i>		
unitat SI	$\text{mol m}^{-3}$	
amagat <sup>5</sup>	amagat	= $1/V_m$ de gas real a 1 atm i 273,15 K $\approx 44,6 \text{mol m}^{-3}$
<i>angle pla, <math>\alpha</math></i>		
radian (unitat SI)	rad	
grau	°	= rad $\times 2\pi/360 \approx (1/57,295\ 78)$ rad
minut	'	= grau/60
segon	"	= grau/3 600
grau centesimal	grad	= rad $\times 2\pi/400 \approx (1/63,661\ 98)$ rad
<i>radioactivitat, <math>A</math></i>		
becquerel (unitat SI)	Bq	= $\text{s}^{-1}$
curie	Ci	= $3,7 \times 10^{10}$ Bq
<i>dosi absorbida<sup>6</sup> (de radiació)</i>		
gray (unitat SI)	Gy	= $\text{J kg}^{-1}$
rad	rad	= 0,01 Gy
<i>dosi equivalent (de radiació)</i>		
sievert (unitat SI)	Sv	= $\text{J kg}^{-1}$
rem	rem	$\approx 0,01$ Sv
<i>intensitat de corrent elèctric, <math>I</math></i>		
ampere (unitat SI)	A	
esu, ues, # Gau	$(10/\zeta)\text{A}$	$\approx 3,335\ 64 \times 10^{-10}$ A
biot (uem)	Bi	= 10 A
ua	$eE_h/\hbar$	$\approx 6,623\ 62 \times 10^{-3}$ A
<i>càrrega elèctrica, <math>Q</math></i>		
coulomb (unitat SI)	C	= A s
franklin (ues, Gau)	Fr	= $(10/\zeta)\text{C} \approx 3,335\ 64 \times 10^{-10}$ C
uem (abcoulomb)		= 10 C
càrrega del protó (ua)	$e$	$\approx 1,602\ 18 \times 10^{-19}$ C $\approx 4,803\ 21 \times 10^{-10}$ Fr

# En català, el símbol d'unitat electrostàtica, esu ('*electrostatic unit*'), es pot escriure també ues. (N. de l'ed.)



<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Relació amb l'SI</i>
<i>densitat de càrrega, <math>\rho</math></i>		
unitat SI	C m <sup>-3</sup>	
ues, Gau	Fr cm <sup>-3</sup>	= 10 <sup>7</sup> ζ <sup>-1</sup> C m <sup>-3</sup> ≈ 3,335 64 × 10 <sup>-4</sup> C m <sup>-3</sup>
ua	ea <sub>0</sub> <sup>-3</sup>	≈ 1,081 20 × 10 <sup>-12</sup> C m <sup>-3</sup>
<i>potencial elèctric, V, <math>\phi</math></i>		
volt (unitat SI)	V	= J C <sup>-1</sup> = J A <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>
ues, Gau	erg Fr <sup>-1</sup>	= Fr cm <sup>-1</sup> /4π $\epsilon_0$ = 299,792 458 V
«cm <sup>-1</sup> » <sup>7</sup>	e cm <sup>-1</sup> /4π $\epsilon_0$	≈ 1,439 97 × 10 <sup>-7</sup> V
ua	e/4π $\epsilon_0 a_0$	= E <sub>h</sub> /e ≈ 27,211 4 V
volt internacional mitjà		= 1,000 34 V
volt internacional [dels] EUA		= 1,000 330 V
<i>resistència elèctrica, R</i>		
ohm (unitat SI)	Ω	= V A <sup>-1</sup> = m <sup>2</sup> kg s <sup>-3</sup> A <sup>-2</sup>
ohm internacional mitjà		= 1,000 49 Ω
ohm internacional [dels] EUA		= 1,000 495 Ω
<i>intensitat de camp elèctric, E</i>		
unitat SI	V m <sup>-1</sup>	= J C <sup>-1</sup> m <sup>-1</sup>
ues, Gau	Fr cm <sup>-2</sup> /4π $\epsilon_0$	= 2,997 924 58 × 10 <sup>4</sup> V m <sup>-1</sup>
«cm <sup>-2</sup> » <sup>7</sup>	e cm <sup>-2</sup> /4π $\epsilon_0$	≈ 1,439 97 × 10 <sup>-5</sup> V m <sup>-1</sup>
ua	e/4π $\epsilon_0 a_0^2$	≈ 5,142 21 × 10 <sup>11</sup> V m <sup>-1</sup>
<i>gradient de camp elèctric, E'<sub>αβ</sub>, q<sub>αβ</sub></i>		
unitat SI	V m <sup>-2</sup>	= J C <sup>-1</sup> m <sup>-2</sup>
ues, Gau	Fr cm <sup>-3</sup> /4π $\epsilon_0$	= 2,997 924 58 × 10 <sup>6</sup> V m <sup>-2</sup>
«cm <sup>-3</sup> » <sup>7</sup>	e cm <sup>-3</sup> /4π $\epsilon_0$	≈ 1,439 97 × 10 <sup>-3</sup> V m <sup>-2</sup>
ua	e/4π $\epsilon_0 a_0^3$	≈ 9,717 36 × 10 <sup>21</sup> V m <sup>-2</sup>
<i>moment dipolar elèctric, p, <math>\mu</math></i>		
unitat SI	C m	
ues, Gau	Fr cm	≈ 3,335 64 × 10 <sup>-12</sup> C m
debye	D	= 10 <sup>-18</sup> Fr cm ≈ 3,335 64 × 10 <sup>-30</sup> C m
«cm», longitud del dipol <sup>7</sup>	e cm	≈ 1,602 18 × 10 <sup>-21</sup> C m
ua	ea <sub>0</sub>	≈ 8,478 36 × 10 <sup>-30</sup> C m
<i>moment quadrupolar elèctric, Q<sub>αβ</sub>, <math>\Theta_{\alpha\beta}</math>, eQ</i>		
unitat SI	C m <sup>2</sup>	
ues, Gau	Fr cm <sup>2</sup>	≈ 3,335 64 × 10 <sup>-14</sup> C m <sup>2</sup>
«cm <sup>2</sup> », àrea del quadrupol <sup>7</sup>	e cm <sup>2</sup>	≈ 1,602 18 × 10 <sup>-23</sup> C m <sup>2</sup>
ua	ea <sub>0</sub> <sup>2</sup>	≈ 4,486 55 × 10 <sup>-40</sup> C m <sup>2</sup>

<i>Nom</i>	<i>Símbol</i>	<i>Relació amb l'SI</i>
<i>polaritzabilitat, <math>\alpha</math></i>		
unitat SI	$\text{J}^{-1} \text{C}^2 \text{m}^2$	$= \text{F m}^2$
ues, Gau, «cm <sup>3</sup> », volum de polaritzabilitat <sup>7</sup>	$4\pi\epsilon_0 \text{cm}^3$	$\approx 1,112\ 65 \times 10^{-16} \text{J}^{-1} \text{C}^2 \text{m}^2$
«Å <sup>3</sup> » <sup>7</sup>	$4\pi\epsilon_0 \text{Å}^3$	$\approx 1,112\ 65 \times 10^{-40} \text{J}^{-1} \text{C}^2 \text{m}^2$
ua	$4\pi\epsilon_0 a_0^3$	$\approx 1,648\ 78 \times 10^{-41} \text{J}^{-1} \text{C}^2 \text{m}^2$
<i>desplaçament elèctric, D</i>		
<i>polarització (volum), P</i>		
unitat SI	$\text{C m}^{-2}$	
ues, Gau	$\text{Fr cm}^{-2}$	$= (10^5/\zeta) \text{C m}^{-2} \approx 3,335\ 64 \times 10^{-6} \text{C m}^{-2}$
(Però tingueu en compte que l'ús de les unitats ues o gaussiana per al desplaçament elèctric implica generalment que es fa referència al desplaçament no racionalitzat, $D^{(nr)} = 4\pi D$ . Vegeu la <a href="#">secció 7.4</a> .)		
<i>densitat de flux magnètic, B</i>		
<i>(camp magnètic)</i>		
tesla (unitat SI)	T	$= \text{J A}^{-1} \text{m}^{-2} = \text{V s m}^{-2} = \text{Wb m}^{-2}$
gauss (emu, uem, <sup>#</sup> Gau)	G	$= 10^{-4} \text{T}$
ua	$\hbar/ea_0^2$	$\approx 2,350\ 52 \times 10^5 \text{T}$
<i>flux magnètic, <math>\Phi</math></i>		
weber (unitat SI)	Wb	$= \text{J A}^{-1} = \text{V s}$
maxwell (uem, Gau)	Mx	$= \text{G cm}^{-2} = 10^{-8} \text{Wb}$
<i>intensitat de camp magnètic, H</i>		
<i>imantació (volum), M</i>		
unitat SI	$\text{A m}^{-1}$	$= \text{C s}^{-1} \text{m}^{-1}$
oersted (uem, Gau)	Oe	$= 10^3 \text{A m}^{-1}$
(Però tingueu en compte que, en la pràctica, l'oersted, Oe, s'usa només com a unitat de $H^{(nr)} = 4\pi H$ ; així que si $H^{(nr)} = 1 \text{Oe}$ , $H = (10^3/4\pi) \text{A m}^{-1}$ . Vegeu la <a href="#">secció 7.4</a> .) <sup>##</sup>		
<i>moment dipolar magnètic, m, <math>\mu</math></i>		
unitat SI	$\text{A m}^2$	$= \text{J T}^{-1}$
uem, Gau	$\text{erg G}^{-1}$	$= 10 \text{A cm}^2 = 10^{-3} \text{J T}^{-1}$
magnetó de Bohr <sup>8</sup>	$\mu_B$	$= e\hbar/2m_e \approx 9,274\ 02 \times 10^{-24} \text{J T}^{-1}$
ua	$e\hbar/m_e$	$= 2\mu_B \approx 1,854\ 80 \times 10^{-23} \text{J T}^{-1}$
magnetó nuclear	$\mu_N$	$= (m_e/m_p)\mu_B \approx 5,050\ 79 \times 10^{-27} \text{J T}^{-1}$
<i>magnetitzabilitat, <math>\xi</math></i>		
unitat SI	$\text{J T}^{-2}$	$= \text{C}^2 \text{m}^2 \text{kg}^{-1}$
ua	$e^2 a_0^2/m_e$	$\approx 7,891\ 04 \times 10^{-29} \text{J T}^{-2}$

# En català, el símbol d'unitat electromagnètica, emu ('*electromagnetic unit*'), es pot escriure també uem. (N. de l'ed.)

## En anglès, el superíndex<sup>(nr)</sup> ('no racionalitzat'), es representa <sup>(ir)</sup> ('*irrational*'). (N. de l'ed.)

Nom	Símbol	Relació amb l'SI
<i>susceptibilitat magnètica, <math>\chi, \kappa</math></i>		
unitat SI	1	
uem, Gau	1	
(Però tingueu en compte que en la pràctica les susceptibilitats expressades en uem o unitats gaussianes són sempre valors de $\chi^{(nr)} = \chi/4\pi$ ; així que si $\chi^{(nr)} = 10^{-6}$ , $\chi = 4\pi \times 10^{-6}$ . Vegeu la <a href="#">secció 7.3</a> .)		
<i>susceptibilitat magnètica molar, <math>\chi_m</math></i>		
unitat SI	$\text{m}^3 \text{mol}^{-1}$	
uem, Gau	$\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$	$= 10^{-6} \text{m}^3 \text{mol}^{-1}$
(Tanmateix, tingueu en compte que, en la pràctica, les unitats $\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$ impliquen generalment que la susceptibilitat molar no racionalitzada quedi definida, $\chi_m^{(nr)} = \chi_m/4\pi$ ; així, per exemple, si $\chi_m^{(nr)} = -15 \times 10^{-6} \text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$ , que freqüentment s'escriu com «-15 ppm cgs», llavors, $\chi_m = -1,88 \times 10^{-10} \text{m}^3 \text{mol}^{-1}$ . Vegeu la <a href="#">secció 7.3</a> .)		

- 1) Tingueu en compte que el dia no és exactament igual al nombre de segons indicat, ja que els anomenats *segons de traspàs* se sumen o es resten del dia cada mig any per tal de mantenir el pas mitjà anual de la mitjanit a les 24.00 hores.
- 2) L'any no és commensurable amb el dia i no és una constant. Abans del 1967, quan fou introduït l'estàndard atòmic, l'any tròpic 1900 serví de base per a la definició del segon. En l'època del 1900,0, un any era igual a  $365,242\ 198\ 79\ \text{d} \approx 31\ 556\ 925,975\ \text{s}$  i disminuïa 0,530 s per segle. Els anys del calendari són exactament definits en termes de dies:

$$\begin{aligned} \text{any julià} &= 365,25\ \text{d} \\ \text{any gregorià} &= 365,242\ 5\ \text{d} \end{aligned}$$

La definició de la taula correspon a l'any gregorià. Aquest és una mitjana basada en un any de 365 dies, amb anys de traspàs de 366 dies; els anys de traspàs són els que el nombre de l'any és divisible per 4 però no és divisible per 100, «o bé» quan és divisible per 400. Si l'any 3200 serà un any de traspàs, és encara una qüestió oberta, però no cal que sigui resolta fins en algun moment de mitjan segle XXXII.

- 3) 1 N és aproximadament la força exercida per la Terra sobre una poma.
- 4)  $T/^\circ\text{R} = (9/5) T/\text{K}$ . També, la temperatura Celsius,  $\theta$ , es relaciona amb la temperatura termodinàmica  $T$ , per l'equació

$$\theta / ^\circ\text{C} = T/\text{K} - 273,15$$

De manera similar, la temperatura Fahrenheit,  $\theta_F$ , està relacionada amb la temperatura Celsius,  $\theta$ , per l'equació

$$\theta_F / ^\circ\text{F} = (9/5) (\theta / ^\circ\text{C}) + 32$$

- 5) Malauradament, el nom *amagat* s'usa com a unitat tant per al volum molar com per a la densitat en quantitat de substància. El seu valor és lleugerament diferent per a cada gas i reflecteix la desviació del comportament ideal del gas considerat.
- 6) La unitat roentgen, emprada per a expressar l'exposició a les radiacions X o  $\gamma$ , és igual a  $R = 2,58 \times 10^{-4} \text{C kg}^{-1}$ .

- 7) Les unitats entre cometes des de potencial elèctric fins a polaritzabilitat apareixen de vegades en la bibliografia, encara que són totalment incorrectes; cal reemplaçar-les en cada cas per les unitats donades en la columna de símbols. Així, per exemple, quan un moment quadrupolar apareix en «cm<sup>2</sup>», la unitat correcta és e cm<sup>2</sup>, i quan una polaritzabilitat apareix en «Å<sup>3</sup>», la unitat correcta és 4πϵ<sub>0</sub>Å<sup>3</sup>.
- 8) El magnetó de Bohr μ<sub>B</sub> de vegades es representa MB (o M. B.), però aquesta grafia no és recomanable.

### 7.3. ELS SISTEMES ues, uem, GAUSSIÀ I D'UNITATS ATÒMIQUES

Les equacions SI de la teoria electromagnètica s'usen generalment amb magnituds físiques en unitats SI, particularment les quatre unitats m, kg, s i A per a longitud, massa, temps i intensitat del corrent elèctric. Les equacions fonamentals per a la força electrostàtica entre les càrregues Q<sub>1</sub> i Q<sub>2</sub>, i per a la força electromagnètica entre els elements de corrent I<sub>1</sub>dI<sub>1</sub> i I<sub>2</sub>dI<sub>2</sub>, en el buit, són

$$F = Q_1 Q_2 \mathbf{r} / 4\pi \epsilon_0 r^3 \quad (1a)$$

$$F = (\mu_0 / 4\pi) I_1 dI_1 \times (I_2 dI_2 \times \mathbf{r}) / r^3 \quad (1b)$$

Les magnituds físiques ε<sub>0</sub> i μ<sub>0</sub> són la permitivitat i la permeabilitat del buit, respectivament, i tenen els valors

$$\epsilon_0 = (10^7 / 4\pi c_0^2) \text{ kg}^{-1} \text{ m}^{-1} \text{ C}^2 \approx 8,854\,188 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ m}^{-1} \text{ J}^{-1} \quad (2a)$$

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ N A}^{-2} \approx 1,256\,637 \times 10^{-6} \text{ N A}^{-2} \quad (2b)$$

El valor de μ<sub>0</sub> procedeix de la definició de l'ampere (secció 3.2), expressada de manera que dóna per a μ<sub>0</sub> el valor indicat a (2b). El valor de ε<sub>0</sub> s'obté mitjançant la relació

$$\epsilon_0 \mu_0 = 1/c_0^2 \quad (3)$$

on c<sub>0</sub> és la velocitat de la llum en el buit.

La constant numèrica 4π s'introdueix en les definicions de ε<sub>0</sub> i μ<sub>0</sub> atesa la simetria esfèrica implicada en les equacions (1); d'aquesta manera s'evita que aparegui en equacions posteriors referents a sistemes de simetria rectangular. Quan s'introdueix el factor 4π d'aquesta manera, com en l'SI, les equacions s'anomenen *racionalitzades*. La forma alternativa *no racionalitzada* o *irracional* de les equacions electromagnètiques es discuteix més endavant.

Altres sistemes d'unitats i equacions emprats comunament en la teoria electromagnètica, a més de l'SI, són els sistema ues, el uem, el gaussià i el d'unitats atòm-

miques. La conversió des de l'SI a aquests altres sistemes es pot entendre tenint en compte els passos següents.

Primer, tots els sistemes alternatius usen equacions escrites de manera no racionalitzada en lloc de la forma racionalitzada emprada per l'SI. Això comporta canvis de factors de  $4\pi$  i la redefinició de certes magnituds físiques. Segon, en cada cas es fa una elecció particular d'unitats per tal d'obtenir per a  $\epsilon_0$  i  $\mu_0$  un valor elegit simple. Tercer, en el cas dels sistemes ues, uem i gaussià (però no en el cas d'unitats atòmiques), s'abandona el sistema de quatre unitats de base (i quatre dimensions independents) a favor d'un altre amb només tres unitats de base (i tres dimensions independents) mitjançant una definició escaientment triada de la càrrega elèctrica o de la intensitat de corrent elèctric en funció de la longitud, la massa i el temps. Més endavant tractarem amb detall aquests canvis. Finalment, ateses les complicacions resultants de l'elecció opcional de relacions racionalitzades o no racionalitzades i dels modes alternatius d'escollir les dimensions fonamentals, les equacions de la teoria electromagnètica són distintes en els diferents sistemes. La conversió de les equacions entre l'SI i els altres sistemes són resumides en la [taula 7.4](#).

## I) CANVI A MAGNITUDS I EQUACIONS NO RACIONALITZADES

Les equacions (1) es poden escriure en la forma no racionalitzada de quatre magnituds definint unes noves magnituds  $\epsilon_0^{(nr)}$  i  $\mu_0^{(nr)}$ , de manera que (1a) i (1b) passen a ser

$$F = Q_1 Q_2 \mathbf{r} / \epsilon_0^{(nr)} r^3 \quad (4a)$$

$$\mathbf{F} = \mu_0^{(nr)} I_1 d\mathbf{l}_1 \times (I_2 d\mathbf{l}_2 \times \mathbf{r}) / r^3 \quad (4b)$$

Les noves magnituds estan relacionades amb  $\epsilon_0$  i  $\mu_0$  mitjançant les equacions

$$\epsilon_0^{(nr)} = 4\pi \epsilon_0 \quad (5a)$$

$$\mu_0^{(nr)} = \mu_0 / 4\pi \quad (5b)$$

Quan les equacions de la teoria electromagnètica s'escriuen d'aquesta manera alternativa no racionalitzada, es defineixen, a més de  $\epsilon_0^{(nr)}$  i  $\mu_0^{(nr)}$ , altres sis noves magnituds,  $\epsilon^{(nr)}$ ,  $\mu^{(nr)}$ ,  $D^{(nr)}$ ,  $H^{(nr)}$ ,  $\chi_e^{(nr)}$  (susceptibilitat elèctrica) i  $\chi^{(nr)}$  (susceptibilitat magnètica). Les definicions de les altres magnituds resten inalterables. Les noves magnituds es designen, en cada cas, amb el superíndex <sup>(nr)</sup>, de 'no racionalitzat'.<sup>#</sup>

<sup>#</sup> En anglès, el superíndex <sup>(nr)</sup> ('no racionalitzat') es representa <sup>(ir)</sup> ('irrational'). (Nota de l'ed.)

Aquestes noves magnituds es defineixen en funció de les racionalitzades mitjançant les equacions

$$\varepsilon^{(\text{nr})} = 4\pi\varepsilon \quad (6a)$$

$$\mu^{(\text{nr})} = \mu/4\pi \quad (6b)$$

$$D^{(\text{nr})} = 4\pi D \quad (7a)$$

$$H^{(\text{nr})} = 4\pi H \quad (7b)$$

$$\chi_e^{(\text{nr})} = \chi_e/4\pi \quad (8a)$$

$$\chi^{(\text{nr})} = \chi/4\pi \quad (8b)$$

Totes les equacions de la teoria electromagnètica es poden transformar ara de la forma SI a la forma no racionalitzada emprant les equacions (5a, 5b), (6a, 6b), (7a, 7b) i (8a, 8b) per tal d'eliminar  $\varepsilon_0$ ,  $\mu_0$ ,  $\varepsilon$ ,  $\mu$ ,  $D$ ,  $H$ ,  $\chi_e$  i  $\chi$  de les equacions SI i substituir-les per les magnituds no racionalitzades corresponents que es distingeixen pel superíndex <sup>(nr)</sup>.

La notació amb un superíndex <sup>(nr)</sup>, emprada aquí per a distingir les magnituds no racionalitzades de les seves homòlogues racionalitzades definides de manera diferent, és difícil de manejar. Tanmateix, en la bibliografia és habitual, malauradament, usar el mateix símbol per a les magnituds  $\varepsilon$ ,  $\mu$ ,  $D$ ,  $H$ ,  $\chi_e$  i  $\chi$ , sigui quina sigui la definició emprada (i el conjunt d'equacions corresponent). És com si els físics atòmics i els físics moleculars utilitzessin el mateix símbol  $h$  per a la constant de Planck i per a la constant de Planck dividida per  $2\pi$ . Afortunadament, en aquest cas, s'han adoptat dos símbols diferents,  $h$  i  $\hbar$ , i així es poden escriure equacions com  $h = 2\pi\hbar$ . Sense aquesta distinció en la notació, és impossible escriure equacions com ara (5), (6), (7) i (8), i és difícil discutir les relacions entre les equacions i les magnituds SI racionalitzades i les seves equivalents no racionalitzades ues i uem. Per aquesta raó s'ha adoptat aquí aquesta notació bastant enfarfegadora per tal de distingir magnituds definides per diferents equacions en els distints sistemes.

## II) EL SISTEMA ues

El sistema ues es basa en equacions i magnituds no racionalitzades i es pot descriure en funció de quatre unitats de base i quatre dimensions independents, o bé, com és més normal, en funció de tres unitats de base i tres dimensions independents.

Quan s'usen quatre unitats de base, es prenen cm, g i s per a longitud, massa i temps, i el franklin<sup>1</sup> (símbol, Fr) per a la ues de càrrega, escollint el valor d'1 Fr

1. El nom *franklin*, símbol Fr, per a la ues de càrrega fou suggerit per Guggenheim fa més de seixanta anys (*Nature*, 148 (1941), p. 751). Per bé que no ha tingut una acceptació generalitzada,

de manera que  $\varepsilon_0^{(nr)} = 1 \text{ Fr}^2/\text{erg cm}$ . Una definició equivalent del franklin és que dues càrregues d'1 Fr, separades per la distància d'1 cm en el buit, es repel·leixen amb una força d'una dina. D'aquestes quatre unitats, en deriven d'altres mitjançant les regles usals de construcció d'un sistema coherent d'unitats a partir d'un conjunt d'unitats de base.

L'altra manera, més habitual, del sistema ues es basteix sobre tres unitats de base i tres dimensions independents únicament. Això s'assoleix definint les dimensions de la càrrega elèctrica com  $[(\text{energia}) \times (\text{longitud})]^{1/2}$ , de manera que  $1 \text{ Fr}^2 = 1 \text{ erg cm}$ . Llavors, desapareix el Fr com a unitat i la constant  $\varepsilon_0^{(nr)}$  és adimensional i igual a 1, de manera que es pot ometre en totes les equacions. Així, per exemple, l'equació (4a) per a la força entre càrregues en el buit passa a ser

$$F = Q_1 Q_2 r / r^3 \quad (9)$$

Això significa també que la permitivitat d'un medi dielèctric,  $\varepsilon^{(nr)}$ , és exactament la mateixa que la permitivitat relativa o constant dielèctrica  $\varepsilon_r$ , de manera que només es necessita una d'aquestes magnituds, anomenada senzillament *permitivitat*,  $\varepsilon$ . Finalment, atès que  $\varepsilon_0^{(nr)} = 1$ , les equacions (3) i (5) exigeixen que  $\mu_0^{(nr)} = 1/c_0^2$ .

En resum, la transformació d'equacions del sistema SI de quatre magnituds al sistema ues de tres magnituds s'aconsegueix per mitjà de les substitucions  $\varepsilon_0 = 1/4\pi$ ,  $\mu_0 = 4\pi/c_0^2$ ,  $\varepsilon = \varepsilon_r/4\pi$ ,  $D = D^{(nr)}/4\pi$  i  $\chi_e = 4\pi\chi_e^{(nr)}$ .

### III) EL SISTEMA uem

El sistema uem es basa també en equacions i magnituds no racionalitzades i es pot descriure, d'una manera semblant, en funció de quatre o de tres unitats de base.

Quan s'usen quatre unitats de base, es prenen cm, g, s i la unitat d'intensitat de corrent elèctric, que s'anomena *uem d'intensitat de corrent*. Aquesta s'escull de manera que el seu valor compleixi l'equació  $\mu_0^{(nr)} = 1 \text{ cm g s}^{-2}$  (uem d'intensitat de corrent)<sup>-2</sup>. Una definició equivalent de la uem d'intensitat de corrent és que la força entre dos fils metàl·lics paral·lels separats per la distància d'1 cm en el buit, per cadascun dels quals passa 1 uem d'intensitat de corrent, és de 2 dyn per cm de fil metàl·lic. En comparar-la amb la definició de l'ampere, resulta que 1 (uem d'intensitat de corrent) = 10 A. D'aquestes quatre unitats, en deriven d'altres mitjançant les regles usals.<sup>2</sup>

---

aquest nom i aquest símbol s'usen aquí per conveniència com una expressió compacta per a la ues de càrrega. El nom *statcoulomb* s'ha emprat també per a la ues de càrrega.

2. El nom *biot*, de símbol Bi, s'ha emprat per a la «(uem d'intensitat de corrent)».

En la descripció més freqüent del sistema uem només s'usen tres unitats de base i tres dimensions independents. La dimensió «(intensitat de corrent elèctric)» es defineix (força)<sup>1/2</sup>, de manera que 1 (uem d'intensitat de corrent)<sup>2</sup> = 1 g cm s<sup>-2</sup> = 1 dyn. Llavors, (uem d'intensitat de corrent) desapareix com a unitat, i la constant  $\mu_0^{(nr)}$  és adimensional i igual a 1, de manera que es pot ometre en totes les equacions. Així, per exemple, l'equació (4b) de la força entre dos elements de corrent en el buit passa a ser

$$F = I_1 d\mathbf{l}_1 \times (I_2 d\mathbf{l}_2 \times \mathbf{r})/r^3 \quad (10)$$

La permeabilitat d'un medi magnètic  $\mu^{(nr)}$  és idèntica a la permeabilitat relativa o constant magnètica  $\mu_r$  i s'anomena simplement *permeabilitat*. Finalment, en el sistema uem,  $\varepsilon_0^{(nr)} = 1/c_0^2$ .

En resum, la transformació d'equacions del sistema SI de quatre magnituds al sistema uem de tres magnituds s'aconsegueix per mitjà de les substitucions  $\mu_0 = 4\pi$ ,  $\varepsilon_0 = 1/4\pi c_0^2$ ,  $\mu = 4\pi\mu_r$ ,  $H = H^{(nr)}/4\pi$  i  $\chi = 4\pi\chi^{(nr)}$ .

#### IV) EL SISTEMA GAUSSIÀ

El sistema gaussià és una barreja dels sistemes ues i uem, expressat en funció de tres unitats de base, tot i que en l'electrostàtica s'usa el sistema ues i en l'electrodinàmica, el sistema uem. Es tracta, doncs, d'un sistema híbrid, la qual cosa porta a complicacions tant en les equacions com en les unitats.

En la forma habitual del sistema gaussià, les magnituds següents es defineixen com en el sistema ues: càrrega  $Q$ , intensitat de corrent  $I$ , camp elèctric  $E$ , desplaçament elèctric  $D^{(nr)}$ , potencial elèctric  $V$ , polarització  $P$ , moment dipolar elèctric  $p$ , susceptibilitat elèctrica  $\chi_e^{(nr)}$ , polaritzabilitat  $\alpha$  i capacitat  $C$ .

Les magnituds següents es defineixen com en el sistema uem: densitat de flux magnètic  $B$ , flux magnètic  $\Phi$ , potencial magnètic  $A$ , camp magnètic  $H^{(nr)}$ , imantació  $M$ , susceptibilitat magnètica  $\chi^{(nr)}$ , moment dipolar magnètic  $m$  i magnetitzabilitat  $\xi$ . Ni  $\varepsilon_0^{(nr)}$  ni  $\mu_0^{(nr)}$ , als quals s'assigna el valor 1, apareixen en les equacions gaussianes; la permitivitat és  $\varepsilon^{(nr)} = \varepsilon_r$ , i la permeabilitat  $\mu^{(nr)} = \mu_r$ . Tanmateix, per efecte de l'equació (3), cada magnitud física del sistema ues difereix, en valor numèric i dimensions, de la corresponent magnitud uem en alguna potència de  $c_0$ . Així doncs, la conversió de cada equació SI de la teoria electromagnètica a la forma gaussiana introdueix factors  $c_0$  necessaris per a assegurar-ne la coherència interna.

Les transformacions de les equacions més importants entre el sistema gaussià i l'SI són donades més endavant en la [taula 7.4](#).



### V) LES UNITATS ATÒMIQUES [8] (vegeu també la secció 3.8, p. 101)

Les anomenades *unitats atòmiques* són constants fonamentals (o la combinació d'aquestes constants) que apareixen en els càlculs d'estructures electròniques atòmiques i moleculars, i que, per conveniència, es tracten com si fossin unitats. Hom les pot considerar com un sistema coherent d'unitats bastit sobre les quatre dimensions independents longitud, massa, temps i càrrega elèctrica. (La resta de dimensions de l'SI no apareixen en els càlculs d'estructures electròniques.) Tanmateix, les unitats atòmiques es defineixen d'una manera més convenient si s'escull un conjunt diferent per a les quatre dimensions de base, a saber: massa, càrrega, acció (moment angular) i longitud. S'elegeix com a unitat de massa de base la massa de l'electró en repòs,  $m_e$ ; com a unitat de càrrega de base, la càrrega elemental  $e$ ; com a unitat de base d'acció,  $\hbar = h/2\pi$  (on  $h$  és la constant de Planck), i com a unitat de base de longitud,  $a_0$ , que es defineix per  $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2$ . En prendre aquestes quatre unitats com a unitats de base, resulta que la unitat d'energia, anomenada *hartree* i representada per  $E_h$ , és donada per  $E_h = \hbar^2/m_e a_0^2$ , i que  $4\pi\epsilon_0 = e^2/E_h a_0$ . (L'última relació s'assembla a la relació  $4\pi\epsilon_0 = Fr^2/\text{erg cm}$  en el sistema ues de quatre magnituds.)

La unitat atòmica d'energia, *hartree*,  $E_h$ , és (aproximadament) el doble de l'energia d'ionització de l'àtom d'hidrogen en el seu estat fonamental 1s. La unitat atòmica de longitud  $a_0$ , el bohr, és aproximadament la distància de màxima densitat radial, des del nucli de l'orbital 1s de l'àtom d'hidrogen. És clar que només quatre de les cinc unitats  $m_e$ ,  $e$ ,  $\hbar$ ,  $E_h$  i  $a_0$  són independents; s'interrelacionen mitjançant

$$E_h = \hbar^2/m_e a_0^2 = e^2/4\pi\epsilon_0 a_0 = m_e e^4/(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 \quad (11)$$

Els factors de conversió de unitats atòmiques a l'SI figuren en la taula de la secció 7.2 (p. 141) i les cinc unitats atòmiques que tenen noms i símbols especials (descrites abans) i les altres unitats atòmiques són recollides en la taula de la secció 3.8 (p. 102).

La importància de les unitats atòmiques radica en el fet que els càlculs *ab initio* de la química teòrica donen necessàriament els resultats en unitats atòmiques (és a dir, com a múltiples de  $m_e$ ,  $e$ ,  $\hbar$ ,  $E_h$  i  $a_0$ ). De vegades es descriuen com a «unitats naturals» dels càlculs electrònics de la química teòrica. En realitat, els resultats d'aquests càlculs tan sols es poden expressar en altres unitats (com les de l'SI) emprant els millors valors coneguts al seu moment per a les constants físiques  $m_e$ ,  $e$ ,  $\hbar$ , etc., expressats en unitats SI. Així, per als químics teòrics, el més adient és expressar llurs resultats en unitats atòmiques i, per al lector, si s'escau, convertir-los a altres unitats. Aquesta és també la raó per la qual les unitats atòmiques s'escriuen en cursiva, en comptes dels caràcters en rodona emprats en general per a les unitats: les unitats atòmiques són magnituds físiques escollides entre les constants

físiques fonamentals dels càlculs d'estructura electrònica. No hi ha, tanmateix, autorització de la CGPM per a anomenar *unitats* aquestes magnituds, malgrat que siguin tractades com a unitats i siguin anomenades *unitats atòmiques* pels qui treballen en aquest camp.

Alguns autors que usen unitats atòmiques utilitzen els símbols habituals de les magnituds físiques per a representar els valors numèrics de les esmentades magnituds en la forma (*magnitud física*)/(*unitat atòmica*), amb la qual cosa totes les magnituds apareixen com a nombres purs. Així, per exemple, l'equació de Schrödinger per a l'àtom d'hidrogen s'escriu en l'SI de la manera següent:

$$-(\hbar^2/2m_e)\nabla_r^2\psi - (e^2/4\pi\epsilon_0 r)\psi = E\psi \quad (12)$$

on  $\nabla_r$  indica la derivació respecte a  $r$ . Dividint per  $E_h$  i tenint en compte (11), resulta

$$-\frac{1}{2}a_0^2\nabla_r^2\psi - (a_0/r)\psi = (E/E_h)\psi \quad (13)$$

Si ara definim  $\rho = r/a_0$  i  $E' = E/E_h$ , de manera que  $\rho$  i  $E'$  siguin nombres adimensionals que donen el valors numèrics de  $r$  i  $E$  en unitats atòmiques, aleshores (13) podem escriure

$$-\frac{1}{2}\nabla_\rho^2\psi - (1/\rho)\psi = E'\psi \quad (14)$$

on  $\nabla_\rho$  indica derivació respecte a  $\rho$ . L'equació (14), en la qual cada coeficient de  $\psi$  és adimensional, es descriu generalment «expressada en unitats atòmiques», i és la forma adoptada usualment pels químics teòrics. Malgrat que d'aquesta manera es perd la potencialitat de l'anàlisi dimensional, el simbolisme té l'avantatge de la simplicitat. En usar aquesta forma, cal distingir les magnituds adimensionals, indicades aquí per  $\rho$  i  $E'$ , de les magnituds físiques habituals  $r$  i  $E$ , però molts autors no fan distinció ni de símbol ni de nom.

Alguns autors utilitzen també el símbol «ua» (o l'abreviatura «u. a.») per a qualsevol unitat atòmica, en comptes de la combinació adient dels símbols explícits  $m_e$ ,  $e$ ,  $\hbar$ ,  $E_h$  i  $a_0$ , però cal evitar aquesta pràctica. En les taules de les seccions 3.8 (p. 102) i 7.2 (p. 141) es donen les combinacions adients de  $m_e$ ,  $e$ ,  $\hbar$ ,  $E_h$  i  $a_0$  per a les unitats de diverses magnituds físiques.

#### Exemples

$$\begin{array}{ll} E = -0,345 E_h, & \text{però no } -0,345 \text{ unitats atòmiques} \\ r = 1,567 a_0, & \text{però no } 1,567 \text{ u. a. o } 1,567 \text{ ua} \end{array}$$

#### 7.4. TRANSFORMACIÓ DE LES EQUACIONS DE LA TEORIA ELECTROMAGNÈTICA ENTRE L'SI, LA FORMA NO RACIONALITZADA DE QUATRE MAGNITUDS I LA FORMA GAUSSIANA

Noteu que les equacions ues es poden obtenir de les equacions no racionalitzades de quatre magnituds si fem  $\epsilon_0^{(nr)} = 1$  i  $\mu_0^{(nr)} = 1/c_0^2$ ; les equacions uem es poden obtenir si fem  $\mu_0^{(nr)} = 1$  i  $\epsilon_0^{(nr)} = 1/c_0^2$ .

<i>Relació de l'SI</i>	<i>Relació no racionalitzada de quatre magnituds</i>	<i>Relació gaussiana</i>
força sobre una càrrega $Q$ amb velocitat $\mathbf{v}$ : $F = Q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$	$F = Q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$	$F = Q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}/c_0)$
força entre càrregues al buit: $F = Q_1 Q_2 \mathbf{r} / 4\pi \epsilon_0 r^3$	$F = Q_1 Q_2 \mathbf{r} / \epsilon_0^{(nr)} r^3$	$F = Q_1 Q_2 \mathbf{r} / r^3$
potencial al voltant d'una càrrega en el buit: $V = Q / 4\pi \epsilon_0 r$	$V = Q / \epsilon_0^{(nr)} r$	$V = Q / r$
relació entre camp i potencial: $E = -\text{grad } V$	$E = -\text{grad } V$	$E = -\text{grad } V$
camp degut a una distribució de càrrega en el buit: $\text{div } E = \rho / \epsilon_0$	$\text{div } E = 4\pi \rho / \epsilon_0^{(nr)}$	$\text{div } E = 4\pi \rho$
capacitat d'un condensador de plaques paral·leles d'àrea $A$ i separació $d$ : $C = \epsilon_0 \epsilon_r A / d$	$C = \epsilon_0^{(nr)} \epsilon_r A / 4\pi d$	$C = \epsilon_r A / 4\pi d$
moment dipolar elèctric d'una distribució de càrrega: $\mathbf{p} = \int \rho \mathbf{r} dV$	$\mathbf{p} = \int \rho \mathbf{r} dV$	$\mathbf{p} = \int \rho \mathbf{r} dV$
potencial al voltant d'un dipol en el buit: $V = \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / 4\pi \epsilon_0 r^3$	$V = \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \epsilon_0^{(nr)} r^3$	$V = \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / r^3$
energia d'una distribució de càrrega en un camp elèctric: $E_p = QV - \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} + \dots$	$E_p = QV - \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} + \dots$	$E_p = QV - \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} + \dots$
moment dipolar elèctric induït per un camp: $\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E} + \dots$	$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E} + \dots$	$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E} + \dots$
relacions entre $\mathbf{E}$ , $\mathbf{D}$ i $\mathbf{P}$ : $E = (\mathbf{D} - \mathbf{P}) / \epsilon_0$ $E = \mathbf{D} / \epsilon_0 \epsilon_r$	$E = (\mathbf{D}^{(nr)} - 4\pi \mathbf{P}) / \epsilon_0^{(nr)}$ $E = \mathbf{D}^{(nr)} / \epsilon_0^{(nr)} \epsilon_r$	$E = \mathbf{D}^{(nr)} - 4\pi \mathbf{P}$ $E = \mathbf{D}^{(nr)} / \epsilon_r$

<i>Relació de l'SI</i>	<i>Relació no racionalitzada de quatre magnituds</i>	<i>Relació gaussiana</i>
relacions que impliquen la susceptibilitat elèctrica:		
$\epsilon_r = 1 + \chi_e$	$\epsilon_r = 1 + 4\pi\chi_e^{(nr)}$	$\epsilon_r = 1 + 4\pi\chi_e^{(nr)}$
$\mathbf{P} = \chi_e \epsilon_0 \mathbf{E}$	$\mathbf{P} = \chi_e^{(nr)} \epsilon_0^{(nr)} \mathbf{E}$	$\mathbf{P} = \chi_e^{(nr)} \mathbf{E}$
força entre elements de corrent en el buit:		
$\mathbf{F} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{Id\mathbf{l}_1 \times (Id\mathbf{l}_2 \times \mathbf{r})}{r^3}$	$\mathbf{F} = \frac{\mu_0^{(nr)}}{r^3} Id\mathbf{l}_1 \times (Id\mathbf{l}_2 \times \mathbf{r})$	$\mathbf{F} = \frac{Id\mathbf{l}_1 \times (Id\mathbf{l}_2 \times \mathbf{r})}{c_0^2 r^3}$
força sobre un element de corrent en un camp:		
$\mathbf{F} = Id\mathbf{l} \times \mathbf{B}$	$\mathbf{F} = Id\mathbf{l} \times \mathbf{B}$	$\mathbf{F} = Id\mathbf{l} \times \mathbf{B}/c_0$
potencial degut a un element de corrent en el buit:		
$A = (\mu_0/4\pi)(Id\mathbf{l}/r)$	$A = \mu_0^{(nr)} Id\mathbf{l}/r$	$A = Id\mathbf{l}/c_0 r$
relació entre camp i potencial <sup>#</sup>		
$\mathbf{B} = \text{rot } A$	$\mathbf{B} = \text{rot } A$	$\mathbf{B} = \text{rot } A$
camp degut a un element de corrent en el buit:		
$\mathbf{B} = (\mu_0/4\pi)(Id\mathbf{l} \times \mathbf{r}/r^3)$	$\mathbf{B} = \mu_0^{(nr)} Id\mathbf{l} \times \mathbf{r}/r^3$	$\mathbf{B} = Id\mathbf{l} \times \mathbf{r}/c_0 r^3$
camp degut a una densitat de corrent $\mathbf{j}$ en el buit:		
$\text{rot } \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j}$	$\text{rot } \mathbf{B} = 4\pi\mu_0^{(nr)} \mathbf{j}$	$\text{rot } \mathbf{B} = 4\pi\mathbf{j}/c_0$
dipol magnètic d'un llaç de corrent d'àrea $dA$ :		
$\mathbf{m} = I dA$	$\mathbf{m} = I dA$	$\mathbf{m} = I dA/c_0$
potencial al voltant d'un dipol magnètic en el buit:		
$A = (\mu_0/4\pi)(\mathbf{m} \times \mathbf{r}/r^3)$	$A = \mu_0^{(nr)} \mathbf{m} \times \mathbf{r}/r^3$	$A = \mathbf{m} \times \mathbf{r}/c_0 r^3$
energia d'un dipol magnètic en un camp:		
$E_p = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$	$E_p = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$	$E_p = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$
dipol magnètic induït per un camp:		
$\mathbf{m} = \xi \mathbf{B}$	$\mathbf{m} = \xi \mathbf{B}$	$\mathbf{m} = \xi \mathbf{B}$
relacions entre $\mathbf{B}$ , $\mathbf{H}$ i $\mathbf{M}$ :		
$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M})$	$\mathbf{B} = \mu_0^{(nr)}(\mathbf{H}^{(nr)} + 4\pi\mathbf{M})$	$\mathbf{B} = \mathbf{H}^{(nr)} + 4\pi\mathbf{M}$
$\mathbf{B} = \mu_0\mu_r \mathbf{H}$	$\mathbf{B} = \mu_0^{(nr)} \mu_r \mathbf{H}^{(nr)}$	$\mathbf{B} = \mu_r \mathbf{H}^{(nr)}$
relacions que impliquen la susceptibilitat magnètica:		
$\mu_r = 1 + \chi$	$\mu_r = 1 + 4\pi\chi^{(nr)}$	$\mu_r = 1 + 4\pi\chi^{(nr)}$
$\mathbf{M} = \chi \mathbf{B}/\mu_0$	$\mathbf{M} = \chi^{(nr)} \mathbf{B}/\mu_0^{(nr)}$	$\mathbf{M} = \chi^{(nr)} \mathbf{B}$

# En anglès, el símbol  $\text{rot } A$  ('rotacional  $A$ ') es representa també  $\text{curl } A$ . (Nota de l'ed.)

<i>Relació de l'SI</i>	<i>Relació no racionalitzada de quatre magnituds</i>	<i>Relació gaussiana</i>
relació de Curie: $\chi_m = V_m \chi$ $= L\mu_0 m^2 / 3kT$	$\chi_m^{(nr)} = V_m \chi^{(nr)}$ $= L\mu_0^{(nr)} m^2 / 3kT$	$\chi_m^{(nr)} = V_m \chi^{(nr)}$ $= Lm^2 / 3kT$
equacions de Maxwell: $\operatorname{div} \mathbf{D} = \rho$ $\operatorname{div} \mathbf{B} = 0$ $\operatorname{rot} \mathbf{E} + \partial \mathbf{B} / \partial t = 0^\#$ $\operatorname{rot} \mathbf{H} - \partial \mathbf{D} / \partial t = 0^\#$	$\operatorname{div} \mathbf{D}^{(nr)} = 4\pi\rho$ $\operatorname{div} \mathbf{B} = 0$ $\operatorname{rot} \mathbf{E} + \partial \mathbf{B} / \partial t = 0$ $\operatorname{rot} \mathbf{H}^{(nr)} - \partial \mathbf{D}^{(nr)} / \partial t = 0$	$\operatorname{div} \mathbf{D}^{(nr)} = 4\pi\rho$ $\operatorname{div} \mathbf{B} = 0$ $\operatorname{rot} \mathbf{E} + \frac{1}{c_0} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0$ $\operatorname{rot} \mathbf{H}^{(nr)} - \frac{1}{c_0} \frac{\partial \mathbf{D}^{(nr)}}{\partial t} = 0$
densitat d'energia de radiació: $U/V = (\mathbf{E} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{H}) / 2$	$U/V = \frac{\mathbf{E} \cdot \mathbf{D}^{(nr)} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{H}^{(nr)}}{8\pi}$	$U/V = \frac{\mathbf{E} \cdot \mathbf{D}^{(nr)} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{H}^{(nr)}}{8\pi}$
velocitat de flux d'energia (vector de Poynting): $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$	$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}^{(nr)} / 4\pi$	$\mathbf{S} = c_0 \mathbf{E} \times \mathbf{H}^{(nr)} / 4\pi$

# En l'edició anglesa,  $\operatorname{rot} \mathbf{E}$  i  $\operatorname{rot} \mathbf{H}$  es representen  $\operatorname{curl} \mathbf{E}$  i  $\operatorname{curl} \mathbf{H}$ , respectivament. (Nota de l'ed.)



## 8. ABREVIACIONS<sup>#</sup>

Les sigles (mots formats amb les lletres inicials de grups de mots significatius que es repeteixen amb freqüència) i les altres abreviacions que no són símbols s'han d'emprar amb moderació. Llevat que estiguin ben establertes (per exemple, UHF, IR), cal definir-les una vegada en cada article que es publiqui i, en general, cal evitar-les en els títols i en els resums. Les abreviatures i les sigles emprades per a magnituds físiques s'haurien de substituir, sempre que sigui possible, pels símbols recomanats de les magnituds (per exemple,  $E_i$  en comptes de IP per a l'energia d'ionització, vegeu la p. 37;  $\rho$  en comptes de *dens.* per a la densitat, vegeu la p. 30). Per a altres recomanacions relatives a les abreviacions, vegeu [46].

Per tal d'ajudar els lectors, donem a continuació una llista d'abreviacions utilitzades sovint, sense que això signifiqui recomanar que s'usin d'una manera generalitzada. En alguns casos, podem trobar sigles angleses escrites amb minúscules i amb majúscules. En la llista només donem la forma d'ús més generalitzada. La IUPAC [47, 48] i Wendisch [75] han publicat llistes més completes per als diferents mètodes espectroscòpics.

---

<sup>#</sup> *Notes a l'edició catalana:* 1. En català, considerem *abreviació* qualsevol representació abreujada d'un mot o d'una expressió. Fan part d'aquesta gran classe les *abreviatures*, les *sigles*, que inclouen els *acrònims*, i els *símbols*, que inclouen els *codis* (cf. el *Diccionari d'abreviacions* de Josep M. Mestres i Josefina Guillén, la segona edició del qual fou publicada per Enciclopèdia Catalana a Barcelona l'any 2001); per tant, els termes anglesos *abbreviation* ('abreviació', 'abreviatura') i *acronym* ('sigla', 'acrònim') no es corresponen exactament amb els conceptes catalans dels termes gràficament més semblants, i per això hem optat per intitular aquest capítol únicament amb la denominació catalana més genèrica. 2. D'altra banda, un criteri general que s'ha de seguir a l'hora de decidir quin vocabulari o quina simbologia es vol emprar en un text científic, en qualsevol idioma, és mantenir tant com sigui possible la uniformitat internacional. Això fa que s'hagi de recomanar de mantenir les formes angleses de les sigles i les altres abreviacions que són d'ús generalitzat per tota la comunitat científica. Hi ha casos, però, en què existeix una tradició antiga d'emprar una forma catalanitzada de la sigla, com és el cas de CLOA (en comptes de LCAO); de l'abreviatura, com és el cas de *c. c.* (en comptes de *d. c.*), o del símbol, com és el cas de *ues* (en comptes de *esu*). Deixem al bon criteri dels autors decidir quina forma han d'utilitzar en un text determinat.

ac	Vegeu <b>ca</b>
A/D	analògic a digital ( <i>analog-to-digital</i> )
AA	absorció atòmica ( <i>atomic absorption</i> )
AAS	espectroscòpia d'absorció atòmica ( <i>atomic absorption spectroscopy</i> )
ACM	model de canal adiabàtic ( <i>adiabatic channel model</i> )
ACT	teoria del complex activat ( <i>activated complex theory</i> )
ADC	convertidor d'analògic a digital ( <i>analog-to-digital converter</i> )
AES	espectroscòpia d'electrons Auger ( <i>Auger electron spectroscopy</i> )
AIUPS	espectroscòpia fotoelectrònica ultraviolada d'angle integrat ( <i>angle-integrated ultraviolet photoelectron spectroscopy amplitude modulated</i> )
AM	amplitud modulada ( <i>amplitude modulated</i> )
amu	Vegeu <b>uma</b>
AO	orbital atòmic ( <i>atomic orbital</i> )
APS	espectroscòpia de potencial d'aparició ( <i>appearance potential spectroscopy</i> )
ARAES	espectroscòpia d'electrons [d']Auger resolts angularment ( <i>angle-resolved Auger electron spectroscopy</i> )
AS	espectroscòpia [d']Auger ( <i>Auger spectroscopy</i> )
ATR	reflexió [interna] total atenuada ( <i>attenuated total [internal] reflection</i> )
au	Vegeu <b>ua</b>
AU	Vegeu <b>UA</b>
bcc	cúbic centrat al cos ( <i>body centred cubic</i> )
BET	Brunauer-Emmett-Teller ( <i>Brunauer-Emmett-Teller</i> )
BIS	espectroscòpia isocromàtica <i>bremsstrahlung</i> ['de frenada'] ( <i>bremsstrahlung isochromat spectroscopy</i> )
BM	magnetó de Bohr ( <i>Bohr magneton</i> ); símbol, $\mu_B$ ; cf. la p. 146
bp	Vegeu <b>pe</b>
Btu	unitat tèrmica britànica ( <i>British thermal unit</i> ); cf. la p. 142
ca	corrent altern ( <i>alternating current</i> )
cc	corrent continu ( <i>direct current</i> )
CARS	dispersió Raman anti-Stokes coherent ( <i>coherent anti-Stokes Raman scattering</i> )
CAS	espai actiu complet ( <i>complete active space</i> )
CAS-SCF	espai actiu complet - camp autoconsistent ( <i>complete active space - self consistent field</i> )
CAT	mitjana calculada de transitoris ( <i>computer average of transients</i> )
CCA	aproximació del clúster acoblat ( <i>coupled cluster approximation</i> )
CCC	concentració crítica de coagulació ( <i>critical coagulation concentration</i> )



ccp	empaquetament cúbic compacte ( <i>cubic close packed</i> )
CD	dicroisme circular ( <i>circular dichroism</i> )
CEELS	espectroscòpia de pèrdua d'energia electrònica característica ( <i>characteristic electron energy loss spectroscopy</i> )
CELS	espectroscòpia de pèrdua d'energia característica ( <i>characteristic energy loss spectroscopy</i> )
CEPA	aproximació del parell d'electrons acoblats ( <i>coupled electron pair approximation</i> )
cgs	centímetre-gram-segon ( <i>centimetre-gram-second</i> )
CI	1) ionització química ( <i>chemical ionization</i> ) 2) interacció configuracional ( <i>configuration interaction</i> )
CIDEP	polarització electrònica dinàmica induïda químicament ( <i>chemically induced dynamic electron polarization</i> )
CIDNP	polarització nuclear dinàmica induïda químicament ( <i>chemically induced dynamic nuclear polarization</i> )
CIMS	espectroscòpia de masses per ionització química ( <i>chemical ionization mass spectroscopy</i> )
CLOA	combinació lineal d'orbitals atòmics ( <i>linear combination of atomic orbitals</i> )
CMC	concentració miscel·lar crítica ( <i>critical micellization concentration</i> )
CNDO	omissió completa de superposició diferencial ( <i>complete neglect of differential overlap</i> )
CSRS	dispersió Raman Stokes coherent ( <i>coherent Stokes Raman scattering</i> )
CT	transferència de càrrega ( <i>charge transfer</i> )
CVD	deposició química de vapor ( <i>chemical vapour deposition</i> )
CW	ona contínua ( <i>continuous wave</i> )
D/A	digital a analògic ( <i>digital-to-analog</i> )
dc	Vegeu <b>cc</b>
de	diàmetre exterior ( <i>outside diameter</i> )
di	diàmetre intern ( <i>inner diameter</i> )
DAPS	espectroscòpia de potencial de desaparició ( <i>disappearance potential spectroscopy</i> )
DLVO	Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeck ( <i>Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeck</i> )
DME	elèctrode de gota de mercuri ( <i>dropping mercury electrode</i> )
DRIFTS	espectroscòpia infraroja de reflectància difusa amb transformada de Fourier ( <i>diffuse reflectance infrared Fourier transform spectroscopy</i> )
DSC	calorímetre diferencial de rastreig ( <i>differential scanning calorimeter</i> )
DTA	anàlisi tèrmica diferencial ( <i>differential thermal analysis</i> )

E1	eliminació unimolecular ( <i>elimination unimolecular</i> )
E2	eliminació bimolecular ( <i>elimination bimolecular</i> )
EC	captura d'electrons ( <i>electron capture</i> )
ECD	detector de captura d'electrons ( <i>electron capture detector</i> )
ED	difracció d'electrons ( <i>electron diffraction</i> )
EDA	[complex] donador-acceptor d'electrons ( <i>electron donor-acceptor [complex]</i> )
EELS	espectroscòpia de pèrdua d'energia electrònica ( <i>electron energy loss spectroscopy</i> )
EI	ionització per impacte d'electrons ( <i>electron impact ionization</i> )
EIS	espectroscòpia d'impacte d'electrons ( <i>electron impact spectroscopy</i> )
EL	electroluminescència ( <i>electroluminescence</i> )
ELDOR	ressonància doble electró-electró ( <i>electron-electron double resonance</i> )
ELEED	difracció elàstica d'electrons de baixa energia ( <i>elastic low energy electron diffraction</i> )
emf	Vegeu <b>FEM</b>
emu	Vegeu <b>uem</b>
ENDOR	ressonància doble electró-nucli ( <i>electron-nuclear double resonance</i> )
EPR	ressonància paramagnètica electrònica ( <i>electron paramagnetic resonance</i> )
ESCA	espectroscòpia electrònica per a aplicacions químiques [o per a anàlisi química] ( <i>electron spectroscopy for chemical applications [or analysis]</i> ); vegeu també <b>XPS</b>
ESR	ressonància d'espín electrònic ( <i>electron spin resonance</i> )
esu	Vegeu <b>ues</b>
ETS	espectroscòpia de transmissió electrònica / espectroscòpia electrònica d'efecte túnel ( <i>electron transmission spectroscopy, electron tunnelling spectroscopy</i> )
eu	Vegeu <b>ue</b>
EV	enllaç de valència ( <i>valence bond</i> )
EXAFS	estructura fina d'absorció de raigs X estesa ( <i>extended X-ray absorption fine structure</i> )
EXAPS	espectroscòpia de potencial d'aparició de raigs X excitats per electrons ( <i>electron excited X-ray appearance potential spectroscopy</i> )
FAB(MS)	[espectroscòpia de masses per] bombardeig amb àtoms ràpids ( <i>fast atom bombardment [mass spectroscopy]</i> )
fcc	cúbic centrat a les cares ( <i>face centred cubic</i> )
FD	desorció de camp ( <i>field desorption</i> )

FEESP	[espectroscòpia de] polarització d'espín d'electrons emesos per efecte de camp ( <i>field-emitted electron spin-polarization [spectroscopy]</i> )
FEM	1) força electromotriu ( <i>electromotive force</i> ) 2) microscòpia [electrònica] d'emissió de camp ( <i>field emission [electron] microscopy</i> )
FES	espectroscòpia d'emissió de camp ( <i>field emission spectroscopy</i> )
FFT	transformada de Fourier ràpida ( <i>fast Fourier transform</i> )
FI	ionització de camp ( <i>field ionization</i> )
FID	1) detector de ionització de flama ( <i>flame ionization detector</i> ) 2) decaïment d'inducció lliure ( <i>free induction decay</i> )
FIM	microscòpia camp-iò ( <i>field-ion microscopy</i> )
FIMS	espectroscòpia de masses camp-iò ( <i>field-ion mass spectroscopy</i> )
FIR	infraroig llunyà ( <i>far-infrared</i> )
FM	freqüència modulada ( <i>frequency modulated</i> )
FPD	detector fotomètric de flama ( <i>flame photometric detector</i> )
FSR	interval espectral lliure; ( <i>free spectral range</i> ); cf. la p. 51
FT	transformada de Fourier ( <i>Fourier transform</i> )
FTD	detector termoiónic de flama ( <i>flame thermionic detector</i> )
FTIR	infraroig amb transformada de Fourier ( <i>Fourier transform infrared</i> )
FWHM	amplària total a la meitat del màxim ( <i>full width at half maximum</i> )
GC	cromatografia de gasos ( <i>gas chromatography</i> )
GLC	cromatografia gas-líquid ( <i>gas-liquid chromatography</i> )
GM	Geiger-Müller ( <i>Geiger-Müller</i> )
GTO	orbital [de] tipus gaussià ( <i>Gaussian-type orbital</i> ); cf. la p. 36
GVB	enllaç de valència generalitzat ( <i>generalized valence bond</i> )
hcp	empaquetament hexagonal compacte ( <i>hexagonal close packed</i> )
HEED	difracció electrònica d'alta energia ( <i>high energy electron diffraction</i> )
HEELS	espectroscòpia de pèrdua d'energia d'electrons d'alta energia ( <i>high energy electron energy loss spectroscopy</i> )
HF	Hartree-Fock ( <i>Hartree-Fock</i> ); cf. la p. 34
hfs	estructura hiperfina [desdoblament hiperfí] ( <i>hyperfine structure [hyperfine splitting]</i> )
HMDE	elèctrode de gota penjant de mercuri ( <i>hanging mercury drop electrode</i> )
HMO	orbital molecular de Hückel ( <i>Hückel molecular orbital</i> ); cf. la p. 33
HOMO	orbital molecular ocupat més alt ( <i>highest occupied molecular orbital</i> )
HPLC	cromatografia líquida d'alta eficàcia ( <i>high-performance liquid chromatography</i> )

HREELS	espectroscòpia d'alta resolució de pèrdua d'energia electrònica ( <i>high-resolution electron energy-loss spectroscopy</i> )
HTS	espectroscòpia de transformada de Hadamard ( <i>Hadamard transform spectroscopy</i> )
HWP	potencial de semiona ( <i>half-wave potential</i> )
I/O	entrada-sortida ( <i>input-output</i> )
IC	circuit integrat ( <i>integrated-circuit</i> )
ICR	ressonància ciclotrònica de ions ( <i>ion cyclotron resonance</i> )
id	Vegeu <a href="#">di</a>
IEP	punt isoelèctric ( <i>isoelectric point</i> )
IEPA	aproximació de parells d'electrons independents ( <i>independent electron pair approximation</i> )
IETS	espectroscòpia d'efecte túnel d'electrons inelàstics ( <i>inelastic electron tunnelling spectroscopy</i> )
ILEED	difracció inelàstica d'electrons de baixa energia ( <i>inelastic low energy electron diffraction</i> )
INDO	omissió incompleta de superposició diferencial ( <i>incomplete neglect of differential overlap</i> )
INDOR	ressonància doble internuclear ( <i>internuclear double resonance</i> )
INS	dispersió inelàstica de neutrons ( <i>inelastic neutron scattering</i> )
IP	potencial d'ionització ( <i>ionization potential</i> ); símbol: $E_i$ ; cf. la <a href="#">p. 37</a>
IPES	espectroscòpia fotoelectrònica inversa ( <i>inverse photoelectron spectroscopy</i> )
IPTS	escala pràctica internacional de temperatures ( <i>international practical temperature scale</i> )
IR	infraroig ( <i>infrared</i> )
IS	espectroscòpia d'ionització ( <i>ionization spectroscopy</i> )
ISS	espectroscòpia de dispersió d'ions ( <i>ion scattering spectroscopy</i> )
L	l·ligand ( <i>ligand</i> )
LASER	amplificació de llum per emissió estimulada de radiació ( <i>light amplification by stimulating emission of radiation</i> )
LC	cromatografia de líquids ( <i>liquid chromatography</i> )
LCAO	Vegeu <a href="#">CLOA</a>
L-CCA	aproximació lineal de clúster acoblat ( <i>linear couplet-cluster approximation</i> )
LCMO	combinació lineal d'orbitals moleculars ( <i>linear combination of molecular orbitals</i> )
LED	díode emissor de llum ( <i>light-emitting diode</i> )

LEED	difracció d'electrons de baixa energia ( <i>low-energy electron diffraction</i> )
LEELS	espectroscòpia de pèrdua d'electrons de baixa energia ( <i>low energy electron loss spectroscopy</i> )
LEES	dispersió d'electrons de baixa energia ( <i>low-energy electron scattering</i> )
LIDAR	detecció i mesurament de llum ( <i>light detection and ranging</i> )
LIF	fluorescència induïda per làser ( <i>laser induced fluorescence</i> )
LIS	separació isotòpica per làser ( <i>laser isotope separation</i> )
LMR	ressonància magnètica làser ( <i>laser magnetic resonance</i> )
LUMO	orbital molecular desocupat més baix ( <i>lowest unoccupied molecular orbital</i> )
M	ió metàl·lic central ( <i>central metal</i> )
MAR	rotació d'angle màgic ( <i>magic-angle rotation</i> )
MAS	gir d'angle màgic ( <i>magic-angle spinning</i> )
MASER	amplificació de microones per emissió estimulada de radiació ( <i>microwave amplification by stimulated emission of radiation</i> )
MBE	epitàxia de feix molecular ( <i>molecular beam epitaxy</i> )
MBGF	funció de Green multicòs ( <i>many body Green's function</i> )
MBPT	teoria de pertorbacions multicòs ( <i>many body perturbation theory</i> )
MC	Monte Carlo ( <i>Monte Carlo</i> )
MCA	analitzador multicanal ( <i>multichannel analyser</i> )
MCD	dicroisme circular magnètic ( <i>magnetic circular dichroism</i> )
MCSCF	camp autoconsistent multiconfiguracional ( <i>multiconfiguration self-consistent field</i> )
MD	dinàmica molecular ( <i>molecular dynamics</i> )
MINDO	omissió incompleta modificada de superposició diferencial ( <i>modified incomplete neglect of differential overlap</i> )
MIR	infraroig intermedi ( <i>mid-infrared</i> )
MKSA	metre-kilogram-segon-ampere ( <i>metre-kilogram-second-ampere</i> )
MM	mecànica molecular ( <i>molecular mechanics</i> )
MO	Vegeu <a href="#">OM</a>
MOCVD	deposició química de vapor d'organometàl·lics ( <i>metal organic chemical vapour deposition</i> )
MOMBE	epitàxia de feix molecular d'organometàl·lics ( <i>metal organic molecular beam epitaxy</i> )
MORD	dispersió rotatòria òptica magnètica ( <i>magnetic optical rotatory dispersion</i> )
MOS	metall-òxid-semiconductor ( <i>metal oxide semiconductor</i> )
mp	Vegeu <a href="#">pf</a>
MPI	ionització multifotònica ( <i>multiphoton ionization</i> )

MPPT	teoria de pertorbacions de Möller-Plesset ( <i>Möller-Plesset perturbation theory</i> )
MP-SCF	camp autoconsistent de Möller-Plesset ( <i>Möller-Plesset self-consistent field</i> )
MRD	dispersió rotatòria magnètica ( <i>magnetic rotatory dispersion</i> )
MRI	representació d'imatges de ressonància magnètica ( <i>magnetic resonance imaging</i> )
MS	espectroscòpia de masses ( <i>mass spectroscopy</i> )
MW	1) microones ( <i>microwave</i> ) 2) <i>Vegeu p. m.</i>
NCE	elèctrode de calomelans normal ( <i>normal calomel electrode</i> )
NEXAFS	estructura fina d'absorció de raigs X prop del límit ( <i>near edge X-ray absorption fine structure</i> )
NIR	infraroig proper ( <i>near-infrared</i> )
NMR	<i>Vegeu RMN</i>
NOE	efecte Overhauser nuclear ( <i>nuclear Overhauser effect</i> )
NQR	ressonància quadrupolar nuclear ( <i>nuclear quadrupole resonance</i> )
NTP	pressió i temperatura normals ( <i>normal temperature and pressure</i> )
od	<i>Vegeu de</i>
ODMR	ressonància magnètica detectada òpticament ( <i>optically detected magnetic resonance</i> )
OM	orbital molecular ( <i>molecular orbital</i> )
ORD	dispersió rotatòria òptica ( <i>optical rotatory dispersion</i> )
pe	punt d'ebullició ( <i>boiling point</i> )
pf	punt de fusió ( <i>melting point</i> )
pm	pes molecular ( <i>molecular weight</i> ); símbol $M_r$ ; cf. la p. 62
PAS	espectroscòpia fotoacústica ( <i>photoacoustic spectroscopy</i> )
PC	cromatografia en paper ( <i>paper chromatography</i> )
PD	<i>Vegeu PED</i>
PED	difracció fotoelectrònica ( <i>photoelectron diffraction</i> )
PES	espectroscòpia fotoelectrònica ( <i>photoelectron spectroscopy</i> )
PIES	espectroscòpia electrònica d'ionització de Penning ( <i>Penning ionization electron spectroscopy</i> ); vegeu també PIS
PIPECO	espectroscòpia de coincidència fotoió-fotoelectró ( <i>photoion-photoelectron coincidence [spectroscopy]</i> )
PIS	espectroscòpia [electrònica] d'ionització de Penning ( <i>Penning ionization [electron] spectroscopy</i> )
ppb	part per mil milions ( <i>part per billion</i> )

pphm	part per cent milions ( <i>part per hundred million</i> )
ppm	part per milió ( <i>part per million</i> )
PPP	Pariser-Parr-Pople ( <i>Pariser-Parr-Pople</i> )
PS	Vegeu PES
PZC	punt de càrrega zero ( <i>point of zero charge</i> )
QMS	espectròmetre de masses quadrupolar ( <i>quadrupole mass spectrometer</i> )
RADAR	detecció i localització per [ones de] ràdio ( <i>radiowave detection and ranging</i> )
RAIRS	espectroscòpia infraroja de reflexió/absorció ( <i>reflection/absorption infrared spectroscopy</i> )
RBS	retrodispersió [d'ions] de Rutherford ( <i>Rutherford [ion] back scattering</i> )
RD	dispersió rotatòria ( <i>rotatory dispersion</i> )
RDE	elèctrode rotatori de disc ( <i>rotating disc electrode</i> )
RDF	funció de distribució radial ( <i>radial distribution function</i> )
REM	microscòpia electrònica de reflexió ( <i>reflection electron microscopy</i> )
REMPI	ionització multifotònica exaltada per ressonància ( <i>resonance enhanced multiphoton ionization</i> )
RF	radiofreqüència ( <i>radio frequency</i> )
RHEED	difracció d'electrons d'alta energia reflectits ( <i>reflection high-energy electron diffraction</i> )
RHF	Hartree-Fock restringit ( <i>restricted Hartree-Fock</i> )
RKR	[potencial de] Rydberg-Klein-Rees ( <i>Rydberg-Klein-Rees [potential]</i> )
RMN	ressonància magnètica nuclear ( <i>nuclear magnetic resonance</i> )
rms	mitjana quadràtica ( <i>root mean square</i> )
RRK	[teoria de] Rice-Ramsperger-Kassel ( <i>Rice-Ramsperger-Kassel [teory]</i> )
RRKM	[teoria de] Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus ( <i>Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus [teory]</i> )
RRS	espectroscòpia Raman de ressonància ( <i>resonance Raman spectroscopy</i> )
RS	espectroscòpia Raman ( <i>Raman spectroscopy</i> )
RSPT	teoria de pertorbacions de Rayleigh-Schrödinger ( <i>Rayleigh-Schrödinger perturbation theory</i> )
S	singlet ( <i>singlet</i> )
S <sub>E</sub>	substitució electròfila ( <i>substitution elecrophilic</i> )
S <sub>N</sub> 1	substitució nucleòfila unimolecular ( <i>substitution nucleophilic unimolecular</i> )
S <sub>N</sub> 2	substitució nucleòfila bimolecular ( <i>substitution nucleophilic bimolecular</i> )

S <sub>N</sub> i	substitució nucleòfila intramolecular ( <i>substitution nucleophilic intramolecular</i> )
SCE	elèctrode de calomelans saturat ( <i>saturated calomel electrode</i> )
SCF	camp autoconsistent ( <i>self-consistent field</i> ); cf. la p. 34
SDCI	interacció de configuració simple i doblement excitada ( <i>singly and doubly excited configuration interaction</i> )
SEFT	transformada de Fourier espín-eco ( <i>spin-echo Fourier transform</i> )
SEM	microscòpia electrònica de rastreig [per reflexió] ( <i>scanning [reflection] electron microscopy</i> )
SEP	bombeig per emissió estimulada ( <i>stimulated emission pumping</i> )
SERS	espectroscòpia Raman intensificada en la superfície ( <i>surface-enhanced Raman spectroscopy</i> )
SESCA	espectroscòpia electrònica de rastreig per a aplicacions químiques ( <i>scanning electron spectroscopy for chemical applications</i> )
SEXAFS	estructura fina d'absorció de raigs X estesa de superfície ( <i>surface extended X-ray absorption fine structure</i> )
SF	fissió espontània ( <i>spontaneous fission</i> )
SHE	elèctrode d'hidrogen estàndard ( <i>standard hydrogen electrode</i> )
SI	sistema internacional d'unitats ( <i>le système international d'unités</i> )
SIMS	espectroscòpia de masses d'ions secundaris ( <i>secondary ion mass spectroscopy</i> )
SOR	radiació de sincrotró orbital ( <i>synchrotron orbital radiation</i> )
SRS	font de radiació sincrotrònica ( <i>synchrotron radiation source</i> )
STEM	microscòpia [electrònica] de transmissió de rastreig ( <i>scanning transmission [electron] microscopy</i> )
STM	microscòpia [electrònica] d'efecte túnel de rastreig ( <i>scanning tunneling [electron] microscopy</i> )
STO	orbital tipus Slater / orbital de Slater ( <i>Slater-type orbital</i> ); cf. la p. 36
STP	pressió i temperatura estàndards ( <i>standard temperature and pressure</i> )
T	triplet ( <i>triplet</i> )
TCC	cel·la de conductivitat tèrmica ( <i>thermal conductivity cell</i> )
TCD	detector de conductivitat tèrmica ( <i>thermal conductivity detector</i> )
TCF	funció de correlació de temps ( <i>time correlation function</i> )
TDMS	espectroscòpia de masses quadrupolar en tàndem ( <i>tandem quadrupole mass spectroscopy</i> )
TDS	espectroscòpia de desorció tèrmica ( <i>thermal desorption spectroscopy</i> )
TEM	microscòpia electrònica de transmissió ( <i>transmission electron microscopy</i> )
TG	termogravimetria ( <i>thermogravimetry</i> )
TGA	anàlisi termogravimètrica ( <i>thermogravimetric analysis</i> )



tlc	cromatografia de capa prima ( <i>thin layer chromatography</i> )
TOF	anàlisi per temps de vol ( <i>time-of-flight [analysis]</i> )
TPD	desorció amb programació de temperatura ( <i>temperature programmed desorption</i> )
TR <sup>3</sup>	dispersió Raman per ressonància amb resolució temporal ( <i>time-resolved resonance Raman scattering</i> )
TST	teoria de l'estat de transició ( <i>transition state theory</i> )
ua	unitat atòmica ( <i>atomic unit</i> ); cf. la <a href="#">secció 7.3, p. 153</a>
UA	unitat astronòmica ( <i>astronomical unit</i> ); cf. la <a href="#">p. 141</a>
ue	unitat d'entropia ( <i>entropy unit</i> ); cf. la <a href="#">p. 143</a>
uem	unitat electromagnètica ( <i>electromagnetic unit</i> ); cf. la <a href="#">secció 7.3, p. 151</a>
ues	unitat electrostàtica ( <i>electrostatic unit</i> ); cf. la <a href="#">secció 7.3, p. 148</a>
UHF	1) freqüència ultraalta ( <i>ultra high frequency</i> ) 2) Hartree-Fock no restringit ( <i>unrestricted Hartree-Fock</i> )
UHV	buit ultraalt ( <i>ultra high vacuum</i> )
uma	unitat de massa atòmica ( <i>atomic mass unit</i> ); símbol, u; cf. la <a href="#">p. 101</a>
UPES	espectroscòpia fotoelectrònica ultraviolada ( <i>ultraviolet photoelectron spectroscopy</i> )
UPS	espectroscòpia fotoelectrònica ultraviolada ( <i>ultraviolet photoelectron spectroscopy</i> )
UV	ultraviolat ( <i>ultraviolet</i> )
VB	<i>Vegeu EV</i>
VCD	dicroisme circular vibracional ( <i>vibrational circular dichroism</i> )
VEELS	espectroscòpia de pèrdua d'energia electrònica vibracional ( <i>vibrational electron energy-loss spectroscopy</i> )
VHF	freqüència molt alta ( <i>very high frequency</i> )
VIS	visible ( <i>visible</i> )
VLSI	integració a escala molt gran ( <i>very large scale integration</i> )
VPC	cromatografia en fase vapor ( <i>vapour-phase chromatography</i> )
VSEPR	repulsió de parell d'electrons de la capa de valència ( <i>valence shell electron pair repulsion</i> )
VUV	ultraviolat en el buit ( <i>vacuum ultraviolet</i> )
X	halogen ( <i>halogen</i> )
XANES	[espectroscòpia d']estructura d'absorció de raigs X prop del límit ( <i>X-ray absorption near-edge structure [spectroscopy]</i> )
XAPS	espectroscòpia de potencial d'aparició de raigs X ( <i>X-ray appearance potential spectroscopy</i> )

XPD	difracció fotoelectrònica de raigs X ( <i>X-ray photoelectron diffraction</i> )
XPES	espectroscòpia fotoelectrònica de raigs X ( <i>X-ray photoelectron spectroscopy</i> )
XPS	espectroscòpia fotoelectrònica de raigs X ( <i>X-ray photoelectron spectroscopy</i> )
XRD	difracció de raigs X ( <i>X-ray diffraction</i> )
Y-AG	granat d'itri i alumini / itrogranat ( <i>yttrium aluminium garnet</i> )
ZPE	energia de punt zero ( <i>zero point energy</i> )

## 9. REFERÈNCIES

### 9.1. FONTS PRIMÀRIES

- [1] *Manual of symbols and terminology for physicochemical quantities and units*
- [1.a] M. L. MCGLASHAN, 1a ed., *Pure Appl. Chem.*, 21 (1970), 1-38.
  - [1.b] M. A. PAUL, 2a ed., Londres, Butterworths, 1975.
  - [1.c] D. H. WHIFFEN, 3a ed., *Pure Appl. Chem.*, 51 (1979), 1-36.
  - [1.d] D. H. WHIFFEN, «Appendix I - Definitions of activities and related quantities», *Pure Appl. Chem.*, 51 (1979), 37-41.
  - [1.e] «Appendix II - Definitions, terminology and symbols in colloid and surface Chemistry, Part 1», *Pure Appl. Chem.* 31 (1972), 577-638.
  - [1.f] J. LYKLEMA i H. VAN OLPHEN, «Section 1.13: Selected definitions, terminology and symbols for rheological properties», *Pure Appl. Chem.*, 51 (1979), 1213-1218.
  - [1.g] M. KERKER i J. P. KRATOHVIL, «Section 1.14: Light scattering», *Pure Appl. Chem.*, 55 (1983), 931-941.
  - [1.h] R. L. BURWELL Jr., «Part II: Heterogeneous catalysis», *Pure Appl. Chem.*, 46 (1976), 71-90.
  - [1.i] «Appendix III - Electrochemical nomenclature», *Pure Appl. Chem.*, 37 (1974), 49-516.
  - [1.j] J. D. COX, «Appendix IV - Notation for states and processes, significance of the word 'standard' in chemical thermodynamics, and remarks on commonly tabulated forms of thermodynamic functions», *Pure Appl. Chem.*, 54 (1982), 1239-1250.
  - [1.k] A. D. JENKINS, «Appendix V - Symbolism and terminology in chemical Kinetics», *Pure Appl. Chem.*, 53 (1981), 753-771.

- [2] [2.a] I. MILLS, T. CVITAŠ, K. HOMANN, N. KALLAY, i K. KUCHITSU, *Quantities, units and symbols in physical Chemistry*, Oxford, Blackwell Scientific Publications, 1988.
- [2.b] *Nomenklaturniye pravila IUPAC po Khimii*, vol. 6, *Fizicheskaya Khimiya*, Moscou, Nacionalnii Komitet Sovetskih Khimikov, 1988.
- [2.c] M. RIEDEL, *A fizikai-kémiai definíciók és jelölések*, Budapest, Tankönyvkiadó, 1990.
- [2.d] K. KUCHITSU, *Quantities, units and symbols in physical Chemistry*, Tòquio, Kodansha, 1991.
- [3] BUREAU INTERNATIONAL DES POIDS ET MESURES, *Le Système international d'unités (SI)*, 6a ed. francesa i anglesa, Sèvres, BIPM, 1991.
- [4] E. R. COHEN i P. GIACOMO, *Symbols, units, nomenclature and fundamental constants in Physics*, revisió del 1987; document IUPAP-25 (IUPAP-SUNAMCO 87-1) també publicat a *Physica*, 146A (1987), 1-68.
- [5] International Standards ISO  
International Organization for Standardization, Ginebra
- [5.a] ISO 31-0:1992, *Quantities and units - Part 0: General principles, units and symbols*
- [5.b] ISO 31-1:1992, *Quantities and units - Part 1: Space and time*
- [5.c] ISO 31-2:1992, *Quantities and units - Part 2: Periodic and related phenomena*
- [5.d] ISO 31-3:1992, *Quantities and units - Part 3: Mechanics*
- [5.e] ISO 31-4:1992, *Quantities and units - Part 4: Heat*
- [5.f] ISO 31-5:1992, *Quantities and units - Part 5: Electricity and magnetism*
- [5.g] ISO 31-6:1992, *Quantities and units - Part 6: Light and related electromagnetic radiations*
- [5.h] ISO 31-7:1992, *Quantities and Units - Part 7: Acoustics*
- [5.i] ISO 31-8:1992, *Quantities and Units - Part 8: Physical Chemistry and Molecular Physics*
- [5.j] ISO 31-9:1992, *Quantities and units - Part 9: Atomic and Nuclear Physics*
- [5.k] ISO 31-10:1992, *Quantities and units - Part 10: Nuclear Reactions and Ionizing Radiations*
- [5.m] ISO 31-11:1992, *Quantities and units - Part 11: Mathematical signs and symbols for use in the physical sciences and technology*
- [5.n] ISO 31-12:1992, *Quantities and units - Part 12: Characteristic numbers*
- [5.p] ISO 31-13:1992, *Quantities and units - Part 13: Solid state physics*
- [6] ISO 1000: 1992, *SI units and recommendations for the use of their multiples and of certain other units*

Tots els estàndards relacionats aquí [5-6] han estat reproduïts conjuntament en l'ISO Standards Handbook 2, *Quantities and units*, ISO, Ginebra 1993.

- [7] ISO 2955-1983, *Information processing-representations of SI and other units for use in systems with limited character sets*

## 9.2. REFERÈNCIES DE LA IUPAC

- [8] J. C. RIGG, B. F. VISSER i H. P. LEHMANN, «Nomenclature of derived quantities», *Pure Appl. Chem.*, 63 (1991), 1307-1311.
- [9] D. H. WHIFFEN, «Expression of results in quantum Chemistry», *Pure Appl. Chem.*, 50 (1978), 75-79.
- [10] E. D. BEEKER, «Recommendations for presentation of infrared absorption spectra in data collections: A - Condensed phases», *Pure Appl. Chem.*, 50 (1978), 231-236.
- [11] E. D. BECKER, J. R. DURIG, W. C. HARRIS i G. J. ROSASCO, «Presentation of Raman spectra in data collections», *Pure Appl. Chem.*, 53 (1981), 1879-1885.
- [12] «Recommendations for the presentation of NMR data for publication in chemical journals», *Pure Appl. Chem.*, 29 (1972), 625-628.
- [13] «Presentation of NMR data for publication in chemical journals: B - Conventions relating to spectra from nuclei other than protons», *Pure Appl. Chem.*, 45 (1976), 217-219.
- [14] «Nomenclature and spectral presentation in electron spectroscopy resulting from excitation by photons», *Pure Appl. Chem.*, 45 (1976), 221-224.
- [15] «Nomenclature and conventions for reporting Mössbauer spectroscopic data», *Pure Appl. Chem.*, 45 (1976), 211-216.
- [16] J. H. BEYNON, «Recommendations for symbolism and nomenclature for mass spectroscopy», *Pure Appl. Chem.*, 50 (1978), 65-73.
- [17] Y. MORINO i T. SHIMANOUCI, «Definition and symbolism of molecular force constants», *Pure Appl. Chem.*, 50 (1978), 1707-1713.
- [18] A. A. LAMOLA i M. S. WRIGHTON, «Recommended standards for reporting photochemical data», *Pure Appl. Chem.*, 56 (1984), 939-944.
- [19] N. SHEPPARD, H. A. WILLIS i J. C. RIGG, «Names, symbols, definitions and units of quantities in optical spectroscopy», *Pure Appl. Chem.*, 57 (1985), 105-120.
- [20] V. A. FASSEL, «Nomenclature, symbols, units and their usage in spectrochemical analysis. 1: General atomic emission spectroscopy», *Pure Appl. Chem.*, 30 (1972), 651-679.
- [21] W. H. MELMISH, «Nomenclature, symbols, units and their usage in spectrochemical analysis. VI: Molecular luminescence spectroscopy», *Pure Appl. Chem.*, 56 (1984), 231-245.

- [22] G. J. LEIGH, *Nomenclature of inorganic Chemistry*, Oxford, Blackwell Scientific Publications, 1990.
- [23] J. RIGAUDY i S. P. KLESNEY, *Nomenclature of organic Chemistry, Sections A, B, C, D, E, F and H*, Oxford, Pergamon Press, 1979.
- [24] M. B. EWING, T. H. LILLEY, G. M. OLOFSSON, M. T. RÄTZSCH i G. SOMSEN, «Standard quantities in chemical Thermodynamics», *Pure Appl. Chem.*, 65 (1993), 907-912.
- [25] J. P. CALI i K. N. MARSH, «An annotated bibliography on accuracy in measurement», *Pure Appl. Chem.*, 55 (1983), 907-930.
- [26] G. OLOFSSON, «Assignment and presentation of uncertainties of the numerical results of thermodynamic measurements», *Pure Appl. Chem.*, 53 (1981), 1805-1825.
- [27] A. CORNISH-BOWDEN, «Glossary of terms used in physical organic Chemistry», *Pure Appl. Chem.*, 55 (1983), 1281-1371.
- [28] S. E. BRASLAVSKY i K. N. HOUK, «Glossary of terms used in Photochemistry», *Pure Appl. Chem.*, 60 (1988), 1055-1106.
- [29] A. J. BARD, R. MEMMING i B. MILLER, «Terminology in semiconductor electrochemistry and photoelectrochemical energy conversion», *Pure Appl. Chem.*, 63 (1991), 569-596.
- [30] K. E. HEUSIER, D. LANDOLT i S. TRASATTI, «Electrochemical corrosion nomenclature», *Pure Appl. Chem.*, 61 (1989), 19-22.
- [31] S. TRASATTI, «The absolute electrode potential: an explanatory note», *Pure Appl. Chem.*, 58 (1986), 955-966.
- [32] R. PARSONS, «Electrode reaction orders, transfer coefficients and rate constants: amplification of definitions and recommendations for publication of parameters», *Pure Appl. Chem.*, 52 (1980), 233-240.
- [33] N. IBL, «Nomenclature for transport phenomena in electrolytic systems», *Pure Appl. Chem.*, 53 (1981), 1827-1840.
- [34] P. van RYSELBERGHE, «Bericht der Kommission für elektrochemische Nomenklatur und Definitionen», *Z. Electrochem.*, 58 (1954), 530-535.
- [35] A. J. BARD, R. PARSONS i J. JORDAN, *Standard potentials in aqueous solutions*, Nova York, Marcel Dekker Inc., 1985.
- [36] A. K. COVINGTON, R. G. BATES i R. A. DURST, «Definition of pH scales, standard reference values, measurement of pH and related terminology», *Pure Appl. Chem.*, 57 (1985), 531-542.
- [37] K. S. W. SING, D. H. EVERETT, R. A. W. HAUL, L. MOSCOU, R. A. PIROTTI, J. ROUQUÉROL i T. SIEMIENIEWSKA, «Reporting physisorption data for gas/solid systems», *Pure Appl. Chem.*, 57 (1985), 603-619.
- [38] L. TER-MINASSIAN-SARAGA, «Reporting experimental pressure-area data with film balances», *Pure Appl. Chem.*, 57 (1985), 621-632.
- [39] D. H. EVERETT, «Reporting data on adsorption from solution at the solid/solution interface», *Pure Appl. Chem.*, 58 (1986), 967-984.

- [40] J. HABER, «Manual on catalyst characterization», *Pure Appl. Chem.*, 63 (1991), 1227-1246.
- [41] W. V. METANOMSKI, *Compendium of macromolecular nomenclature*, Oxford, Blackwell Scientific Publications, 1991.
- [42] [42.a] N. E. HOLDEN, «Atomic weights of the elements 1979», *Pure Appl. Chem.*, 51 (1979), 2349-2384.
- [42.b] J. CHATT, «Recommendations for the naming of elements of atomic numbers greater than 100», *Pure Appl. Chem.*, 52 (1980), p. 381-384.
- [43] H. S. PEISER, N. E. HOLDEN, P. DE BIÈVRE, I. L. BARNES, R. HAGEMANN, J. R. de LAETER, T. J. MURPHY, E. ROTH, M. SHIMA i H. G. THODE, «Element by element review of their atomic weights», *Pure Appl. Chem.*, 56, (1984) 695-768.
- [44] [44.a] «Atomic weights of the elements 1991», *Pure Appl. Chem.*, 64 (1992), 1519-1534.
- [44.b] «Atomic weights of the elements 1995», *Pure Appl. Chem.*, 68 (1996), 2339-2359.
- [44.c] «Atomic weights of the elements 1997», *Pure Appl. Chem.*, 71 (1999), 1593-1607.
- [44.d] «Atomic weights of the elements 2001», *Pure Appl. Chem.*, 75 (2003), 1107-1122.
- [44.e] J. CORISH i G. M. ROSENBLATT, «Name and symbol of the element with atomic number 110», *Pure Appl. Chem.*, 75 (2003), 1613-1615.
- [44.f] *Name and symbol of the element with atomic number 111 (IUPAC provisional recommendation)*, 17 maig 2004.
- [45] «Isotopic compositions of the elements 1989», *Pure Appl. Chem.*, 63 (1991), 991-1002.
- [46] D. LIDE, «Use of abbreviations in the chemical literature», *Pure Appl. Chem.*, 52 (1980), 2229-2232.
- [47] H. Q. PORTER i D. W. TURNER, «A descriptive classification of the electron spectroscopies», *Pure Appl. Chem.*, 59 (1987), 1343-1406.
- [48] N. SHEPPARD, «English-derived abbreviations for experimental techniques in surface science and chemical spectroscopy», *Pure Appl. Chem.*, 63 (1991), 887-893.

### 9.3. ALTRES REFERÈNCIES

- [49] J. MULLAY, «Estimation of atomic and group electronegativities», *Structure and Bonding*, 66 (1987), 1-25.
- [50] F. A. JENKINS, «Notation for the spectra of diatomic molecules», *J. Opt. Soc. Amer.*, 43 (1953), 425-426.

- [51] R. S. MULLIKEN, «Report on notation for the spectra of polyatomic molecules», *J. Chem. Phys.*, 23 (1955), 1997-2011 (fe d'errates, *J. Chem. Phys.*, 24 (1956), 1118).
- [52] G. HERZBERG, *Molecular spectra and molecular structure*, vol. I, *Spectra of diatomic molecules*, Princeton, Van Nostrand, 1950; vol. II, *Infrared and Raman spectra of polyatomic molecules*, Princeton, Van Nostrand, 1946; vol. III, *Electronic spectra and electronic structure of polyatomic molecules*, Princeton, Van Nostrand, 1966.
- [53] J. K. G. WATSON, «Aspects of quartic and sextic centrifugal effects on rotational energy levels», a J. R. DURIG (ed.), *Vibrational spectra and structure* vol. 6, Amsterdam, Elsevier, 1977, 1-89.
- [54] [54.a] J. H. CALLOMON, E. HIROTA, K. KUCHITSU, W. J. LAFFERTY, A. G. MAKI i C. S. POTE, «Structure data of free polyatomic molecules», a K.-H. HELLWEGE i A. M. HELLWEGE (ed.), *Landolt-Börnstein*, Berlín, Springer Verlag, 1976, «New Series», 11/7.
- [54.b] J. H. CALLOMON, E. HIROTA, T. LIJIMA, K. KUCHITSU i W. LAFFERTY, «Structure data of free polyatomic molecules», a K.-H. HELLWEGE i A. M. HELLWEGE (ed.), *Landolt-Börnstein*, Berlín, Springer Verlag, 1987, «New Series», II/15 (suplement del II/7).
- [55] P. R. BUNKER, *Molecular symmetry and spectroscopy*, Nova York, Academic Press, 1979.
- [56] J. M. BROWN, J. T. HOUGER, K.-P. HUBER, J. W. C. JOHNS, I. KOPP, H. LEFEBVRE-BRION, A. J. MERER, D. A. RAMSAY, J. ROSTAS i R. N. ZARE, «The labeling of parity doublet levels in linear molecules», *J. Mol. Spectrosc.*, 55 (1975), 500-503.
- [57] M. H. ALEXANDER, P. ANDRESEN, R. BACIS, R. BERSOHN, F. J. COMES, P. J. DAGDIGIAN, R. N. DIXON, R. W. FIELD, G. W. FLYNN, K.-H. GERICKE, E. R. GRANT, B. J. HOWARD, J. R. HUBER, D. S. KING, J. L. KINSEY, K. KLEINERMANN, K. KUCHITSU, A. C. LUNTZ, A. J. MCCAFFERY, B. POUILLY, H. REISLER, S. ROSENWAKS, E. W. ROTHE, M. SHAPIRO, J. P. SIMONS, R. VASUDEV, J. R. WIESENFELD, C. WITTIG i R. N. ZARE, «A nomenclature for  $\Lambda$ -doublet levels in rotating linear molecules», *J. Chem. Phys.*, 89 (1988), 1749-1753.
- [58] J. C. D. BRAND, J. H. CALLOMON, K. K. INNES, J. JORTNER, S. LEACH, D. H. LEVY, A. J. MERER, I. M. MILLS, C. B. MOORE, C. S. PARMENTER, D. A. RAMSAY, K. NARAHARI RAO, E. W. SCHIAG, J. K. G. WATSON i R. N. ZARE, «The vibrational numbering of bands in the spectra of polyatomic molecules», *J. Mol. Spectrosc.*, 99 (1983), 482-483.
- [59] M. QUACK, «Spectra and dynamics of coupled vibrations in polyatomic molecules», *Ann. Rev. Phys. Chem.*, 41 (1990), 839-874.
- [60] A. G. MAKI i J. S. WELLS, «Wavenumber calibration tables from heterodyne frequency measurements», *NIST Special Publication 821*, US Department of Commerce, 1991.



- [61] [61.a] L. A. PUGH i K. N. RAO, «Intensities from infrared spectra», a K. N. RAO (ed.), *Molecular Spectroscopy: Modern research*, vol. II, Nova York, Academic Press, 1976, 165-227.
- [61.b] M. A. SMITH, C. P. RINSLAND, B. FRIDOVICH i K. N. RAO, «Intensities and collision broadening parameters from infrared spectra», a K. N. RAO (ed.), *Molecular Spectroscopy: Modern research*, vol. III, Nova York, Academic Press, 1985, 111-248.
- [62] Th. HAHN, (ed), *International tables for Crystallography*, vol. A, 2a ed., *Space-group symmetry*, Dordrecht, Reidel Publishing Co., 1983.
- [63] R. A. ALBERTY, «Chemical equations are actually matrix equations», *J. Chem. Educ.*, 8 (1991), 984.
- [64] E. S. DOMALSKI, «Selected values of heats of combustion and heats of formation of organic compounds», *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1 (1972), 221-277.
- [65] R. D. FREEMAN, «Conversion of standard (1 atm) thermodynamic data to the new standard state pressure, 1 bar ( $10^5$  Pa)», *Bull. Chem. Thermodyn.*, 25 (1982), 523-530; *J. Chem. Eng. Data*, 29 (1984), 105-111; *J. Chem. Educ.*, 62 (1985), 681-686.
- [66] D. D. WAGMAN, W. H. EVANS, V. B. PARKER, R. H. SCHUMM, I. HALOW, S. M. BAILEY, K. L. CHURNEY i R. L. NUTTALL, «The NBS tables of chemical thermodynamic properties», *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 11, supl. 2 (1982), 1-392.
- [67] M. W. CHASE, C. A. DAVIES, J. R. DOWNEY, D. J. FRURIP, R. A. MCDONALD i A. N. SYVERUD, «JANAF thermochemical tables, 3a ed.», *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 14, supl. 1 (1985), 1-392.
- [68] V. P. GLUSHKO (ed.), *Termodinamicheskie svoystva individualnykh veshchestv*, vol. 1-4, Moscou, Nauka, 1978-1985.
- [69] «CODATA Task group on data for chemical Kinetics: The presentation of chemical Kinetics data in the primary literature», *CODATA Bull.*, 13 (1974), 1-7.
- [70] E. R. COHEN, i B. N. TAYLOR, «The 1986 adjustment of the fundamental physical constants», *CODATA Bull.*, 63 (1986), 1-49.
- [71] «Particle data group, 1992 review of particle properties», *Phys. Rev.*, D45, part 2 (1992).
- [72] A. H. WAPSTRA i G. AUDI, «The 1983 atomic mass evaluation. 1. Atomic mass table», *Nucl. Phys.*, A432 (1985), 1-54.
- [73] P. RAGHAVAN, «Table of nuclear moments», *Atomic Data Nucl. Data Tab.*, 42 (1989), 189-291.
- [74] P. PYYKKÓ, «The nuclear quadrupole moments of the first 20 elements: high precision calculations on atoms and small molecules», *Z. Naturforsch.*, A47 (1992), 189-196.
- [75] D. A. W. WENDISCH, *Acronyms and abbreviations in molecular Spectroscopy*, Heidelberg, Springer Verlag, 1990.



# ÍNDEXS

## ALFABET GREC

A, $\alpha$	<i>A, <math>\alpha</math></i>	alfa	N, $\nu$	<i>N, <math>\nu</math></i>	ni
B, $\beta$	<i>B, <math>\beta</math></i>	beta	$\Xi, \xi$	<i><math>\Xi, \xi</math></i>	csi
$\Gamma, \gamma$	<i><math>\Gamma, \gamma</math></i>	gamma	O, $\omicron$	<i>O, <math>\omicron</math></i>	òmicron
$\Delta, \delta$	<i><math>\Delta, \delta</math></i>	delta	$\Pi, \pi$	<i><math>\Pi, \pi</math></i>	pi
E, $\epsilon$	<i>E, <math>\epsilon</math></i>	èpsilon	P, $\rho$	<i>P, <math>\rho</math></i>	ro
Z, $\zeta$	<i>Z, <math>\zeta</math></i>	zeta	$\Sigma, \sigma$	<i><math>\Sigma, \sigma</math></i>	sigma
H, $\eta$	<i>H, <math>\eta</math></i>	eta	T, $\tau$	<i>T, <math>\tau</math></i>	tau
$\Theta, \vartheta, \theta$	<i><math>\Theta, \vartheta, \theta</math></i>	theta	Y, $\upsilon$	<i>Y, <math>\upsilon</math></i>	ípsilon
I, $\iota$	<i>I, <math>\iota</math></i>	iota	$\Phi, \varphi, \phi$	<i><math>\Phi, \varphi, \phi</math></i>	fi
K, $\kappa$	<i>K, <math>\kappa</math></i>	kappa	X, $\chi$	<i>X, <math>\chi</math></i>	khi
$\Lambda, \lambda$	<i><math>\Lambda, \lambda</math></i>	lambda	$\Psi, \psi$	<i><math>\Psi, \psi</math></i>	psi
M, $\mu$	<i>M, <math>\mu</math></i>	mi	$\Omega, \omega$	<i><math>\Omega, \omega</math></i>	omega

## ÍNDIX DE SÍMBOLS

Aquest índex recull els símbols de les magnituds físiques, de les unitats, d'alguns operadors matemàtics, d'estats d'agregació, de processos i de partícules. Els símbols dels elements químics són recollits en la secció 6.2 (p. 119). En aquest índex es prescindeix en general dels subíndexs qualificatius i d'altres tipus; per exemple, els símbols  $E_p$  d'energia potencial i  $E_{ca}$  d'afinitat electrònica són recollits ambdós simplement sota l'entrada  $E$  de *energia*. Les lletres de l'alfabet llatí precedeixen les de l'alfabet grec i les minúscules precedeixen les majúscules, que es disposen en blocs separats; les negretes precedeixen les cursives; aquestes, les rodones, i els símbols d'una sola lletra precedeixen els de diverses lletres, per aquest ordre.

- a***      acceleració (*acceleration*)    28
- a***      vector fonamental de translació del reticle (*fundamental translation vector for the crystal lattice*)    57
- a*\***     vector del reticle recíproc (*reciprocal lattice vector*)    57
- a***      activitat (*activity*)    38, 83
- a***      àrea superficial específica (*specific surface area*)    90
- a***      coeficient d'absorció (*absorption coefficient*)    51
- a***      coeficient de Van der Waals (*van der Waals coefficient*)    72
- a***      constant d'acoblament hiperfí (*hyperfine coupling constant*)    42
- a***      difusivitat tèrmica (*thermal diffusivity*)    92
- a***      longitud de la cel·la unitat (*unit cell length*)    57
- a*<sub>0</sub>**    radi de Bohr (*Bohr radius*)    37, 102, 114, 142
- a***      adsorbit -ida (*adsorbed*)    71
- a***      any (*year*), unitat de temps    142
- a***      àrea (*area*), unitat de superfície    141
- a***      atto- (*atto-*), prefix SI    99

- ads adsorbit -ida (*adsorbed*) 71, 76
- am sòlid amorf (*amorphous solid*) 71
- amagat unitat amagat (*amagat unit*) 144
- aq solució aquosa (*aqueous solution*) 71
- at atomització (*atomization*) 76
- atm atmosfera (*atmosphere*), unitat de pressió 113, 143
- 
- A* potencial del vector magnètic (*magnetic vector potential*) 32
- A* absorbància (*absorbance*) 51
- A* activitat [radioactiva] (*[radioactive] activity*) 97
- A*, *A* afinitat de reacció (*affinity of reaction*) 73
- A* àrea (*area*) 28
- A* constant d'acoblament espín-òrbita (*spin-orbit coupling constant*) 40
- A* constant d'acoblament hiperfi (*hyperfine coupling constant*) 42
- A* constant de Van der Waals-Hamaker (*van der Waals-Hamaker constant*) 90
- A* constant rotacional (*rotational constant*) 40
- A* energia de Helmholtz (*Helmholtz energy*) 72
- A* factor preexponencial / factor de freqüència (*pre-exponential factor / frequency factor*) 81
- A* intensitat d'absorció (*absorption intensity*) 54
- A* nombre de nucleons / nombre màssic (*nucleon number / mass number*) 37
- A* probabilitat de transició d'Einstein (*Einstein transition probability*) 50
- A<sub>H</sub>* coeficient de Hall (*Hall coefficient*) 58
- A<sub>r</sub>* massa atòmica relativa / pes atòmic (*relative atomic mass / atomic weight*) 62, 119
- Al* nombre d'Alfvén (*Alfvén number*) 93
- A* ampere (*ampere*), unitat SI 96, 144
- Å àngstrom (*ångström*), unitat de longitud 43, 101, 141
- AU, UA unitat astronòmica (*astronomical unit*), unitat de longitud 141
- 
- b* vector de Burgers (*Burgers vector*) 58
- b* vector fonamental de translació del reticle (*fundamental translation vector for the crystal lattice*) 57
- b\** vector del reticle recíproc (*reciprocal lattice vector*) 57
- b* amplada / amplària (*breadth*) 28
- b* coeficient de Van der Waals (*van der Waals coefficient*) 72
- b* longitud de la cel·la unitat (*unit cell length*) 57
- b* molalitat (*molality*) 64
- b* paràmetre d'impacte (*impact parameter*) 81

- b* raó de mobilitat (*mobility ratio*) 59
- b* barn (*barn*), unitat de superfície 101, 141
- b* bohr (*bohr*), unitat de longitud 141
- bar bar (*bar*), unitat de pressió 63, 101, 143
- B** densitat de flux magnètic / inducció magnètica (*magnetic flux density / magnetic induction*) 31
- B* absorbància [neperiana] (*[napierian] absorbance*) 51
- B* constant de Van der Waals retardada (*retarded van der Waals constant*) 90
- B* constant rotacional (*rotational constant*) 40
- B* factor de Debye-Waller (*Debye-Waller factor*) 58
- B* probabilitat de transició d'Einstein (*Einstein transition probability*) 50
- B* segon coeficient del virial (*second virial coefficient*) 74
- B* susceptància (*susceptance*) 31
- B* bel (*bel*), unitat de nivell de potència 105
- Bi* biot (*biot*), unitat d'intensitat de corrent elèctric 144
- Bq* becquerel (*becquerel*), unitat SI 97, 144
- Btu* unitat tèrmica britànica (*British thermal unit*), unitat d'energia 142
- c* vector fonamental de translació del reticle (*fundamental translation vector for the crystal lattice*) 57
- c* velocitat (*velocity*) 28, 61
- c\** vector del reticle recíproc (*reciprocal lattice vector*) 57
- c* concentració en quantitat [de substància] (*amount [of substance] concentration*) 63
- c* longitud de la cel·la unitat (*unit cell length*) 57
- c* rapidesa (*speed*) 28, 98
- c*<sub>1</sub> primera constant de radiació (*first radiation constant*) 51, 114
- c*<sub>2</sub> segona constant de radiació (*second radiation constant*) 51, 114
- c*<sub>0</sub> velocitat de la llum en el buit (*speed of light in vacuum*) 50, 113
- c* centi- (*centi-*), prefix SI 99
- c* reacció de combustió (*combustion reaction*) 76
- cal caloria (*calorie*), unitat d'energia 142
- cd candela (*candela*), unitat SI 96
- cd fase condensada (*condensed phase*) 70
- cl cristall líquid (*liquid crystal*) 70
- cr cristal·lí -ina (*crystalline*) 70
- C** capacitat (*capacitance*) 31
- C** capacitat calorífica (*heat capacity*) 71

C	concentració en nombre ( <i>number concentration</i> )	59, 63
C	constant rotacional ( <i>rotational constant</i> )	40
C	tercer coeficient del virial ( <i>third virial coefficient</i> )	72
$C_n$	operador de rotació $n$ -ari ( <i>n-fold rotation operator</i> )	46
Co	nombre de Cowling ( <i>Cowling number</i> )	93
C	coulomb ( <i>coulomb</i> ), unitat SI	97, 144
°C	grau Celsius ( <i>degree Celsius</i> ), unitat SI	97
Ci	curie ( <i>curie</i> ), unitat de radioactivitat	144
Cl	clàusius ( <i>clausius</i> ), unitat d'entropia	143
$d$	constant de distorsió centrífuga ( <i>centrifugal distortion constant</i> )	40
$d$	degeneració ( <i>degeneracy</i> )	41, 61
$d$	densitat relativa ( <i>relative density</i> )	29
$d$	diàmetre de col·lisió ( <i>collision diameter</i> )	81
$d$	diàmetre, distància, gruix / gruixària ( <i>diameter, distance, thickness</i> )	28
$d$	espaiat reticular ( <i>lattice plane spacing</i> )	58
d	deci- ( <i>deci-</i> ), prefix SI	99
d	deuteró ( <i>deuteron</i> )	65, 118
d	dia ( <i>day</i> ), unitat de temps	100, 142
da	deca- ( <i>deca-</i> ), prefix SI	99
dil	dilució ( <i>dilution</i> )	75
dpl	desplaçament ( <i>displacement</i> )	76
dyn	dina ( <i>dynes</i> ), unitat de força	142
$D$	desplaçament elèctric ( <i>electric displacement</i> )	31
$D$	coeficient de difusió ( <i>diffusion coefficient</i> )	59, 92
$D$	constant de distorsió centrífuga ( <i>centrifugal distortion constant</i> )	40
$D$	energia de dissociació ( <i>dissociation energy</i> )	37
$D$	factor de Debye-Waller ( <i>Debye-Waller factor</i> )	58
$D_{AB}$	constant d'acoblament [dipolar] directe ( <i>direct [dipolar] coupling constant</i> )	41
D	debye ( <i>debye</i> ), unitat de moment dipolar elèctric	42, 145
Da	dalton ( <i>dalton</i> ), unitat de massa	63, 101, 142
$e$	vector unitari ( <i>unit vector</i> )	110
$e$	càrrega elemental / càrrega del protó ( <i>elementary charge / proton charge</i> )	37, 83, 102, 113, 153
$e$	deformació lineal / elongació relativa ( <i>linear strain / relative elongation</i> )	29
$e$	<i>étendue</i> ( <i>étendue</i> )	51
$e$	base dels logaritmes neperians ( <i>base of natural logarithms</i> )	109, 114



- e electró (*electron*) 65, 117
- e. u. unitat d'entropia (*entropy unit*) 143
- erg erg (*erg*), unitat d'energia 142
- eV electró-volt (*electronvolt*), unitat d'energia 101, 142
- E** intensitat de camp elèctric (*electric field strength*) 31
- E* diferència de potencial elèctric (*electric potential difference*) 85
- E* energia (*energy*) 29, 35, 36, 37, 59, 81
- E* *étendue* (*étendue*) 51
- E* força electromotriu (*electromotive force*) 31, 84-85
- E* força termoelectrònica (*thermoelectric force*) 58
- E* irradiància (*irradiance*) 50
- E* mòdul d'elasticitat (*modulus of elasticity*) 29
- E* operador de simetria d'identitat (*identity symmetry operator*) 45, 46
- E\** operador de simetria d'inversió fixa a l'espai (*space-fixed inversion symmetry operator*) 45
- $E_h$  energia de Hartree (*Hartree energy*) 37, 102, 114, 137, 142, 154
- $E_u$  nombre d'Euler (*Euler number*) 93
- E exa- (*exa-*), prefix SI 99
- E magnitud d'excés (*excess quantity*) 76
- f* coeficient d'activitat (*activity coefficient*) 73
- f* constant de força vibracional (*vibrational force constant*) 41
- f* factor de dispersió atòmica (*atomic scattering factor*) 58
- f* factor de fricció (*friction factor*) 30
- f* finor (*finesse*) 51
- f* freqüència (*frequency*) 28
- f* fugacitat (*fugacity*) 75
- $f(c_x)$  funció de distribució d'un component de la velocitat (*velocity distribution function*) 61
- f femto- (*femto-*), prefix SI 99
- f fermi (*fermi*), unitat de longitud 141
- f reacció de formació (*formation reaction*) 76
- fl fase fluida (*fluid*) 70
- fm fermi (*fermi*), unitat de longitud 141
- ft peu (*foot*), unitat de longitud 141
- fus fusió (*fusion / melting*) 75
- F** força (*force*) 29
- F** moment angular total (*total angular momentum*) 44
- F** operador de Fock (*Fock operator*) 35-36

- F* constant de Faraday (*Faraday constant*) 83, 113  
*F* constant de força vibracional (*vibrational force constant*) 41  
*F* factor d'estructura (*structure factor*) 58  
*F* fluència (*fluence*) 50  
*F* terme rotacional (*rotational term*) 40  
*F(c)* funció de distribució de la velocitat (*speed distribution function*) 61  
*F<sub>o</sub>* nombre de Fourier (*Fourier number*) 93  
*Fr* nombre de Froude (*Froude number*) 93  
*F* farad (*farad*), unitat SI 97  
 °F grau Fahrenheit (*degree Fahrenheit*), unitat de temperatura 147  
*Fr* franklin (*franklin*), unitat de càrrega elèctrica 150-151
- g* acceleració de la gravetat / acceleració de caiguda lliure (*acceleration due to gravity / acceleration of free fall*) 29, 114, 142  
*g* constant d'anharmonicitat vibracional (*vibrational anharmonicity constant*) 40  
*g* degeneració (*degeneracy*) 41-42, 61  
*g* densitat [espectral] de modes de vibració (*[spectral] density of vibrational modes*) 58  
*g* factor *g* (*g-factor*) 38, 42, 114  
*g* gas (*gas*) 70  
*g* gram (*gram*), unitat de massa 141  
*gal* galó (*gallon*), unitat de volum 141  
*gr* gra (*grain*), unitat de massa 142  
*grad* grau (*grade*), unitat d'angle pla 144
- G* vector del reticle recíproc (*reciprocal lattice vector*) 57  
*G* conductància elèctrica (*electric conductance*) 97  
*G* conductància tèrmica (*thermal conductance*) 92  
*G* constant gravitacional (*gravitational constant*) 29, 114  
*G* energia de Gibbs (*Gibbs energy*) 72-73, 81  
*G* mòdul de cisallament (*shear modulus*) 30  
*G* pes (*weight*) 29  
*G* secció eficaç d'absorció integrada (*integrated absorption cross section*) 51
- G* terme vibracional (*vibrational term*) 40  
*Gr* nombre de Grashof (*Grashof number*) 93  
*G* gauss (*gauss*), unitat de densitat de flux magnètic 146  
*G* giga- (*giga-*), prefix SI 99  
*Gal* gal / galileu (*gal / galileo*), unitat d'acceleració 142  
*Gy* gray (*gray*), unitat SI 97, 144

- h* altura (*height*) 28  
*h* coeficient de transferència de calor (*coefficient of heat transfer*) 92-93  
*h, ħ* constant de Planck ( $\hbar = h/\pi$ ) (*Planck constant* ( $\hbar = h/\pi$ )) 37, 50, 102, 113  
*h* gruix d'una pel·lícula (*film thickness*) 90  
*h* índex de Miller (*Miller index*) 60  
*h* hecto- (*hecto-*), prefix SI 99  
*h* heliò (*helion*) 65, 118  
*h* hora (*hour*), unitat de temps 100, 142  
*ha* hectàrea (*hectare*), unitat de superfície 141  
*hp* cavall de vapor (*horse power*), unitat de potència 143
- H*** intensitat de camp magnètic (*magnetic field strength*) 31  
*H* entalpia (*enthalpy*) 71, 81  
*H* fluència (*fluence*) 50  
*H* funció de Hamilton (*Hamilton function*) 29  
*Ha* nombre de Hartmann (*Hartmann number*) 93  
*H* henry (*henry*), unitat SI 97  
*Hz* hertz (*hertz*), unitat SI 23, 97
- i* vector unitari (*unit vector*) 110  
*i* intensitat de corrent elèctric / corrent elèctric (*electric current*) 31  
*i* operador de simetria d'inversió (*inversion symmetry operator*) 46  
*i* arrel quadrada de menys u (*square root of minus one*) 110  
*id* ideal (*ideal*) 76  
*imm* immersió (*immersion*) 76  
*in* polzada (*inch*), unitat de longitud 141
- I*** moment angular d'espín nuclear (*nuclear spin angular momentum*) 44  
*I* intensitat de corrent elèctric / corrent elèctric (*electric current*) 21, 31, 84  
*I* força iònica (*ionic strength*) 74, 83  
*I* intensitat radiant (*radiant intensity*) 52  
*I* intensitat lluminosa (*luminous intensity*) 52  
*I* moment d'inèrcia (*moment of inertia*) 29, 40  
*I* secció eficaç diferencial (*differential cross section*) 81
- j* densitat de corrent [elèctric] (*[electric] current density*) 31, 33, 84  
*j* moment angular (*angular momentum*) 44  
*j* vector unitari (*unit vector*) 110
- J*** densitat de corrent elèctric (*electric current density*) 31  
***J*** moment angular / acció (*angular momentum / action*) 44, 143

$J$	operador coulombià ( <i>coulomb operator</i> ) 35
$J$	flux ( <i>flux</i> ) 92
$J$	funció de Massieu ( <i>Massieu function</i> ) 72
$J$	integral coulombiana ( <i>coulomb integral</i> ) 35
$J$	moment d'inèrcia ( <i>moment of inertia</i> ) 29
$J_{AB}$	constant d'acoblament espín-espín [indirecte] ( <i>[indirect] spin-spin coupling constant</i> ) 41
$J$	joule ( <i>joule</i> ), unitat SI 97, 142
$k$	vector d'ona ( <i>wave vector</i> ) 59
$k$	vector unitari ( <i>unit vector</i> ) 110
$k$	coeficient de transferència de calor ( <i>coefficient of heat transfer</i> ) 92
$k$	conductivitat tèrmica ( <i>thermal conductivity</i> ) 92
$k$	constant de Boltzmann ( <i>Boltzmann constant</i> ) 61, 80, 113
$k$	constant de velocitat ( <i>rate constant</i> ) 80
$k$	índex d'absorció ( <i>absorption index</i> ) 51
$k$	índex de Miller ( <i>Miller index</i> ) 60
$k$	nombre quàntic del component de moment angular ( <i>angular momentum component quantum number</i> ) 44
$k_d$	coeficient de transferència de matèria / constant de velocitat de difusió ( <i>mass transfer coefficient / diffusion rate constant</i> ) 84
$k_H$	constant de la llei de Henry ( <i>Henry's law constant</i> ) 73
$k_{rst}$	constant de força vibracional ( <i>vibrational force constant</i> ) 41
$k$	kilo- ( <i>kilo-</i> ), prefix SI 99
$kg$	kilogram ( <i>kilogram</i> ), unitat SI 97, 141
$kgf$	kilogram-força ( <i>kilogram-force</i> ), unitat de força 142
$K$	operador de bescanvi ( <i>exchange operator</i> ) 35
$K$	coeficient d'absorció ( <i>absorption coefficient</i> ) 51
$K$	coeficient de transferència de calor ( <i>coefficient of heat transfer</i> ) 92
$K$	constant d'acoblament espín-espín reduït ( <i>reduced spin-spin coupling constant</i> ) 41
$K$	constant d'equilibri ( <i>equilibrium constant</i> ) 73
$K$	constant de cel·la de conductivitat ( <i>conductivity cell constant</i> ) 85
$K$	energia cinètica ( <i>kinetic energy</i> ) 29
$K$	integral de bescanvi ( <i>exchange integral</i> ) 35
$K$	mòdul de compressió / mòdul cúbic ( <i>compression modulus / bulk modulus</i> ) 30
$K$	nombre quàntic del component de moment angular ( <i>angular momentum component quantum number</i> ) 44
$Kn$	nombre de Knudsen ( <i>Knudsen number</i> ) 93

- K** kelvin (*kelvin*), unitat SI 97, 143
- l** moment angular d'un orbital electrònic (*electron orbital angular momentum*) 44
- l* índex de Miller (*Miller index*) 60
- l* longitud (*length*) 21, 28
- l* nombre quàntic vibracional (*vibrational quantum number*) 40
- l* líquid (*liquid*) 70
- l* litre (*litre*), unitat de volum 101, 141
- l. y.* any llum (*light year*), unitat de longitud 141
- lb* lliura (*pound*), unitat de massa 142
- lm* lumen (*lumen*), unitat SI 97
- lx* lux (*lux*), unitat SI 97
- L** moment angular / acció (*angular momentum / action*) 29, 44, 143
- L* coeficient de Lorenz (*Lorenz coefficient*) 58
- L* constant d'Avogadro (*Avogadro constant*) 61-62, 113
- L* funció de Lagrange (*Lagrange function*) 29
- L* inductància (*inductance*) 31
- L* longitud (*length*) 59, 86
- L* radiància (*radiance*) 50
- Le* nombre de Lewis (*Lewis number*) 93
- L* langmuir (*langmuir*), unitat del producte pressió-volum 94
- L* litre (*litre*), unitat de volum 101, 141
- m** moment dipolar magnètic (*magnetic dipole moment*) 31, 37
- m* massa (*mass*) 21, 29, 37, 59, 62
- m* molalitat (*molality*) 64, 83
- m* nombre quàntic del component de moment angular (*angular momentum component quantum number*) 44
- m* ordre de reacció (*order of reaction*) 80
- m<sub>e</sub>* massa de l'electró en repòs (*electron rest mass*) 37, 102, 113
- m<sub>n</sub>* massa del neutró en repòs (*neutron rest mass*) 113
- m<sub>p</sub>* massa del protó en repòs (*proton rest mass*) 113
- m<sub>u</sub>* constant de massa atòmica (*atomic mass constant*) 37, 113
- m* metre (*metre*), unitat SI 97, 141
- m* mil·li- (*milli-*), prefix SI 99
- mi* milla (*mile*), unitat de longitud 141
- min* minut (*minute*), unitat de temps 100, 142
- mix* mescla (*mixture*) 75
- mmHg* mil·límetre de mercuri (*millimetre of mercury*), unitat de pressió 143

mol	mol ( <i>mole</i> ), unitat SI 70, 97
mon	forma monomèrica ( <i>monomeric form</i> ) 71
$M$	imantació ( <i>magnetization</i> ) 31
$M$	moment dipolar de transició ( <i>transition dipole moment</i> ) 41
$M$	parell de forces / moment d'una força ( <i>torque / moment of a force</i> ) 29
$M$	excitància radiant ( <i>radiant exitance</i> ) 50
$M$	inductància mútua ( <i>mutual inductance</i> ) 31
$M$	massa molar ( <i>molar mass</i> ) 62, 90
$M$	nombre quàntic del component de moment angular ( <i>angular momentum component quantum number</i> ) 44
$M$	constant de Madelung ( <i>Madelung constant</i> ) 58
$M_r$	massa molecular relativa ( <i>relative molecular mass</i> ) 62
$Ma$	nombre de Mach ( <i>Mach number</i> ) 93
$M$	mega- ( <i>mega-</i> ), prefix SI 99
$M$	molar ( <i>molar</i> ), unitat de concentració 64
$Mx$	maxwell ( <i>maxwell</i> ), unitat de flux magnètic 146
$n$	densitat en nombre ( <i>number density</i> ) 59, 61, 63
$n$	índex de refracció ( <i>refractive index</i> ) 50, 51
$n$	nombre de càrrega d'una reacció electroquímica ( <i>charge number of electrochemical reaction</i> ) 83
$n$	nombre quàntic principal ( <i>principal quantum number</i> ) 37
$n$	ordre de reacció ( <i>order of reaction</i> ) 86
$n$	ordre de reflexió [de Bragg] ( <i>order of [Bragg] reflection</i> ) 58
$n$	quantitat de substància / quantitat química / quantitat ( <i>amount of substance / chemical amount / amount</i> ) 21, 62, 69-70, 90
$n$	nano- ( <i>nano-</i> ), prefix SI 99
$n$	neutró ( <i>neutron</i> ) 65, 118
$N$	moment angular ( <i>angular momentum</i> ) 44
$N$	nombre d'entitats ( <i>number of entities</i> ) 61, 62
$N$	nombre d'estats ( <i>number of states</i> ) 61
$N$	nombre de neutrons ( <i>neutron number</i> ) 37
$N_A$	constant d'Avogadro ( <i>Avogadro constant</i> ) 61, 62, 113
$N_E$	densitat d'estats ( <i>density of states</i> ) 58
$N_\omega$	densitat [espectral] de modes de vibració ( <i>[spectral] density of vibrational modes</i> ) 58
$Nu$	nombre de Nusselt ( <i>Nusselt number</i> ) 93
$N$	newton ( <i>newton</i> ), unitat SI 97, 142
$Np$	neper ( <i>neper</i> ) 105

- oz unça (*ounce*), unitat de massa 142
- Oe oersted (*oersted*), unitat d'intensitat de camp magnètic 146
- p** moment dipolar elèctric (*electric dipole moment*) 31, 38, 41
- p** quantitat de moviment / moment (*momentum*) 29, 32, 61
- p* densitat en nombre de donadors (*number density of donors*) 59
- p* ordre d'enllaç (*bond order*) 33
- p* pressió / esforç (*pressure / stress*) 29, 62
- p* pico- (*pico-*), prefix SI 99
- p* protó (*proton*) 65, 118
- pc parsec (*parsec*), unitat de longitud 141
- pH pH (pH) 84, 89
- pol forma polimèrica (*polymeric form*) 71
- ppb part per mil milions (*part per billion*) 104
- pph part per cent (*part per hundred*) 104
- pphm part per cent milions (*part per hundred million*) 104
- ppm part per milió (*part per million*) 104
- ppq part per mil bilions (*part per quadrillion*) 104
- ppt part per mil (*part per thousand*) 104
- ppt part per bilió (*part per trillion*) 104
- psi lliura per polzada quadrada (*pound per square inch*), unitat de pressió 143
- P** matriu de densitat (*density matrix*) 36
- P** polarització dielèctrica (*dielectric polarization*) 31
- P* densitat de probabilitat (*probability density*) 32
- P* flux d'energia del so (*sound energy flux*) 30
- P* operador de simetria de permutació (*permutation symmetry operator*) 45
- P* pes (*weight*) 29
- P* potència (*power*) 30, 50
- P* pressió / esforç (*pressure / stress*) 29, 62
- P* probabilitat (*probability*) 61
- P* probabilitat de transició (*transition probability*) 81
- Pe* nombre de Péclet (*Péclet number*) 93
- Pr* nombre de Prandtl (*Prandtl number*) 93
- P* peta- (*peta-*), prefix SI 99
- P* poise (*poise*), unitat de viscositat 143
- Pa* pascal (*pascal*), unitat SI 97, 143

- q* gradient de camp elèctric (*electric field gradient*) 38
- q* vector d'ona (*wave vector*) 59
- q* calor (*heat*) 71
- q* coordenada generalitzada (*generalized coordinate*) 28, 61
- q* coordenada de vibració normal (*normal vibrational coordinate*) 41
- q* densitat de càrrega (*charge density*) 33
- q* funció de partició (*partition function*) 61
- q* nombre d'ona angular (*angular wavenumber*) 58
- q* velocitat de flux / cabal (*flow rate*) 92
- Q** moment quadrupolar (*quadrupole moment*) 38
- Q** calor (*heat*) 71
- Q** càrrega elèctrica / quantitat d'electricitat (*electric charge / quantity of electricity*) 30
- Q** coordenada de vibració normal (*normal vibrational coordinate*) 41
- Q** energia de desintegració (*disintegration energy*) 38
- Q** energia radiant (*radiant energy*) 50
- Q** factor de qualitat (*quality factor*) 51
- Q** funció de partició (*partition function*) 61
- Q** quocient de reacció (*reaction quotient*) 73
- r** vector de posició (*position vector*) 28, 58, 61
- r* coordenada de vibració interna (*internal vibrational coordinate*) 41
- r* coordenada polar esfèrica (*spherical polar coordinate*) 28
- r* distància interatòmica (*interatomic distance*) 41
- r* radi (*radius*) 28, 81
- r* velocitat de canvi de concentració (*rate of concentration change*) 80
- r* reacció (*reaction*) 76
- rad (*rad*), unitat de dosi de radiació 144
- rad radian (*radian*), unitat SI 28, 97, 144
- rem (*rem*), unitat de dosi equivalent 144
- R** moment angular d'un orbital nuclear (*nuclear orbital angular momentum*) 44
- R** moment dipolar de transició (*transition dipole moment*) 41
- R** vector de posició (*position vector*) 58
- R** vector de reticle (*lattice vector*) 57
- R** coeficient de Hall (*Hall coefficient*) 58
- R** constant de Rydberg (*Rydberg constant*) 37, 114
- R** constant dels gasos (*gas constant*) 61, 113
- R** coordenada de vibració interna (*internal vibrational coordinate*) 41



- R* poder de resolució (*resolving power*) 51  
*R* refracció molar (*molar refraction*) 51  
*R* resistència elèctrica (*electric resistance*) 31  
*R* resistència tèrmica (*thermal resistance*) 92  
*R* vector de posició (*position vector*) 58  
*Ra* nombre de Rayleigh (*Rayleigh number*) 93  
*Re* nombre de Reynolds (*Reynolds number*) 93  
*Rm* nombre de Reynolds magnètic (*magnetic Reynolds number*) 93  
*R* roentgen / röntgen (*röntgen*), unitat d'exposició 147  
 °R grau Rankine (*degree Rankine*), unitat de temperatura 143  
*Ry* rydberg (*rydberg*), unitat d'energia 142
- s* moment angular d'espín (*spin angular momentum*) 44  
*s* coeficient de sedimentació (*sedimentation coefficient*) 90  
*s* nombre de simetria (*symmetry number*) 61  
*s* paràmetre d'ordre de llarg abast (*long range order parameter*) 58  
*s* recorregut (*path length*) 28  
*s* longitud d'arc (*length of arc*) 28  
*s* solubilitat (*solubility*) 63  
*s* segon (*second*), unitat SI 97, 142  
*s* sòlid (*solid*) 70  
*sln* solució (*solution*) 71  
*sol* solució (*solution*) 75  
*sr* estereoradian (*steradian*), unitat SI 28, 97  
*sub* sublimació (*sublimation*) 75
- S* densitat de corrent de probabilitat / flux de probabilitat (*probability current density / probability flux*) 33  
*S* matriu de dispersió (*scattering matrix*) 81  
*S* moment angular d'espín (*spin angular momentum*) 44  
*S* vector de Poynting (*Poynting vector*) 32  
*S* àrea (*area*) 28  
*S* coordenada de vibració de simetria (*symmetry vibrational coordinate*) 41  
*S* entropia (*entropy*) 71, 81  
*S* integral de superposició (*overlap integral*) 33, 36  
*S* intensitat d'absorció (*absorption intensity*) 54  
*S<sub>n</sub>* operador de simetria rotació-reflexió (*rotation-reflection symmetry operator*) 46  
*Sc* nombre de Schmidt (*Schmidt number*) 93  
*Sh* nombre de Sherwood (*Sherwood number*) 94

- Sr* nombre de Strouhal (*Strouhal number*) 93  
*St* nombre de Stanton (*Stanton number*) 93  
*S* siemens (*siemens*), unitat SI 97  
*S* svedberg (svedberg), unitat de temps 142  
*St* stokes (*stokes*), unitat de viscositat cinemàtica 143  
*Sv* sievert (*sievert*), unitat SI 97, 144  
*Sv* svedberg (*svedberg*), unitat de temps 142  
*t* gruix d'una pel·lícula / gruix d'una capa (*film thickness / thickness of layer*) 90  
*t* nombre de transport (*transport number*) 85  
*t* temperatura Celsius (*Celsius temperature*) 71  
*t* temps (*time*) 21, 28  
 $t_{\frac{1}{2}}$  període de semidesintegració / període de semireacció (*half life*) 38, 80  
*t* tona (*tonne*), unitat de massa 101, 142  
*t* tritó (*triton*) 65, 118  
*trs* transició (*transition*) 75  
*T* parell de forces / moment d'una força (*torque / moment of a force*) 29  
*T* constant d'acoblament hiperfi (*hyperfine coupling tensor*) 42  
*T* energia cinètica (*kinetic energy*) 29, 32  
*T* període (*period*) 28, 38  
*T* interval de temps característic (*characteristic time interval*) 28  
*T* temperatura termodinàmica (*thermodynamic temperature*) 21, 59, 71  
*T* temps de relaxació (*relaxation time*) 38, 41  
*T* terme total (*total term*) 40  
*T* terme electrònic (*electronic term*) 40  
*T* transmitància / factor de transmissió (*transmittance / transmission factor*) 51  
 $T_{\frac{1}{2}}$  període de semidesintegració (*half life*) 38  
*T* tera- (*tera-*), prefix SI 99  
*T* tesla (*tesla*), unitat SI 97, 146  
*Torr* torr (*torr*), unitat de pressió 143  
*u* vector de desplaçament d'un ió (*displacement vector of an ion*) 58  
*u* velocitat (*velocity*) 28, 61  
*u* funció de Bloch (*Bloch function*) 59  
*u* mobilitat elèctrica (*electric mobility*) 85  
*u* rapidesa (*speed*) 28  
*u* unitat de massa atòmica unificada (*unified atomic mass unit*) 101, 113, 142

- $U$       diferència de potencial elèctric (*electric potential difference*) 30, 84  
 $U$       energia interna (*internal energy*) 71, 81  
 UA, AU unitat astronòmica (*astronomical unit*), unitat de longitud 141
- $v$       velocitat (*velocity*) 28  
 $v$       nombre quàntic vibracional (*vibrational quantum number*) 40  
 $v$       rapidesa (*speed*) 28  
 $v$       velocitat de reacció (*rate of reaction*) 80  
 $v$       volum específic, volum (*specific volume, volume*) 28  
 vap    vaporització (*vaporization*) 75  
 vit    substància vítria (*viterous substance*) 70
- $V$       energia potencial (*potential energy*) 29  
 $V$       potencial elèctric (*electric potential*) 30, 84  
 $V$       volum (*volume*) 28, 62, 81  
 $V$       volt (*volt*), unitat SI 97, 142
- $w$       velocitat (*velocity*) 28  
 $w$       densitat d'energia radiant (*radiant energy density*) 50  
 $w$       fracció en massa (*mass fraction*) 62  
 $w$       rapidesa (*speed*) 28  
 $w$       treball (*work*) 29, 71
- $W$       energia radiant (*radiant energy*) 50  
 $W$       nombre d'estats (*number of states*) 61  
 $W$       pes (*weight*) 29  
 $W$       pes estadístic (*statistical weight*) 61  
 $W$       treball (*work*) 29, 71  
 $We$     nombre de Weber (*Weber number*) 93  
 $W$       watt (*watt*), unitat SI 97, 143  
 $Wb$     weber (*weber*), unitat SI 97, 146
- $x$       constant d'anharmonicitat vibracional (*vibrational anharmonicity constant*) 40  
 $x$       coordenada cartesiana espacial (*cartesian space coordinate*) 28  
 $x$       coordenada fraccionària (*fractional coordinate*) 58  
 $x$       fracció molar / fracció en quantitat / fracció en nombre (*mole fraction / amount fraction / number fraction*) 62  
 $x$       paràmetre d'energia (*energy parameter*) 33
- $X$       reactància (*reactance*) 31  
 $X$       unitat X (*X unit*) 141

- $y$  coordenada cartesiana espacial (*cartesian space coordinate*) 28  
 $y$  coordenada fraccionària (*fractional coordinate*) 58  
 $y$  fracció molar de gasos (*mole fraction for gases*) 62  
 $y$  yocto- (*yocto-*), prefix SI 99  
 $yd$  iarda (*yard*), unitat de longitud 141
- $Y$  admitància (*admittance*) 31  
 $Y$  funció de Planck (*Planck function*) 72  
 $Y$  funció harmònica esfèrica / harmònics esfèrics (*spherical harmonic function*) 32  
 $Y$  yotta- (*yotta-*), prefix SI 99
- $z$  coordenada cartesiana espacial (*cartesian space coordinate*) 28  
 $z$  coordenada cilíndrica (*cylindrical coordinate*) 28  
 $z$  coordenada fraccionària (*fractional coordinate*) 58  
 $z$  freqüència de col·lisions / factor de freqüència de col·lisions (*collisional frequency / collision frequency factor*) 81  
 $z$  funció de partició (*partition function*) 61  
 $z$  nombre de càrrega (*charge number*) 83  
 $z$  zepto- (*zepto-*), prefix SI 99
- $Z$  densitat de col·lisions / nombre de col·lisions (*collision density / collision number*) 81  
 $Z$  factor de compressió / factor de compressibilitat (*compression factor / compressibility factor*) 72  
 $Z$  funció de partició (*partition function*) 61  
 $Z$  impedància (*impedance*) 31  
 $Z$  nombre de protons / nombre atòmic (*proton number / atomic number*) 37  
 $Z$  zetta- (*zetta-*), prefix SI 99
- $\alpha$  polaritzabilitat elèctrica d'una molècula (*electric polarizability of a molecule*) 38  
 $\alpha$  absorbància / factor d'absorció (*absorptance / absorption factor*) 51  
 $\alpha$  angle de rotació òptica (*angle of optical rotation*) 52  
 $\alpha$  angle pla (*plane angle*) 28, 57  
 $\alpha$  coeficient d'absorció (*absorption coefficient*) 51  
 $\alpha$  coeficient d'absorció acústica (*acoustic absorption factor*) 30  
 $\alpha$  coeficient de dilatació (*expansion coefficient*) 72  
 $\alpha$  coeficient de transferència (electroquímica) (*(electrochemical) transfer coefficient*) 84

- $\alpha$  coeficient de transferència de calor (*coefficient of heat transfer*) 92  
 $\alpha$  constant d'estructura fina (*fine structure constant*) 37, 113  
 $\alpha$  constant de Madelung (*Madelung constant*) 58  
 $\alpha$  funció d'ona d'espín (*spin wave function*) 33  
 $\alpha$  grau de reacció (*degree of reaction*) 63  
 $\alpha$  integral coulombiana (*coulomb integral*) 33  
 $\alpha_p$  coeficient de pressió relativa (*relative pressure coefficient*) 72  
 $\alpha$  partícula alfa (*alpha-particle*) 65, 118
- $\beta$  primera hiperpolaritzabilitat (*first hyper-polarizability*) 38  
 $\beta$  angle pla (*plane angle*) 28, 57  
 $\beta$  coeficient de pressió (*pressure coefficient*) 72  
 $\beta$  constant de Van der Waals retardada (*retarded van der Waals constant*) 90  
 $\beta$  funció d'ona d'espín (*spin wave function*) 33  
 $\beta$  integral de ressonància (*resonance integral*) 33  
 $\beta$  paràmetre de temperatura inversa (*reciprocal temperature parameter*) 61  
 $\beta$  pes estadístic (*statistical weight*) 41, 61  
 $\beta$  partícula beta (*beta-particle*) 118
- $\gamma$  segona hiperpolaritzabilitat (*second hyper-polarizability*) 38  
 $\gamma$  angle pla (*plane angle*) 28, 57  
 $\gamma$  coeficient d'activitat (*activity coefficient*) 73, 83  
 $\gamma$  coeficient de dilatació cúbica (*cubic expansion coefficient*) 72  
 $\gamma$  concentració en massa / densitat màssica / densitat en massa (*mass concentration / mass density*) 62  
 $\gamma$  conductivitat (*conductivity*) 31  
 $\gamma$  deformació de cisallament (*shear strain*) 30  
 $\gamma$  paràmetre de Grüneisen (*Grüneisen parameter*) 58  
 $\gamma$  raó de capacitats calorífiques (*ratio of heat capacities*) 72  
 $\gamma$  raó giromagnètica / raó magnetogírica (*gyromagnetic / magnetogyric ratio*) 37, 41, 42  
 $\gamma$  tensió superficial (*surface tension*) 29, 72, 90  
 $\gamma_p$  raó giromagnètica del protó / raó magnetogírica del protó (*proton magnetogyric ratio*) 114  
 $\gamma$  fotó (*photon*) 65, 118  
 $\gamma$  gamma (*gamma*), unitat de massa 142
- $\Gamma$  amplària de nivell (*level width*) 38  
 $\Gamma$  concentració superficial (*surface concentration*) 63, 90

- $\Gamma$  intensitat d'absorció (*absorption intensity*) 51  
 $\Gamma$  paràmetre de Grüneisen (*Grüneisen parameter*) 58  
 $\Gamma$  funció gamma (*gamma function*) 110
- $\delta$  angle de pèrdua (*loss angle*) 31  
 $\delta$  constants de distorsió centrífuga (*centrifugal distortion constants*) 40  
 $\delta$  desplaçament químic / escala  $\delta$  (*chemical shift /  $\delta$  scale*) 41  
 $\delta$  factor de dissipació acústica (*acoustic dissipation factor*) 30  
 $\delta$  gruix / gruixària (*thickness*) 28, 84, 90  
 $\delta$  funció delta de Dirac / delta de Kronecker (*Dirac delta function / Kronecker delta*) 110  
 $\delta$  increment infinitesimal (*infinitesimal change*) 110
- $\Delta$  constants de distorsió centrífuga (*centrifugal distortion constants*) 40  
 $\Delta$  defecte inercial (*inertial defect*) 40  
 $\Delta$  excés de massa (*mass excess*) 37  
 $\Delta$  increment finit (*finite change*) 110
- $\varepsilon$  coeficient d'absorció molar [decimal] (*molar [decadic] absorption coefficient*) 51  
 $\varepsilon$  deformació lineal / elongació relativa (*linear strain / relative elongation*)  
 $\varepsilon$  emitància (*emittance*) 51  
 $\varepsilon$  energia de l'orbital (*orbital energy*) 35  
 $\varepsilon$  permitivitat (*permittivity*) 31  
 $\varepsilon_0$  permitivitat del buit (*permittivity of vacuum*) 31, 113, 148  
 $\varepsilon$  funció esglaonada unitària / funció de Heaviside (*unit step function / Heaviside function*) 110  
 $\varepsilon$  símbol de Levi-Civita (*Levi-Civita symbol*) 110
- $\zeta$  constant zeta de Coriolis (*Coriolis zeta constant*) 40  
 $\zeta$  potencial electrocinètic / potencial zeta (*electrokinetic potential / zeta potential*) 85
- $\eta$  sobretensió / sobrepotencial (*overpotential*) 84  
 $\eta$  viscositat (*viscosity*) 30
- $\theta$  angle de Bragg (*Bragg angle*) 58  
 $\theta$  angle de contacte (*contact angle*) 90  
 $\theta$  angle de dispersió (*scattering angle*) 81  
 $\theta$  angle pla (*plane angle*) 28  
 $\theta$  coordenada cilíndrica (*cylindrical coordinate*) 28

- $\theta$  coordenada de vibració interna (*internal vibrational coordinate*) 41  
 $\theta$  coordenada polar esfèrica (*spherical polar coordinate*) 28  
 $\theta$  deformació cúbica / deformació volúmica (*bulk strain / volume strain*) 30  
 $\theta$  recobriment superficial (*surface coverage*) 90  
 $\theta$  temperatura (*temperature*) 61, 71
- $\Theta$  moment quadropolar (*quadrupole moment*) 38  
 $\Theta$  temperatura (*temperature*) 61
- $\kappa$  coeficient d'absorció molar neperiana (*molar napierian absorption coefficient*) 51  
 $\kappa$  coeficient de transmissió (*transmission coefficient*) 83  
 $\kappa$  compressibilitat (*compressibility*) 72  
 $\kappa$  conductivitat (*conductivity*) 24, 85  
 $\kappa$  gruix invers de la doble capa (*reciprocal thickness of double layer*) 90  
 $\kappa$  paràmetre d'asimetria (*asymmetry parameter*) 40  
 $\kappa$  radi invers de l'atmosfera iònica (*reciprocal radius of ionic atmosphere*) 85  
 $\kappa$  raó de capacitats calorífiques (*ratio of heat capacities*) 72  
 $\kappa$  susceptibilitat magnètica (*magnetic susceptibility*) 31
- $\lambda$  activitat absoluta (*absolute activity*) 61, 72  
 $\lambda$  conductivitat iònica molar (*molar ionic conductivity*) 85  
 $\lambda$  conductivitat tèrmica (*thermal conductivity*) 58, 92  
 $\lambda$  constant [de velocitat] de desintegració (*disintegration [rate] constant*) 38  
 $\lambda$  constant de Van der Waals (*van der Waals constant*) 90  
 $\lambda$  longitud d'ona (*wavelength*) 50  
 $\lambda$  nombre quàntic del component del moment angular (*angular momentum component quantum number*) 44  
 $\lambda$  recorregut lliure mitjà (*mean free path*) 81  
 $\lambda$  lambda (*lambda*), unitat de volum 141
- $\Lambda$  conductivitat iònica molar (*molar ionic conductivity*) 85  
 $\Lambda$  nombre quàntic del component del moment angular (*angular momentum component quantum number*) 44
- $\mu$  moment dipolar elèctric (*electric dipole moment*) 31, 38, 41  
 $\mu$  coeficient de Joule-Thomson (*Joule-Thomson coefficient*) 72  
 $\mu$  coeficient de Thomson (*Thomson coefficient*) 58  
 $\mu$  factor de fricció (*friction factor*) 30

- $\mu$  massa reduïda (*reduced mass*) 29  
 $\mu$  mobilitat (*mobility*) 59  
 $\mu$  mobilitat elèctrica (*electric mobility*) 85  
 $\mu$  moment dipolar magnètic (*magnetic dipole moment*) 31, 37  
 $\mu$  permeabilitat (*permeability*) 31  
 $\mu$  potencial químic (*chemical potential*) 62, 72, 78, 79, 86  
 $\mu$  viscositat (*viscosity*) 30  
 $\tilde{\mu}$  potencial electroquímic (*electrochemical potential*) 84  
 $\mu_0$  permeabilitat del buit (*permeability of vacuum*) 31, 113, 148  
 $\mu_B$  magnetó de Bohr (*Bohr magneton*) 37, 114, 146  
 $\mu_e$  moment magnètic de l'electró (*electron magnetic moment*) 114  
 $\mu_N$  magnetó nuclear (*nuclear magneton*) 37, 114, 146  
 $\mu_p$  moment magnètic del protó (*proton magnetic moment*) 114  
 $\mu$  micra / micròmetre (*micron*), unitat de longitud 141  
 $\mu$  micro- (*micro-*), prefix SI 99  
 $\mu$  muó (*muon*) 65, 117
- $\nu$  coeficient estequiomètric (*stoichiometric number*) 63  
 $\nu$  freqüència (*frequency*) 28, 40, 50  
 $\nu$  nombre de càrrega de la reacció d'una cel·la electroquímica (*charge number of electrochemical cell reaction*) 83  
 $\nu$  viscositat cinemàtica (*kinematic viscosity*) 30  
 $\tilde{\nu}$  nombre d'ona en el buit (*wavenumber in vacuum*) 40, 50  
 $\nu_e$  neutrí (*neutrino*) 118
- $\xi$  avançament de la reacció / extensió [de la reacció] (*extent of reaction / advancement*) 63, 77  
 $\xi$  magnetitzabilitat (*magnetizability*) 37
- $\Xi$  gran funció de partició / col·lectiu gran canònic (*grand partition function / grand canonical ensemble*) 61
- $\pi$  moment angular (*angular momentum*) 44  
 $\pi$  pressió superficial (*surface pressure*) 90  
 $\pi$  pió (*pion*) 118  
 $\pi$  raó entre la circumferència i el diàmetre d'un cercle (*ratio of circumference to diameter of a circle*) 114
- $\Pi$  coeficient de Peltier (*Peltier coefficient*) 58  
 $\Pi$  pressió osmòtica (*osmotic pressure*) 74  
 $\Pi$  signe de producte (*product sign*) 109



- $\rho$  coordenada cilíndrica (*cylindrical coordinate*) 28  
 $\rho$  densitat màssica / densitat en massa / concentració en massa (*mass density / mass concentration*) 29, 62  
 $\rho$  densitat d'energia (*energy density*) 50  
 $\rho$  densitat d'estats (*density of states*) 61  
 $\rho$  densitat de càrrega (*charge density*) 30, 33, 59  
 $\rho$  factor de reflexió acústica (*acoustic reflection factor*) 30  
 $\rho$  reflectància (*reflectance*) 51  
 $\rho$  resistivitat (*resistivity*) 31  
 $\rho_A$  densitat superficial (*surface density*) 29  
  
 $\sigma$  àrea per molècula (*area per molecule*) 90  
 $\sigma$  conductivitat (*conductivity*) 31, 58, 85  
 $\sigma$  constant de blindatge [RMN] (*shielding constant [NMR]*) 41  
 $\sigma$  constant de Stefan-Boltzmann (*Stefan-Boltzmann constant*) 51, 114  
 $\sigma$  densitat de càrrega [superficial] (*[surface] charge density*) 30, 84  
 $\sigma$  nombre d'ona (*wavenumber*) 50  
 $\sigma$  nombre de simetria (*symmetry number*) 61  
 $\sigma$  nombre quàntic del component d'espín (*spin component quantum number*) 44  
 $\sigma$  paràmetre d'ordre de curt abast (*short range order parameter*) 58  
 $\sigma$  pla de reflexió (*reflection plane*) 46  
 $\sigma$  secció eficaç (*cross section*) 38, 81  
 $\sigma$  secció eficaç d'absorció (*absorption cross section*) 51  
 $\sigma$  tensió normal (*normal stress*) 29  
 $\sigma$  tensió superficial (*surface tension*) 29, 72, 90  
  
 $\Sigma$  nombre quàntic del component d'espín (*spin component quantum number*) 44  
 $\Sigma_f$  tensió de pel·lícula (*film tension*) 90  
 $\Sigma$  sumatori (*summation sign*) 109  
  
 $\tau$  coeficient de Thomson (*Thomson coefficient*) 58  
 $\tau$  coeficient de transmissió acústica (*acoustic transmission factor*) 30  
 $\tau$  desplaçament químic (*chemical shift*) 41  
 $\tau$  gruix d'una capa (*thickness of layer*) 90  
 $\tau$  [interval de] temps característic / temps de relaxació (*characteristic time / relaxation time*) 28, 58, 80  
 $\tau$  tensió de cisallament (*shear stress*) 29  
 $\tau$  transmitància / factor de transmissió (*transmittance / transmission factor*) 51  
 $\tau$  vida mitjana (*mean life*) 38

- $\phi$  angle pla (*plane angle*) 28  
 $\phi$  coeficient de fugacitat (*fugacity coefficient*) 73  
 $\phi$  coeficient osmòtic (*osmotic coefficient*) 74  
 $\phi$  coordenada polar esfèrica (*spherical polar coordinate*) 28  
 $\phi$  fluïdesa (*fluidity*) 30  
 $\phi$  fracció en volum (*volume fraction*) 62  
 $\phi$  funció d'ona (*wavefunction*) 32  
 $\phi$  orbital molecular (*molecular orbital*) 33, 34, 36  
 $\phi$  potencial elèctric (*electric potential*) 30  
 $\phi$  potencial elèctric intern (*inner electric potential*) 84  
 $\phi$  rendiment quàntic (*quantum yield*) 81  
 $\phi_{rst}$  constant de força vibracional (*vibrational force constant*) 41
- $\Phi$  energia potencial (*potential energy*) 29  
 $\Phi$  flux magnètic (*magnetic flux*) 31  
 $\Phi$  funció de treball (*work function*) 58  
 $\Phi$  potència radiant (*radiant power*) 50  
 $\Phi$  rendiment quàntic (*quantum yield*) 81  
 $\Phi$  velocitat de flux de calor (*heat flow rate*) 92
- $\chi$  tensor d'energia d'interacció quadrupolar (*quadrupole interaction energy tensor*) 38  
 $\chi$  electronegativitat (*electronegativity*) 37  
 $\chi$  orbital atòmic (*atomic orbital*) 33, 36  
 $\chi$  potencial elèctric de superfície (*surface electric potential*) 84  
 $\chi$  susceptibilitat magnètica (*magnetic susceptibility*) 31  
 $\chi_e$  susceptibilitat elèctrica (*electric susceptibility*) 31  
 $\chi_m$  susceptibilitat magnètica molar (*molar magnetic susceptibility*) 31
- $\psi$  funció d'ona (*wavefunction*) 32  
 $\psi$  potencial elèctric extern (*outer electric potential*) 84
- $\Psi$  flux elèctric (*electric flux*) 31  
 $\Psi$  funció d'ona (*wavefunction*) 32, 34
- $\omega$  angle sòlid (*solid angle*) 28  
 $\omega$  freqüència angular / freqüència circular / pulsància / pulsació (*angular frequency / circular frequency / pulsance*) 28, 38, 50, 58  
 $\omega$  velocitat angular (*angular velocity*) 28  
 $\omega$  nombre d'ona de vibració harmònica (*harmonic vibration wavenumber*) 40

$\omega$	pes estadístic ( <i>statistical weight</i> )	61
$\Omega$	angle sòlid ( <i>solid angle</i> )	28
$\Omega$	funció de partició ( <i>partition function</i> )	61
$\Omega$	nombre quàntic del component de moment angular ( <i>angular momentum component quantum number</i> )	44
$\Omega$	volum a l'espai de fases ( <i>volume in phase space</i> )	61
$\Omega$	ohm ( <i>ohm</i> ), unitat SI	97, 145

### SÍMBOLS ESPECIALS

%	per cent ( <i>percent</i> )	103
‰	per mil ( <i>permille</i> )	104
°	grau ( <i>degree</i> ), unitat d'arc	101, 144
°	estàndard ( <i>standard</i> )	76
°	estàndard ( <i>standard</i> )	76
'	minut ( <i>minute</i> ), unitat d'arc	101, 144
"	segon ( <i>second</i> ), unitat d'arc	101, 144
*	complex conjugat ( <i>complex conjugate</i> )	34, 110
*	excitació ( <i>excitation</i> )	67
*	substància pura ( <i>pure substance</i> )	76
‡	[magnitud d']activació / estat de transició ( <i>activation / transition state</i> )	76, 81
$\infty$	dilució infinita ( <i>infinite dilution</i> )	76
[B]	concentració de B ( <i>concentration of B</i> )	64
[ $\alpha$ ]	poder rotatori òptic específic ( <i>specific optical rotatory power</i> )	52



## ÍNDEX DE MOTS CATALÀ-ANGLÈS

L'ordenació alfabètica de les entrades s'ha fet d'acord amb el sistema discontinu amb partícules, és a dir, mot a mot. Quan es dona més d'una pàgina de referència, la negreta indica la referència general més útil. Els termes sinònims o estretament relacionats estan separats per una barra.

### A

- ab initio* ('des del començament'), *ab initio* ('from the beginning') 34
- abcoulomb, *abcoulomb* 144
- abreviacions *abbreviations* 159-169 i pàssim
- abreviatures, *abbreviations* 92, 159
- absorbància, *absorbance* 51, 53, 56, 182-183
- absorbància [decimal], [*decadic*] *absorbance* 51, 53
- absorbància [neperiana], [*napierian*] *absorbance* 51, 53, 183
- absorció, *absorption* 48
- absortància, *absorptance* / *absorption factor* 51, 53, 196
- absortància interna, *internal absorptance* 53
- abundància isotòpica [dels núclids], *isotopic abundance* [of *nuclides*] 123-134
- acceleració, *acceleration* 28, 98, 142, 181
- acceleració de caiguda lliure, *acceleration of free fall* / *acceleration due to gravity* 29, 91, 93, 114, 142, 186
- acceleració de la gravetat, *acceleration due to gravity* / *acceleration of free fall* 29, 91, 93, 114, 142, 186
- acceleració [estàndard] de caiguda lliure, [*standard*] *acceleration of free fall* 114, 142
- acció, *action* / *angular momentum* 29, 102, 143, 153
- acre, *acre* 141

- acrònims, *acronyms* 159-169
- activitat absoluta, *absolute activity* 61, 72, 199
- activitat d'un electròlit, *activity of an electrolyte* 83
- activitat (d'una substància radioactiva), *activity (of a radioactive substance)* 38, 97, 182
- activitat iònica mitjana, *mean ionic activity* 83, 86, 89
- activitat (radioactiva), *(radioactive) activity* 38, 97, 182
- activitat (relativa), *(relative) activity* 73-74
- acústica, *acoustics* 29-30, 104-106, 196-197, 201
- admitància, *admittance* 31, 196
- admitància complexa, *complex admittance* 31
- adsorbit -ida, *adsorbed* 71, 90-91, 182
- adsorció, *adsorption* 76, 91
- adsorció reduïda, *reduced adsorption* 91
- adsorció relativa, *relative adsorption* 91
- afinitat de reacció, *affinity of reaction* 73, 182
- afinitat electrònica, *electron affinity* 37, 181
- alçària, *height* 28
- alfabet grec, *Greek alphabet* 180
- altura / alçària, *height* 28, 82, 187
- amagat, *amagat* 28, 144, 147, 182
- ampere, *ampere* 95, 96, 97, 144, 148, 151, 165, 182
- amplada, *breadth* 28
- amplària, *breadth* 28, 163, 182, 197
- amplària de ratlla, *line width* 53
- amplària de nivell, *level width* 38, 197
- angle de Bragg, *Bragg angle* 58, 198
- angle de contacte, *contact angle* 90, 198
- angle de dispersió, *scattering angle* 81, 198
- angle de la cel·la unitat, *unit cell angle* 57
- angle de pèrdua, *loss angle* 31, 198
- angle de rotació òptica, *angle of optical rotation* 52, 54, 196
- angle invers de la cel·la unitat, *reciprocal unit cell angle* 57
- angle pla, *plane angle* 28, 54, 97, 101, 144, 196-198, 202
- angle sòlid, *solid angle* 28, 52, 82, 97, 202-203
- àngstrom, *ångström* 43, 101, 136, 141, 182
- ànode, *anode* 86
- anticommutador, *anticommutator* 33
- any, *year* 142, 147, 181
- any gregorià, *Gregorian year* 147
- any julià, *Julian year* 147

any llum, *light year* 141, 189  
any tròpic, *tropical year* 147  
àrea, *area* 24, 28, 74, 92-93, 98, 101, 141, 181, 182, 193  
àrea del moment quadrupolar elèctric, *electric quadrupole moment area* 124  
àrea del quadrupol, *quadrupole area* 145  
àrea per molècula, *area per molecule* 90-91, 201  
àrea per molècula en una monocapa completa, *area per molecule in a filled monolayer* 90  
àrea superficial específica, *specific surface area* 90, 181  
arrel quadrada de menys u, *square root of minus one* 110, 187  
atmosfera, *atmosphere* 85, 104, 113, 136, 143, 182, segona pàgina de la guarda posterior  
atmosfera estàndard, *standard atmosphere* 113  
atmosfera litre, *litre atmosphere* 142  
atomització, *atomization* 76, 78, 182  
atto-, *atto-* 99, 181  
autoinductància, *self-inductance* 31  
avançament de la reacció, *advancement / extent of reaction* 63, 200

## B

bar, *bar* 63, 101, 136, 143, 183, segona pàgina de la guarda posterior  
barn, *barn* 101, 124, 141, 183  
barrera d'energia, *energy barrier* 82  
barril, *barrel* 141  
base dels logaritmes neperians, *base of natural logarithms* 109, 114, 184  
becquerel, *becquerel* 97, 98, 144, 183  
bel, *bel* 105, 106, 183  
biot, *biot* 144, 151, 183  
bohr, *bohr* 102, 114, 139, 141, 153, 183

## C

cabal, *flow rate* 192  
càlcul de magnituds, *quantity calculus* 19-20, 135-140  
calor, *heat* 71, 192  
caloria, *calorie* 142, 183  
caloria a 15 °C, *15 °C calorie* 142  
caloria internacional, *international calorie* 142

- caloria termoquímica, *thermochemical calorie* 142
- camp magnètic, *magnetic field* 31-32, 43, 49, 99, 146, 152, 187, 191
- candela, *candela* 52, 96, 97, 183
- capacitat, *capacitance* 31, 152, 155, 183
- capacitat calorífica, *heat capacity* 22, 24, 71-72, 98, 143, 183
- capacitat calorífica a pressió constant, *heat capacity at constant pressure* 22, 24, 72, 93
- capacitat calorífica a volum constant, *heat capacity at constant volume* 59, 72
- capacitat calorífica específica, *specific heat energy* 98
- capacitat calorífica molar, *molar heat capacity* 98, 143
- capacitat elèctrica, *electric capacitance* 97
- càrrega, *charge* 32, 34, 36, 65-67, 86-87, 102, 140, 152-153, 155
- càrrega de l'electró, *electron charge* 34
- càrrega del protó, *proton charge / elementary charge* 37, 83, 118, 144, 184
- càrrega elèctrica, *electric charge / quantity of electricity* 30, 65, 97, 140, 144, 149, 151, 153, 186, 192
- càrrega elemental, *elementary charge / proton charge* 37, 39, 83, 102, 113, 153, 184
- càrrega superficial, *areic charge* 24
- càtode, *cathode* 86
- cavall de vapor, *horse power* 143, 187
- cel·la *Vegeu cel·la electroquímica, cel·la galvànica*
- cel·la electroquímica, *electrochemical cell* 69, 83, 84, 85, 200
- cel·la galvànica, *galvanic cell* 84, 85, 86-87, 88-89
- centi-, *centi-* 99, 183
- centímetre, *centimetre* 141
- centipoise, *centipoise* 143
- CGPM ('Conferència General de Pesos i Mesures'), *CGPM ('Conférence Générale des Poids et Mesures')* 38, 63, 95-96, 101, 154
- cinètica química, *chemical kinetics* 16, 80
- clàusius, *clausius* 143, 184
- coeficient binòmic, *binomial coefficient* 109
- coeficient d'absorció, *absorption coefficient* 24, 51-54, 56, 181, 188, 196
- coeficient d'absorció [lineal] decimal, *[linear] decadic absorption coefficient* 51
- coeficient d'absorció [lineal] neperià, *[linear] napierian absorption coefficient* 51, 54
- coeficient d'absorció molar [decimal], *molar [decadic] absorption coefficient* 51, 198
- coeficient d'absorció molar neperià, *molar napierian absorption coefficient* 51, 199
- coeficient d'absorció neperià, *napierian absorption coefficient* 51, 54
- coeficient d'activitat, *activity coefficient* 73, 83, 89, 185, 197
- coeficient d'activitat iònica mitjana, *mean ionic activity coefficient* 83, 89



- coeficient d'activitat referent a la llei de Henry expressat en concentracions, *activity coefficient referenced to Henry's law concentration basis* 73
- coeficient d'activitat referent a la llei de Henry expressat en fraccions molars, *activity coefficient referenced to Henry's law mole fraction basis* 73
- coeficient d'activitat referent a la llei de Henry expressat en molalitats, *activity coefficient referenced to Henry's law molality basis* 73
- coeficient d'activitat referent a la llei de Raoult, *activity coefficient referenced to Raoult's law* 73
- coeficient d'expansió tèrmica, *expansivity coefficient* 74
- coeficient d'extinció, *extinction coefficient* 53
- coeficient de difusió, *diffusion coefficient* 59-60, 92-93, 99, 184
- coeficient de dilatació cúbica, *cubic expansion coefficient* 59, 72, 197
- coeficient de dilatació lineal, *linear expansion coefficient* 72
- coeficient de dilatació tèrmica, *coefficient of thermal expansion / thermal expansion coefficient* 74
- coeficient de fugacitat, *fugacity coefficient* 73, 202
- coeficient de Hall, *Hall coefficient* 58, 182, 192
- coeficient de Joule-Thomson, *Joule-Thomson coefficient* 72, 199
- coeficient de Lorenz, *Lorenz coefficient* 58, 189
- coeficient de Peltier, *Peltier coefficient* 58, 200
- coeficient de pressió, *pressure coefficient* 72, 197
- coeficient de pressió relativa, *relative pressure coefficient* 72, 197
- coeficient de sedimentació, *sedimentation coefficient* 90-91, 193
- coeficient de Thomson, *Thomson coefficient* 58, 199, 201
- coeficient de transferència, *transfer coefficient* 84, 92-93
- coeficient de transferència de calor, *coefficient of heat transfer* 92-93, 187-188, 197
- coeficient de transferència de matèria, *mass transfer coefficient / diffusion rate constant* 84, 92-93, 188
- coeficient de transferència (electroquímica), *(electrochemical) transfer coefficient* 84, 196
- coeficient de transmissió, *transmission coefficient* 83, 199
- coeficient de Van der Waals, *van der Waals coefficient* 72, 181-182
- coeficient de velocitat, *rate coefficient / rate constant* 80
- coeficient estequiomètric, *stoichiometric number* 63-64, 69, 78, 200
- coeficient osmòtic en fraccions molars, *osmotic coefficient mole fraction basis* 74, 202
- coeficient osmòtic en molalitats, *osmotic coefficient molality basis* 74, 202
- col·lectiu gran canònic, *grand canonical ensemble / grand partition function* 61, 200
- commutador, *commutator* 33
- complex, *complex* 51, 76, 110, 160, 162

- complex activat, *activated complex* 76, 160  
 complex conjugat, *complex conjugate* 34, 110, 203  
 compressibilitat, *compressibility* 59, 72, 195, 199  
 compressibilitat isoentròpica, *isentropic compressibility* 72  
 compressibilitat isotèrmica, *isothermal compressibility* 59, 72  
 concentració, *concentration* 54, 63-64, 75, 79-82, 85, 89, 99, 103-104, 183, 190, 203  
 concentració crítica de coagulació, *critical coagulation concentration* 92  
 concentració de substància, *substance concentration* 21, 64  
 concentració en massa, *mass concentration / mass density* 54, 62-63, 103, 197, 201  
 concentració en nombre, *number concentration* 59, 61, 63, 81, 184  
 concentració en quantitat [de substància], *amount concentration [of substance]* 21, 24, 53-54, 63-64, 70, 98-99, 183  
 concentració estàndard, *standard concentration* 79  
 concentració iònica mitjana, *mean ionic concentration* 85  
 concentració miscel·lar crítica, *critical micellization concentration* 92  
 concentració superficial, *surface concentration* 63, 81, 90-91, 197  
 concentració superficial d'excés, *surface excess concentration* 90-91  
 concentració superficial total d'excés, *total surface excess concentration* 90-91  
 condensat -ada, *condensed* 70, 140  
 conductància, *conductance* 31  
 conductància elèctrica, *electric conductance* 93, 97, 186  
 conductància específica, *specific conductance* 86  
 conductància tèrmica, *thermal conductance* 92, 186  
 conductivitat, *conductivity* 24, 31, 58, 70, 85-86, 99, 138, 197, 199, 201  
 conductivitat iònica, *ionic conductivity / molar conductivity of an ion* 85, 199  
 conductivitat molar, *molar conductivity* 24, 70, 85-86, 99, 138, 199  
 conductivitat molar (d'un electròlit), *molar conductivity (of an electrolyte)* 85  
 conductivitat molar d'un ió, *molar conductivity of an ion / ionic conductivity* 85  
 conductivitat tèrmica, *thermal conductivity* 58, 92-93, 99, 168, 188, 199  
 configuració electrònica, *electron configuration* 46-47  
 conjugat hermitià, *hermitian conjugate* 33  
 constant d'acoblament, *coupling constant* 40-44, 181-182, 184, 188  
 constant d'acoblament de Coriolis, *Coriolis coupling constant* 44  
 constant d'acoblament dipolar, *dipolar coupling constant* 41  
 constant d'acoblament [dipolar] directe, *direct [dipolar] coupling constant* 41  
 constant d'acoblament directe, *direct coupling constant* 184  
 constant d'acoblament espín-espín, *spin-spin coupling constant* 188  
 constant d'acoblament espín-espín [indirecte], *[indirect] spin-spin coupling constant* 41, 188  
 constant d'acoblament espín-espín reduït, *reduced spin-spin coupling constant* 41, 188

- constant d'acoblament espín-òrbita, *spin-orbit coupling constant* 40, 182
- constant d'acoblament hiperfí, *hyperfine coupling constant* 42, 181-182, 194
- constant d'anharmonicitat vibracional, *vibrational anharmonicity constant* 40, 186, 195
- constant d'Avogadro, *Avogadro constant* 21, 61-62, 69, 113, 189-190
- constant d'equilibri, *equilibrium constant* 73, 75, 188
- constant d'equilibri de dissociació d'un àcid, *acid dissociation equilibrium constant* 75
- constant d'equilibri en concentracions, *concentration basis equilibrium constant* 73
- constant d'equilibri en molalitats, *molarity basis equilibrium constant* 73
- constant d'equilibri en pressions, *pressure basis equilibrium constant* 73
- constant d'equilibri estàndard, *standard equilibrium constant* 74-75, 77
- constant d'equilibri termodinàmic, *thermodynamic equilibrium constant* 75
- constant d'estructura fina, *fine structure constant* 37, 102, 113, 197
- constant d'hidròlisi d'una base, *base hydrolysis constant* 75
- constant de blindatge, *shielding constant* 41, 43, 201
- constant de Boltzmann, *Boltzmann constant* 61, 80, 94, 113, 188
- constant de cel·la de conductivitat, *conductivity cell constant* 85, 188
- constant de Faraday, *Faraday constant* 83, 113, 186
- constant de força vibracional, *vibrational force constant* 41, 186, 188, 202
- constant de la llei de Henry, *Henry's law constant* 73, 75, 188
- constant de Madelung, *Madelung constant* 58, 190, 197
- constant de massa, *mass constant* 37, 62, 113, 119, 189
- constant de massa atòmica, *atomic mass constant* 37, 62, 113, 119, 189
- constant de Planck, *Planck constant* 37, 50, 113, 150, 153, 187
- constant de Planck/ $2\pi$ , *Planck constant/ $2\pi$*  37, 50, 102
- constant de Rydberg, *Rydberg constant* 37, 114, 192
- constant de Stefan-Boltzmann, *Stefan-Boltzmann constant* 51, 114, 201
- constant de temps, *time constant / characteristic time interval / relaxation time* 28
- constant de Van der Waals, *van der Waals constant* 90, 199
- constant de Van der Waals-Hamaker, *van der Waals-Hamaker constant* 90, 182
- constant de Van der Waals retardada, *retarded van der Waals constant* 90, 183, 196
- constant de velocitat, *rate constant / rate coefficient* 80, 86, 188
- constant [de velocitat] de decaïment, *decay [rate] constant* 38
- constant [de velocitat] de desintegració, *disintegration [rate] constant* 38, 199
- constant de velocitat de difusió, *diffusion rate constant / mass transfer coefficient* 84, 188
- constant de velocitat de la reacció d'electrode, *electrode reaction rate constant* 84

- constant dels gasos, *gas constant* 61, 113, 192
- constant dielèctrica, *dielectric constant* 32, 151
- constant gravitacional, *gravitational constant* 29, 114, 186
- constant [molar] dels gasos, *[molar] gas constant* 61, 113, 192
- constant rotacional, *rotational constant* 40, 182-184
- constant zeta de Coriolis, *Coriolis zeta constant* 40, 197
- constants de distorsió centrífuga, *centrifugal distortion constants* 40, 42, 184, 197-198
- constants de força, *force constants* 43
- constants de radiació, *radiation constants* 51, 114, 183
- constants diatòmiques, *diatomic constants* 41
- constants físiques fonamentals, *fundamental physical constants* 101, 113-115, 137-138, 153
- constants matemàtiques, *mathematical constants* 108, 114
- constants poliatòmiques, *polyatomic constants* 41
- constants poliatòmiques de coordenades de simetria, *polyatomic constants of symmetry coordinates* 41
- constants poliatòmiques de coordenades internes, *polyatomic constants of internal coordinates* 41
- constants poliatòmiques de coordenades normals adimensionals, *polyatomic constants of dimensionless normal coordinates* 41
- constants rotacionals en freqüència, *rotational constants in frequency* 40
- constants rotacionals en nombre d'ona, *rotational constants in wavenumber* 40
- convenció d'Estocolm, *Stockholm convention* 86
- conversió d'unitats, *conversion of units* 135, 137, 139-147, 149, 151, 153, 155, 157
- conversió fotoelectroquímica d'energia, *photoelectrochemical energy conversion* 83
- convolució de funcions, *convolution of functions* 110
- coordenades, *coordinates* 28, 34-36, 41, 43, 45-46, 58
- coordenades cartesianes espacials, *cartesian space coordinates* 28, 195-196
- coordenades cilíndriques, *cylindrical coordinates* 28, 198, 201
- coordenades de vibració, *vibrational coordinates* 41
- coordenades de vibració de simetria, *symmetry vibrational coordinates* 41, 193
- coordenades de vibració internes, *internal vibrational coordinates* 41, 192, 199
- coordenades de vibració normals adimensionals, *dimensionless normal vibrational coordinates* 41, 43
- coordenades de vibració normals ponderades de massa, *mass adjusted normal vibrational coordinates* 41, 192
- coordenades fraccionàries, *fractional coordinates* 58, 196
- coordenades generalitzades, *generalized coordinates* 28, 61, 192

correccions a pressió estàndard, *standard pressure corrections* 88  
 corrent elèctric, *electric current* 31, 187  
 coulomb, *coulomb* 58, 97, 144, 184  
 cristal·lí -ina, *crystalline* 60, 70-71, 78, 183  
 cristall líquid, *liquid crystal* 70-71, 183  
 curie, *curie* 59, 139, 144, 157, 184

## D

d'àrea, *areic* 24, 32, 82, 92, 155-156  
 dalton, *dalton* 38, 63, 101, 142, 184  
 debye, *debye* 42, 55, 58, 62, 86, 145, 184  
 deca-, *deca-* 99, 184  
 deci-, *deci-* 99, 184  
 decibel, *decibel* 104-106  
 defecte inercial, *inertial defect* 40, 198  
 deformació cúbica, *bulk strain* 30, 199  
 deformació de cisallament, *shear strain* 30, 197  
 deformació lineal, *linear strain / relative elongation* 29, 184, 198  
 deformació volúmica, *volume strain* 30, 199  
 degeneració, *degeneracy* 41-42, 61, 184, 186  
 delta de Kronecker, *Kronecker delta* 110, 198  
 densitat, *density* 29, 36, 67, 93, 98, 156-157, 159  
 densitat d'energia, *energy density* 52, 98, 157, 201  
 densitat d'energia radiant, *radiant energy density* 50, 52, 195  
 densitat d'energia radiant espectral, *spectral radiant energy density* 50, 52  
 densitat d'energia radiant espectral en termes de freqüència, *spectral radiant energy density in terms of frequency* 50  
 densitat d'energia radiant espectral en termes de longitud d'ona, *spectral radiant energy density in terms of wavelength* 50  
 densitat d'energia radiant espectral en termes de nombre d'ona, *spectral radiant energy density in terms of wavenumber* 50  
 densitat d'estats, *density of states* 58, 61, 190, 201  
 densitat de càrrega, *charge density* 24, 30, 33, 39, 59-60, 84, 99, 145, 192, 201  
 densitat de càrrega elèctrica, *electric charge density* 99  
 densitat de càrrega electrònica, *charge density of electrons* 33, 59  
 densitat de càrrega [superficial], *[surface] charge density* 24, 30, 84, 201  
 densitat de col·lisions, *collision density / collision number* 81, 196  
 densitat de corrent de probabilitat, *probability current density / probability flux* 33, 193

- densitat de corrent [elèctric], *[electric] current density* 31, 33, 84, 99, 156, 187  
 densitat de flux de calor, *heat flux density* 98  
 densitat de flux magnètic, *magnetic flux density / magnetic induction* 31, 93, 97, 102, 146, 152, 183, 186  
 densitat de probabilitat, *probability density* 32, 34, 191  
 densitat en massa, *mass density / mass concentration* 24, 29, 54, 62-63, 98, 103, 197, 201  
 densitat en nombre, *number density* 59, 94, 190  
 densitat en nombre d'entitats, *number density of entities* 61, 63  
 densitat en nombre de donadors, *number density of donors* 59, 191  
 densitat en quantitat de substància, *amount density* 144, 147  
 densitat [espectral] de modes de vibració, *[spectral] density of vibrational modes* 58, 186, 190  
 densitat màssica, *mass density / mass concentration* 24, 29, 54, 62-63, 98, 103, 197, 201  
 densitat relativa, *relative density* 29, 184  
 densitat superficial, *surface density* 29, 201  
 desdoblament *K*, *K-doubling* 45  
 desdoblament *l*, *l-doubling* 45  
 desdoblament *A*, *A-doubling* 45  
 desplaçament, *displacement* 31, 41, 49, 58, 76, 146, 152, 184  
 desplaçament elèctric, *electric displacement* 31, 146, 152, 184  
 desplaçament químic, *chemical shift /  $\delta$  scale* 41, 198, 201  
 deuteró, *deuteron* 65, 118, 184  
 dia, *day* 100, 142, 147, 184  
 diàmetre, *diameter* 28, 81, 114, 161, 184  
 diàmetre de col·lisió, *collision diameter* 81, 184  
 diferència de potencial, *potential difference* 30, 32, 84, 85-87, 185, 195  
 diferència de potencial de Galvani, *Galvani potential difference* 84  
 diferència de potencial de Volta, *Volta potential difference* 84  
 diferència de potencial elèctric, *electric potential difference* 30, 86-87, 185, 195  
 diferència de potencial elèctric (d'una pila galvànica), *electric potential difference (of a galvanic cell)* 84, 86  
 difusivitat tèrmica, *thermal diffusivity* 92, 181  
 dilució, *dilution* 71, 75-76, 184  
 dilució infinita, *infinite dilution* 71, 76, 203  
 dimensió *u*, *dimension one* 102  
 dina, *dyne* 142, 150, 152, 184  
 dipol, *dipole* 32, 42, 52, 55, 117, 124, 155-156  
 direccions en cristalls, *crystal directions* 60  
 dissolució *Vegeu solució*  
 distància, *distance* 28, 42, 59, 82, 153, 184

distància d'equilibri, *equilibrium distance* 41, 43  
 distància d'estructura de substitució, *substitution structure distance* 41  
 distància efectiva, *effective distance* 43  
 distància en l'estat fonamental, *ground state distance* 41  
 distància mitjana en el punt zero, *zero-point average distance* 41  
 distàncies interatòmiques, *interatomic distances* 41, 192  
 divergència d'un camp vectorial, *divergence of a vector field* 111  
 dosi absorbida (de radiació), *absorbed dose (of radiation)* 97, 144  
 dosi equivalent (de radiació), *equivalent dose (of radiation)* 97, 144  
 dosi equivalent, *equivalent dose* 97, 144

## E

eficiències, *efficiencies* 102  
 electró, *electron* 34-35, 37, 39, 43, 46, 59, 60, 65, 69, 85, 102, 113-114, 117-118, 142, 153, 162-165, 167, 169, 185, 189, 200  
 electró-volt, *electronvolt* 101, 137, 142, 185  
 electròlit uni-univalent, *uni-univalent electrolyte* 89  
 electronegativitat, *electronegativity* 37-39, 202  
 electroquímica, *electrochemistry* 69, 83-84  
 electroquímica dels semiconductors, *semiconductor electrochemistry* 83  
 element d'integració, *integration element* 33  
 element de la matriu de densitat, *density matrix element* 36  
 element de la matriu de superposició, *overlap matrix element* 36  
 element de matriu d'un operador, *matrix element of operator* 33  
 element de matriu de l'operador de Fock, *matrix element of the Fock operator* 36  
 elements [químics], *elements / chemical elements* 65, 78, 119-134, 181  
 elongació, *elongation* 29  
 elongació relativa, *relative elongation / linear strain* 29, 184, 198  
 emissió, *emission* 48, 50, 52-55, 163-165, 168  
 emissió espontània, *spontaneous emission* 50  
 emissió estimulada, *stimulated emission* 50, 164-165, 168  
 emissió induïda, *induced emission* 50, 53-55  
 emitància, *emittance* 51-52, 198  
 energia, *energy* 28-30, 96-98, 101-102, 142, 185, tercera pàgina de la guarda posterior  
 energia cinètica, *kinetic energy* 22, 29, 32, 49, 188, 194  
 energia d'activació, *activation energy* 81-82  
 energia d'activació (d'Arrhenius), *(Arrhenius) activation energy* 81-82  
 energia d'interacció quadrupolar, *quadrupole interaction energy* 39, 202  
 energia d'ionització, *ionization energy* 37, 49, 59, 153, 159  
 energia d'ionització de l'acceptor, *acceptor ionization energy* 59



- energia d'ionització del donador, *donor ionization energy* 59
- energia de Coulomb, *coulomb energy* 58
- energia de desintegració, *disintegration energy* 38, 192
- energia de dissociació, *dissociation energy* 37, 184
- energia de dissociació des de l'estat fonamental, *dissociation energy from the ground state* 37
- energia de dissociació des del mínim potencial, *dissociation energy from the potential minimum* 37
- energia de Fermi, *Fermi energy* 59
- energia de Gibbs, *Gibbs energy* 23, 72-73, 81, 186
- energia de Gibbs estàndard d'activació, *standard Gibbs energy of activation* 81
- energia de Gibbs estàndard de reacció, *standard reaction Gibbs energy* 73
- energia de Gibbs molar parcial, *partial molar Gibbs energy* 23, 72
- energia de Hartree, *Hartree energy* 37, 114, 137, 185
- energia de Helmholtz, *Helmholtz energy* 28, 72, 74, 91, 182
- energia de l'orbital, *orbital energy* 34-35, 198
- energia de l'orbital monoelèctric, *one-electron orbital energy* 35
- energia electrònica total, *total electronic energy* 35-36
- energia específica, *specific energy* 98
- energia interbanda, *gap energy* 59
- energia interna, *internal energy* 71, 81, 195
- energia interna estàndard d'activació, *standard internal energy of activation* 81
- energia llindar, *threshold energy* 82
- energia molar, *molar energy* 98, [tercera pàgina de la guarda posterior](#)
- energia potencial, *potential energy* 29, 181, 195, 202
- energia radiant, *radiant energy* 50, 52, 192, 195
- energia radiant per unitat de temps, *radiant energy per time / radiant power* 50
- entalpia, *enthalpy* 22, 24, 71, 73-74, 76-78, 81, 187
- entalpia estàndard d'activació, *standard enthalpy of activation* 81
- entalpia estàndard de reacció, *standard reaction enthalpy* 73
- entalpia molar parcial estàndard, *standard partial molar enthalpy* 73
- entitat, *entity* 24, 62-64, 67, 70, 86
- entitats elementals, *elementary entities* 69, 96
- entropia, *entropy* 71, 92, 98, 143, 169, 184-185, 193
- entropia específica, *specific entropy* 98
- entropia estàndard d'activació, *standard entropy of activation* 81
- entropia estàndard de reacció, *standard reaction entropy* 73
- entropia molar, *molar entropy* 71, 73, 77, 98, 143
- entropia molar parcial estàndard, *standard partial molar entropy* 73
- EPR ('ressonància paramagnètica electrònica'), *EPR ('electron paramagnetic resonance')* 42, 162



- equació de reacció, *reaction equation* 64, 68, 78, 82  
equació química, *chemical equation* 64  
equació química d'una reacció directa neta, *net forward reaction chemical equation* 69  
equació química d'una reacció elemental, *elementary reaction chemical equation* 69  
equació química d'una reacció en equilibri, *equilibrium reaction chemical equation* 69  
equació química estequiomètrica, *stoichiometric chemical equation* 64, 69, 77  
equació química general, *general chemical equation* 64  
equacions de la teoria electromagnètica, *equations of electromagnetic theory* 149-150, 155-157  
equacions de Maxwell, *Maxwell equations* 157  
erg, *erg* 140, 142-143, 145-146, 151, 153, 185  
escala  $\delta$ , *scale / chemical shift* 41, 198  
esforç, *stress* 97, 191  
espai, *space* 28  
espaiat reticular, *lattice plane spacing* 58, 184  
espècie adsorbida, *adsorbed species* 71  
espècies de simetria, *symmetry species* 45, 47, 108  
espectres, *spectra* 43, 49, 57  
espectres en el visible, *visible spectra* 49  
espectres en l'infraroig, *infrared spectra* 57  
espectres en l'ultraviolat, *ultraviolet spectra* 49  
espectres fotoelectrònics, *photoelectron spectra* 49  
espectres Raman, *Raman spectra* 49  
espectroscòpia, *spectroscopy* 30, 37, 39, 40-49, 53, 160-170  
espectroscòpia d'absorció atòmica, *atomic absorption spectroscopy* 103, 160  
espectroscòpia òptica, *optical spectroscopy* 53  
espín-orbital molecular, *molecular spin-orbital* 34  
ESR ('ressonància d'espín electrònic'), *ESR ('electron spin resonance')* 42, 49, 162  
estàndard, *standard* 74-76, 203  
estat de transició, *transition state* 76, 83, 169, 203  
estat sòlid, *solid state* 57  
estats atòmics, *atomic states* 46  
estats d'agregació, *states of aggregation* 70, 181  
estats estàndard, *standard states* 78  
estats excitats, *excited states* 47  
estats moleculars, *molecular states* 47  
estats vibracionals, *vibrational states* 48  
estereoradian, *steradian* 28, 97, 193  
*étendue* ('rendiment'), *etendue ('throughput')* 51-52, 184

evaporació, *evaporation* 75  
 exa-, *exa-* 99, 185  
 excés de massa, *mass excess* 37, 198  
 excés superficial, *surface excess* 90-91  
 excitància radiant, *radiant exitance* 50, 190  
 exposició (raigs X i  $\gamma$ ), *exposure (X and  $\gamma$  rays)* 99  
 extensió, *extent of reaction / advancement* 63, 77, 200  
 extensiu -iva, *extensive* 23-24, 74, 76  
 extinció, *extinction* 53

## F

factor d'absorció, *absorption factor / absorptance* 30, 51, 196  
 factor d'estructura, *structure factor* 58, 186  
 factor de compressibilitat, *compressibility factor / compression factor* 72, 196  
 factor de compressió, *compression factor / compressibility factor* 72, 196  
 factor de Debye-Waller, *Debye-Waller factor* 58, 183-184  
 factor de dispersió atòmica, *atomic scattering factor* 58, 185  
 factor de dissipació acústica, *acoustic dissipation factor* 30, 198  
 factor de freqüència, *frequency factor / pre-exponential factor* 81, 182  
 factor de freqüència de col·lisions, *collision frequency factor* 81, 196  
 factor de fricció, *friction factor* 30, 185, 199  
 factor de qualitat, *quality factor* 51, 192  
 factor de reflexió, *reflection factor* 51  
 factor de reflexió acústica, *acoustic reflection factor* 30, 201  
 factor de transmissió, *transmission factor / transmittance* 30, 51, 194, 201  
 factor *g*, *g-factor* 37, 42-43, 114, 186  
 factor *g* de Landé de l'electró lliure, *Landé g-factor for free electron* 114  
 factor *g* nuclear, *nuclear g-factor* 38  
 factor preexponencial, *pre-exponential factor / frequency factor* 81-82, 182  
 factorial, *factorial* 109  
 factors acústics, *acoustic factors* 30  
 factors de conversió, *conversion factors* 57, 100-101, 135, 138, 140-148, 153  
 factors de conversió d'energia, *energy conversion factors* 101, pàgina tercera de  
 la guarda posterior  
 factors de conversió de pressió, *pressure conversion factors* 101, pàgina segona  
 de la guarda posterior  
 farad, *farad* 97, 186  
 fase condensada, *condensed phase* 70, 183  
 fase fluida, *fluid phase* 70, 185

- fase gasosa, *gas phase* 57, 78  
fase pura, *pure phase* 79  
FEM d'una cel·la, *emf of the cell / potential of the electrochemical cell reaction* 84  
FEM estàndard, *standard emf / standard potential of the electrochemical cell reaction* 84  
FEM ('força electromotriu'), *emf ('electromotive force')* 84-89, 162-163  
femto-, *femto-* 99, 185  
fermi, *fermi* 59, 120, 141, 185  
finor, *finesse* 51, 185  
fluència, *fluence* 50, 52, 186, 187  
fluïdesa, *fluidity* 30, 202  
flux, *flux* 92-94, 188  
flux d'energia del so, *sound energy flux* 30, 191  
flux de calor, *heat flux* 92, 98  
flux de probabilitat, *probability flux / probability current density* 33, 82, 193  
flux elèctric, *electric flux* 31, 202  
flux lluminós, *luminous flux* 97  
flux magnètic, *magnetic flux* 31, 93, 97, 146, 152, 202  
flux radiant, *radiant flux* 50, 97  
flux radiant emès, *emitted radiant flux* 50  
flux radiant rebut, *radiant flux received* 50  
força, *force* 29, 97, 101, 185  
força d'un oscil·lador, *oscillator strength* 53  
força electromotriu, *electromotive force* 30, 84-85, 87, 97, 163, 185  
força iònica, *ionic strength* 74, 83, 85-86, 187  
força iònica en concentracions, *ionic strength concentration basis* 74, 83  
força iònica en molalitats, *ionic strength molality basis* 74, 83  
força termoelectrònica, *thermoelectric force* 58, 185  
forma monomèrica, *monomeric form* 71, 190  
forma polimèrica, *polymeric form* 71, 191  
fórmula desenvolupada, *displayed formula* 68  
fórmula empírica, *empirical formula* 68  
fórmula estereoquímica, *stereochemical formula* 68  
fórmula estructural, *structural formula* 68  
fórmula molecular, *molecular formula* 68  
fórmules químiques, *chemical formulae* 67-68  
fotó, *photon* 52, 65, 118, 197  
fracció en massa, *mass fraction* 62, 102-104, 195  
fracció en nombre, *number fraction / mole fraction / amount fraction* 62, 102, 195  
fracció en quantitat, *amount fraction / mole fraction / number fraction* 62, 195  
fracció en volum, *volume fraction* 62, 102-104, 202

- fracció molar, *mole fraction / amount fraction / number fraction* 22, 62, 79, 93, 102-103, 139, 196
- fraccions, *fractions* 55, 68, 73-74, 102, 123
- franklin, *franklin* 140, 144, 150-151, 186
- freqüència, *frequency* 28, 42, 49-50, 52-53, 93, 97-98, 135, 185, 200, tercera pàgina de la guarda posterior
- freqüència angular, *angular frequency / circular frequency / pulsatance* 28-29, 38, 50, 58, 104, 202
- freqüència angular de Debye, *Debye angular frequency* 58
- freqüència angular de Larmor, *Larmor angular frequency / Larmor frequency / Larmor circular frequency* 38
- freqüència circular, *circular frequency / angular frequency / pulsatance* 28, 202
- freqüència circular de Larmor, *Larmor circular frequency / Larmor angular frequency / Larmor frequency* 39
- freqüència de col·lisions, *collisional frequency* 81, 196
- freqüència de la transició, *transition frequency* 40
- freqüència de Larmor, *Larmor angular frequency / Larmor frequency / Larmor circular frequency* 38
- freqüència de ressonància, *resonance frequency* 43, 114
- freqüència de ressonància del protó per unitat de camp en H<sub>2</sub>O, *proton resonance frequency per field in H<sub>2</sub>O* 114
- freqüència radial, *radial frequency* 98
- fugacitat, *fugacity* 73, 75, 185
- funció d'estat, *state function* 32
- funció d'ona, *wavefunction* 32-34, 45, 47, 60, 202
- funció d'ona d'espín, *spin wave function* 33, 197
- funció d'ona hidrogenoide, *hydrogen-like wavefunction* 32
- funció d'ona total, *total wavefunction* 34
- funció de base d'orbitals atòmics, *atomic orbital basis function* 33, 36
- funció de Bloch, *Bloch function* 59, 194
- funció de distribució d'un component de la velocitat, *velocity distribution function* 61, 185
- funció de distribució de la velocitat, *speed distribution function* 61, 186
- funció de Gibbs, *Gibbs function* 72
- funció de Hamilton, *Hamilton function* 29, 187
- funció de Heaviside, *Heaviside function* 198
- funció de Helmholtz, *Helmholtz function* 72
- funció de Lagrange, *Lagrange function* 29, 189
- funció de Massieu, *Massieu function* 72, 188
- funció de partició, *partition function* 55, 61, 192, 196, 203
- funció de Planck, *Planck function* 72, 196

funció de treball, *work function* 58, 202  
 funció delta de Dirac, *Dirac delta function* 110, 198  
 funció esglaonada unitària, *unit step function* 110, 198  
 funció gamma, *gamma function* 110, 198  
 funció harmònica esfèrica, *spherical harmonic function* 32, 196  
 funcions hiperbòliques, *hyperbolic functions* 109  
 funcions logarítmiques, *logarithmic functions* 109-110  
 funcions matemàtiques, *mathematical functions* 108-109  
 funcions trigonomètriques, *trigonometric functions* 109  
 fusió, *fusion / melting* 75, 166, 185

## G

gal, *gal / galileo* 141, 186  
 galileu, *galileo / gal* 141, 186  
 galó (EUA), *gallon (US)* 141, 186  
 galó (RU), *gallon (UK)* 141  
 gamma, *gamma* 110, 142, 178, 197  
 gas, *gas* 54, 56, 63, 70-71, 74-75, 78, 94, 113, 144, 147, 186, 192, 196  
 gas ideal, *ideal gas* 56, 79, 113  
 Gau, *Gau* 144-147  
 gauss, *gauss* 146, 186  
 geometria molecular, *molecular geometry* 43  
 giga-, *giga-* 99, 186  
 giromagnètic -a, *gyromagnetic* 37, 114  
 gra, *grain* 142, 186  
 gradient d'un camp escalar, *gradient of a scalar field* 111  
 gradient de camp elèctric, *electric field gradient* 38, 145, 192  
 gram, *gram* 141, 186  
 gran funció de partició, *grand partition function / grand canonical ensemble* 61, 200  
 grau Celsius, *degree Celsius* 97-98, 184  
 grau centesimal, *grade* 144  
 grau (d'arc), *degree (of arc)* 101, 144, 203  
 grau d'ionització, *degree of ionization* 64  
 grau de dissociació, *degree of dissociation* 64  
 grau de reacció, *degree of reaction* 63, 197  
 grau Fahrenheit, *degree Fahrenheit* 147, 186  
 grau Rankine, *degree Rankine* 143, 193  
 gray, *gray* 97-98, 144, 186  
 gruix, *thickness* 28, 90, 184, 198

gruix d'una capa, *thickness layer* 90, 194, 201  
 gruix d'una pel·lícula, *film thickness* 90, 187, 194  
 gruix de la capa de difusió, *thickness of diffusion layer* 84  
 gruix invers de la doble capa, *reciprocal thickness of double layer* 90, 199  
 gruixària, *thickness* 28  
 GTO ('orbitals de tipus gaussià'), *GTO ('gaussian type orbitals')* 36, 163

## H

hamiltonià del centre (*core*) d'un electró, *core hamiltonian of a single electron* 34  
 harmònics esfèrics, *spherical harmonic function* 32, 196  
 hartree, *hartree* 34-37, 137, 142, 163, 167, 185  
 hectàrea, *hectare* 141, 187  
 hecto-, *hecto-* 99, 187  
 heliò, *helion* 65, 118, 187  
 henry, *henry* 73, 75, 97, 187  
 hertz, *hertz* 23, 97, 187  
 hiperpolaritzabilitat, *hyper-polarizability* 38, 197  
 hipersusceptibilitat, *hyper-susceptibility* 31  
 HMO ('orbitals moleculars de Hückel'), *HMO ('Hückel molecular orbitals')*  
 33-34, 163  
 hora, *hour* 100, 135, 142, 159, 187

## I

iarda, *yard* 141, 196  
 ideal, *ideal* 76, 187  
 il·luminància, *illuminance* 97  
 imantació, *magnetization* 31, 146, 152, 190  
 immersió, *immersion* 76, 187  
 impedància, *impedance* 31, 196  
 impedància complexa, *complex impedance* 31  
 incertesa (d'un mesurament), *uncertainties (of measurement)* 80, 107  
 incertesa estàndard, *standard uncertainty* 108  
 incertesa relativa, *relative uncertainties* 102-103  
 increment finit, *finite change* 110, 198  
 increment infinitesimal, *infinitesimal change* 110, 198  
 índex d'absorció, *absorption index* 51, 188  
 índex de refracció, *refractive index* 50-51, 190

- índex de refracció complex, *complex refractive index* 51
- índexs de Miller, *Miller indices* 60, 187, 189
- inducció magnètica, *magnetic induction / magnetic flux density* 31, 43, 49, 97, 102, 183
- inductància, *inductance* 31, 97, 189
- inductància mútua, *mutual inductance* 31, 190
- integral coulombiana, *coulomb integral* 33-35, 188, 197
- integral de bescanvi, *exchange integral* 35, 188
- integral de ressonància, *resonance integral* 33, 197
- integral de superposició, *overlap integral* 33, 193
- integrals bielectròniques, *two-electron integrals* 35-36
- integrals de repulsió bielectròniques, *two-electron repulsion integrals* 35
- integrals monoelectròniques, *one-electron integrals* 35-36
- intensitat, *intensity* 50, 52
- intensitat d'absorció, *absorption intensity* 54-55, 57, 182, 193, 198
- intensitat de camp elèctric, *electric field strength* 31, 86, 99, 102, 145, 185
- intensitat de camp magnètic, *magnetic field strength* 31, 99, 146, 187
- intensitat de corrent elèctric, *electric current* 21, 31, 84, 95, 97, 102, 144, 148-149, 151-152, 183, 187
- intensitat [de la banda] d'absorció, *absorption band intensity* 43, 53-57, 182, 193
- intensitat [de la ratlla] d'absorció, *absorption band intensity* 57
- intensitat espectral, *spectral intensity / spectral irradiance* 50, 53-54, 57
- intensitat fotònica, *photon intensity* 52
- intensitat integrada d'absorció, *integrated absorption intensity* 51, 53, 56
- intensitat lluminosa, *luminous intensity* 21, 52, 95-97, 187
- intensitat radiant, *radiant intensity* 50, 52, 96, 187
- intensiu -iva, *intensive* 23
- interval de temps característic, *characteristic time interval / relaxation time / time constant* 28, 194, 201
- interval espectral lliure, *free spectral range* 51, 53, 163
- irracional, *irrational* (vegeu *no racionalitzat*) 148
- irradiància, *irradiance* 50, 52, 98, 185
- irradiància espectral, *spectral irradiance / spectral intensity* 50
- ISO/TC 12 ('Comitè Tècnic 12 de l'Organització Internacional de Normalització'), *ISO/TC 12 ('Technical Committee 12 of the International Organization for Standardization')* 15
- isòbars, *isobars* 66
- isòtops, *isotopes* 43, 66, 123
- IUPAP ('Unió Internacional de Física Pura i Aplicada'), *IUPAP ('International Union of Pure and Applied Physics')* 15-16, 28-30, 32, 37, 40, 49, 57, 61-62, 71, 92

## J

joule, *joule* 23, 72, 97, 142, 188

## K

kelvin, *kelvin* 95-98, 143, 189

kilo-, *kilo-* 99, 188

kilogram, *kilogram* 95-97, 141-142, 165, 188

kilogram-força, *kilogram-force* 142, 188

## L

lambda, *lambda* 141, 180, 199

langmuir, *langmuir* 94, 189

líquid, *liquid* 32, 42-43, 54, 70-71, 75, 79, 163, 189

litre, *litre* 23, 101, 141-142, 189

lleï de Henry, *Henry's law* 75

lliura, *pound* 142, 189

lliura per polzada quadrada, *pound per square inch* 143, 191

logaritme neperià de 10, *natural logarithm of 10* 114

longitud, *length* 28, 101, 141, 189

longitud d'arc, *length of arc* 28, 193

longitud d'ona, *wavelength* 19, 42, 49-50, 52-54, 136, 199

longitud de Debye, *Debye length* 86

longitud de difusió, *diffusion length* 59

longitud de la cel·la unitat, *unit cell length* 57, 181-183

longitud del dipol, *dipole length* 42, 145

longitud inversa de la cel·la unitat, *reciprocal unit cell length* 57

longitudinal, *lineic* 24, 38, 41, 43

lumen, *lumen* 97, 189

luminància, *luminance* 99

lux, *lux* 97, 189

## M

magnetisme, *magnetism* 30

magnetitzabilitat, *magnetizability* 37, 146, 152, 200



- magnetó de Bohr, *Bohr magneton* 37, 102, 114, 139, 146, 148, 160, 200
- magnetó nuclear, *nuclear magneton* 37, 114, 146, 200
- magnitud d'excés, *excess quantity* 76, 185
- magnitud específica, *specific quantity* 24, 72
- magnitud física, *physical quantity* 19-22, 34, 69, 95, 97-102, 135, 140, 152, 154
- magnitud física extensiva, *extensive physical quantity* 23
- magnitud física intensiva, *intensive physical quantity* 23
- magnitud molar, *molar quantity* 24, 72, 76
- magnitud molar parcial, *partial molar quantity* 72
- magnituds adimensionals, *dimensionless quantities* 16, 22, 27, 93, 102, 154
- magnituds estàndard de reacció, *standard reaction quantities* 77
- magnituds físiques de base, *base physical quantities* 21
- magnituds físiques derivades, *derived physical quantities* 21
- magnituds fotòniques, *photon quantities* 52
- magnituds lluminoses, *luminous quantities* 52
- magnituds logarítmiques, *logarithmic quantities* 104
- magnituds radiants, *radiant quantities* 50-52
- magnituds tensorials, *tensor quantities* 108
- magnituds termodinàmiques estàndard, *standard thermodynamic quantities* 74-75, 78-80
- massa, *mass* 29-30, 100-102, 141-142, 189
- massa atòmica, *atomic mass / mass of atom* 37-38, 62-63, 101, 113, 117, 119-134, 142, 169, 189, 194
- massa atòmica relativa, *relative atomic mass / atomic weight* 62-63, 119-122, 182
- massa d'una entitat, *mass of entity* 62
- massa de l'àtom, *mass of atom / atomic mass* 37, 62
- massa de l'electró, *electron mass* 142
- massa de l'electró en repòs, *electron rest mass* 37, 102, 113, 153, 189
- massa de les partícules en repòs, *rest mass of particles* 118
- massa del neutró en repòs, *neutron rest mass* 113, 189
- massa del protó en repòs, *proton rest mass* 113, 189
- massa eficaç, *effective mass* 59
- massa en repòs, *rest mass* 118
- massa molar, *molar mass* 62-63, 70, 90, 119, 139, 190
- massa molar mitjana, *average molar mass / mean molar mass* 63, 90
- massa molar mitjana de Z, *Z-average molar mass* 90
- massa molar mitjana en massa, *mass average molar mass* 90
- massa molar mitjana en nombre, *number average molar mass* 90
- massa molar relativa, *relative molar mass* 62-63
- massa molecular, *molecular mass* 62-63, 68
- massa molecular relativa, *relative molecular mass* 62-63, 190

- massa reduïda, *reduced mass* 29, 82, 200  
 masses atòmiques dels núclids, *atomic masses of nuclides* 123-134  
 màssic -a, *massic* 24, 29, 37, 66-67, 103  
 matriu de conservació, *conservation matrix* 64  
 matriu de densitat, *density matrix* 36, 191  
 matriu de dispersió, *scattering matrix* 81-82, 193  
 matriu de les fórmules, *formula matrix* 64  
 matrius, *matrices* 23, 108, 111  
 maxwell, *maxwell* 146, 157, 190  
 mecànica, *mechanics* 16, 29, 32, 165  
 mecànica clàssica, *classical mechanics* 29  
 mecànica quàntica, *quantum mechanics* 16, 32  
 mega-, *mega-* 99, 190  
 mescla, *mixture* 63, 66, 75, 78-79, 189  
 mescla de fluids, *mixing of fluids* 75  
 metre, *metre* 19, 23, 95-97, 141, 165, 189  
 metre cúbic, *cubic metre* 141  
 metre quadrat, *square metre* 141  
 micra, *micron* 141, 200  
 micro-, *micro-* 99, 200  
 micròmetre, *micron* 141, 200  
 milla, *mile* 141, 189  
 milla nàutica, *nautical mile* 141  
 mil·li-, *milli-* 99, 189  
 mil·límetre de mercuri, *millimetre of mercury* 143, 189, segona pàgina de la  
 guarda posterior  
 mil·limicra, *millimicron* 141  
 minut, *minute* 100-101, 142, 144, 189, 203  
 minut (d'arc), *minute (of arc)* 101, 144  
 mixió de fluids, *mixing of fluids* 75  
 mobilitat, *mobility* 59, 85, 200  
 mobilitat elèctrica, *electric mobility* 85, 194, 200  
 mòdul cúbic, *bulk modulus / compression modulus* 30, 188  
 mòdul d'elasticitat, *modulus of elasticity* 30, 185  
 mòdul de cisallament, *shear modulus* 30, 186  
 mòdul de compressió, *compression modulus / bulk modulus* 30, 188  
 mòdul de Young, *Young's modulus* 30  
 mol, *mole* 95-100, 190  
 molalitat, *molarity* 64, 73-75, 79, 83, 85, 89, 138, 182, 189  
 molalitat (d'un solut), *molarity (of a solute)* 63-64  
 molalitat estàndard, *standard molarity* 79

- molalitat iònica mitjana, *mean ionic molality* 83
- molar, *molar* 22-24, 190
- molaritat, *molarity* 64
- moment, *momentum* 29, 191
- moment angular, *angular momentum / action* 29, 33-34, 37, 39-40, 43-44, 46, 117, 124, 143, 153, 187, 189-190, 200
- moment angular d'espín, *spin angular momentum* 34, 187, 193
- moment angular d'un orbital electrònic, *electron orbital angular momentum* 44, 189
- moment angular d'un orbital nuclear, *nuclear orbital angular momentum* 44, 192
- moment d'inèrcia, *moment of inertia* 29, 40, 188
- moment d'una força, *moment of a force / torque* 29, 98, 190, 194
- moment dipolar de transició, *transition dipole moment* 41, 52, 190, 192
- moment dipolar de transició (d'una molècula), *transition dipole moment (of a molecule)* 41
- moment dipolar elèctric, *electric dipole moment* 31-32, 55, 102, 145, 152, 155, 184, 191, 199
- moment dipolar elèctric (d'una molècula), *electric dipole moment (of a molecule)* 38, 41, 42
- moment dipolar magnètic, *magnetic dipole moment* 31, 37, 102, 124, 139, 146, 152, 189, 200
- moment [dipolar] magnètic d'una molècula, *molecular magnetic [dipole] moment* 37-39, 139
- moment dipolar magnètic per volum, *magnetic dipole moment per volume* 31
- moment dipolar per volum, *dipole moment per volume* 31
- moment magnètic de l'electró, *electron magnetic moment* 114, 118, 200
- moment magnètic del protó, *proton magnetic moment* 114, 200
- moment quadrupolar, *quadrupole moment* 38-39, 124, 145, 148, 192, 199
- moment quadrupolar d'un nucli, *quadrupole moment of a nucleus* 38
- moment quadrupolar d'una molècula, *quadrupole moment of a molecule* 38
- moment quadrupolar elèctric, *electric quadrupole moment* 124, 145
- moments d'inèrcia principals, *principal moments of inertia* 40
- moments magnètics nuclears, *nuclear magnetic moments* 124-134
- muó, *muon* 65, 118, 200
- muoni, *muonium* 117

## N

- nano-, *nano-* 99, 190
- neper, *neper* 104-106, 190

- neutrí, *neutrino* 118, 200  
neutró, *neutron* 38-39, 65, 113, 118, 190  
newton, *newton* 97, 142, 190  
nivells, *levels* 45, 48, 55, 96, 105  
nivells d'amplitud, *amplitude levels* 105  
nivells de camp, *field levels* 105-106  
nivells de potència, *power levels* 105-106  
no racionalitzat -ada, *irrational / non-rational / unrationalized* 139-140, 146-151, 155-157  
nombre, *number* 21  
nombre (acumulatiu) d'estats, (*cumulative*) *number of states* 61, 190, 195  
nombre atòmic, *atomic number / proton number* 35, 37, 65-67, 117, 123, 196  
nombre d'Alfvén, *Alfvén number* 93, 182  
nombre d'àtoms per entitat, *number of atoms per entity* 67  
nombre d'entitats, *number of entities* 21, 24, 61-62, 69, 190  
nombre d'estats, *number of states* 61, 190, 195  
nombre d'Euler, *Euler number* 93, 185  
nombre d'ona, *wavenumber* 40, 42-43, 49, 50, 52, 53, 56, 58, 98, 135, 137, 200, 201, 202, *tercera pàgina de la guarda posterior*  
nombre d'ona angular de Debye, *Debye angular wavenumber* 58  
nombre d'ona de la transició, *transition wavenumber* 40  
nombre d'ona de vibració harmònica, *harmonic vibration wavenumber* 40, 202  
nombre d'ona en el buit, *wavenumber in vacuum* 50, 52, 200  
nombre d'ona (en un medi), *wavenumber (in a medium)* 50  
nombre d'oxidació, *oxidation number* 67  
nombre de càrrega, *charge number* 35, 66-67, 69, 83, 118, 190, 196  
nombre de càrrega d'un ió, *charge number of an ion* 66, 83, 118  
nombre de càrrega de la reacció d'una cel·la electroquímica, *charge number of electrochemical cell reaction* 69, 83, 200  
nombre de col·lisions, *collision number / collision density* 81, 196  
nombre de Cowling, *Cowling number* 93, 184  
nombre de Fourier, *Fourier number* 93, 186  
nombre de Fourier per a transferència de matèria, *Fourier number for mass transfer* 93  
nombre de Froude, *Froude number* 93, 186  
nombre de Grashof, *Grashof number* 93, 186  
nombre de Grashof per a transferència de matèria, *Grashof number for mass transfer* 93  
nombre de Hartmann, *Hartmann number* 93, 187  
nombre de Knudsen, *Knudsen number* 93, 188  
nombre de Lewis, *Lewis number* 93, 189

- nombre de Mach, *Mach number* 93, 190  
 nombre de mols, *number of moles* 21, 69  
 nombre de neutrons, *neutron number* 37, 190  
 nombre de nucleons, *nucleon number / mass number* 37, 66, 182  
 nombre de Nusselt, *Nusselt number* 93, 190  
 nombre de Nusselt per a transferència de matèria, *Nusselt number for mass transfer* 93  
 nombre de Péclet, *Péclet number* 93, 191  
 nombre de Péclet per a transferència de matèria, *Péclet number for mass transfer* 93  
 nombre de Prandtl, *Prandtl number* 93, 191  
 nombre de protons, *proton number / atomic number* 37, 66, 123, 196  
 nombre de Rayleigh, *Rayleigh number* 93, 193  
 nombre de Reynolds, *Reynolds number* 22, 93, 193  
 nombre de Reynolds magnètic, *magnetic Reynolds number* 93, 193  
 nombre de Schmidt, *Schmidt number* 93, 193  
 nombre de Sherwood, *Sherwood number* 94, 193  
 nombre de simetria, *symmetry number* 61, 193, 201  
 nombre de Stanton, *Stanton number* 93, 194  
 nombre de Stanton per a transferència de matèria, *Stanton number for mass transfer* 93  
 nombre de Strouhal, *Strouhal number* 93, 194  
 nombre de transport, *transport number* 85, 194  
 nombre de Weber, *Weber number* 93, 195  
 nombre màssic, *mass number / nucleon number* 37, 66, 182  
 nombre quàntic, *quantum number* 37, 43-44, 46, 48-49, 124  
 nombre quàntic d'espín nuclear, *nuclear spin quantum number* 124  
 nombre quàntic de moment angular, *angular momentum quantum number* 40, 43-44, 188-190, 199, 203  
 nombre quàntic principal (de l'àtom de H), *principal (H atom) quantum number* 37, 190  
 nombre quàntic vibracional, *vibrational quantum number* 40, 189, 195  
 nombres, *numbers* 20, 22, 60, 104-105, 107-111, 119, 138, 140, 154  
 nomenclatura de la corrosió, *corrosion nomenclature* 83  
 núclids, *nuclides* 66, 117, 119, 121-123

## O

- oersted, *oersted* 146, 191  
 ohm, *ohm* 97, 145, 203

- ohm internacional [dels] EUA, *US international ohm* 145
- ohm internacional mitjà, *mean international ohm* 145
- operador, *operator* 32-36, 44-46, 52, 110
- operador coulombià, *coulomb operator* 35, 188
- operador d'energia cinètica, *kinetic energy operator* 32
- operador de bescanvi, *exchange operator* 35, 188
- operador de Fock, *Fock operator* 35-36, 185
- operador de moment angular, *angular momentum operator* 33
- operador de quantitat de moviment, *momentum operator* 32
- operador de rotació *n*-ari, *n-fold rotation operator* 46, 184
- operador de simetria d'identitat, *identity symmetry operator* 45, 185
- operador de simetria d'inversió, *inversion symmetry operator* 46
- operador de simetria d'inversió fixa a l'espai, *space-fixed inversion symmetry operator* 45, 185
- operador de simetria de permutació, *permutation symmetry operator* 45, 191
- operador de simetria de rotació-reflexió, *rotation-reflection symmetry operator* 46, 193
- operador hamiltonià, *hamiltonian operator* 32
- operador laplacià, *Laplacian operator* 111
- operador nabla, *nabla operator* 33, 110
- operadors de simetria, *symmetry operators* 45-46
- operadors lògics, *logical operators* 111
- operadors matemàtics, *mathematical operators* 109
- orbital atòmic, *atomic orbital* 160, 202
- orbital molecular, *molecular orbital* 33-34, 36, 163, 165-166, 202
- orbitals de tipus gaussià, *Gaussian type orbitals* 36
- orbitals de tipus Slater, *Slater type orbitals* 36
- ordre d'enllaç, *bond order* 33-34, 191
- ordre de reacció, *order of reaction* 86, 189-190
- ordre de reflexió, *order of reflection* 58, 190
- ordre global de reacció, *overall order of reaction* 80
- ordre parcial de reacció, *partial order of reaction* 80
- osmol, *osmole* 75

## P

- paràmetre d'apantallament, *shielding parameter* 36
- paràmetre d'asimetria, *asymmetry parameter* 40, 199
- paràmetre d'asimetria de Wang, *Wang asymmetry parameter* 42
- paràmetre d'energia, *energy parameter* 33, 195

- paràmetre d'impacte, *impact parameter* 81-82, 182
- paràmetre de Grüneisen, *Grüneisen parameter* 58, 198
- paràmetre de temperatura inversa, *reciprocal temperature parameter* 61, 197
- paràmetres d'ordre de curt abast, *short range order parameters* 58, 201
- paràmetres d'ordre de llarg abast, *long range order parameters* 58, 193
- parell de forces, *torque / moment of a force* 29, 190, 194
- parsec, *parsec* 141, 191
- part per bilió, *part per trillion* 104, 191
- part per cent, *part per hundred* 104, 191
- part per cent milions, *part per hundred million* 104, 167, 191
- part per mil, *part per thousand* 104, 191
- part per mil bilions, *part per quadrillion* 104, 191
- part per mil milions, *part per billion* 104, 191
- part per milió, *part per million* 102-103, 167, 191
- partícula alfa, *alpha-particle* 65, 118, 197
- partícula beta, *beta-particle* 118, 197
- pascal, *pascal* 97, 143, 191, segona pàgina de la guarda posterior
- per cent, *percent* 102-104, 123, 203
- per mil, *permille* 104, 203
- període, *period* 28, 38, 80, 119, 194
- període de semidesintegració, *half life* 38, 80, 194
- període de semireacció, *half life* 194
- permeabilitat, *permeability* 22, 31, 93, 99, 152, 200
- permeabilitat del buit, *permeability of vacuum* 31, 113, 148, 200
- permeabilitat relativa, *relative permeability* 22, 31, 152
- permitivitat, *permittivity* 31, 99, 113, 148, 151-152, 198
- permitivitat del buit, *permittivity of vacuum* 31, 113, 148, 198
- permitivitat relativa, *relative permittivity* 31, 151
- pes, *weight* 29, 41, 61-63, 104, 119-122, 166, 186, 191
- pes atòmic, *atomic weight / relative atomic mass* 62-63, 119-122, 182
- pes estadístic, *statistical weight* 41, 61-62, 195, 197, 203
- pes molecular, *molecular weight* 62-63, 166
- pesos atòmics estàndard, *standard atomic weights* 63, 119, 123
- pesos atòmics estàndard dels elements, *standard atomic weights of elements* 119
- peta-, *peta-* 99, 191
- peu, *foot* 27-28, 141, 185
- pH, *pH* 84, 86, 88-89, 191
- pico-, *pico-* 99, 191
- pila, *galvanic cell* 84, 85, 86-87, 88
- pila galvànica *Vegeu pila*
- pió, *pion* 118, 200

- pla de reflexió, *reflection plane* 46, 201  
plans del cristall, *crystal planes* 60  
poder de resolució, *resolving power* 51, 193  
poder rotatori, *rotatory power* 52, 54, 203  
poder rotatori òptic, *optical rotatory power* 52, 54  
poder rotatori òptic específic, *specific optical rotatory power* 52, 54, 203  
poder rotatori òptic molar, *molar optical rotatory power* 52, 54  
poise, *poise* 143, 191  
polaritzabilitat, *polarizability* 38-39, 146, 148, 152  
polaritzabilitat elèctrica d'una molècula, *electric polarizability of a molecule* 38, 196  
polarització, *polarization* 146  
polarització dielèctrica, *dielectric polarization* 31, 191  
polzada, *inch* 141, 143, 187  
positroni, *positronium* 117  
potència, *power* 30, 97, 105-106, 143, 183, 187, 191  
potència col·lectora de llum, *light gathering power* 51-52  
potència radiant, *radiant power / radiant energy per time* 50, 52, 202  
potencial absolut d'elèctrode, *absolute electrode potential* 86  
potencial d'elèctrode, *electrode potential* 88  
potencial de la reacció d'una cel·la electroquímica, *potential of electrochemical cell reaction / emf of the cell* 84  
potencial del vector magnètic, *magnetic vector potential* 32, 182  
potencial elèctric, *electric potential* 30, 39, 84, 86-87, 97, 145, 148, 152, 195, 202  
potencial elèctric de superfície, *surface electric potential* 84, 202  
potencial elèctric extern, *outer electric potential* 84, 202  
potencial elèctric intern, *inner electric potential* 84, 202  
potencial electrocinètic, *electrokinetic potential / zeta potential* 85, 198  
potencial electroquímic, *electrochemical potential* 84, 86, 200  
potencial estàndard d'elèctrode, *standard electrode potential* 85, 88  
potencial estàndard de la reacció d'una cel·la electroquímica, *standard potential of the electrochemical cell reaction / standard emf* 84  
potencial químic, *chemical potential* 23, 62, 72, 74, 78-79, 86, 200  
potencial químic estàndard, *standard chemical potential* 72, 74, 78-79  
potencial zeta, *zeta potential / electrokinetic potential* 85, 198  
prefixos de l'SI, *SI prefixes* 95, 99-100  
prefixos SI, *SI prefixes* 95, 99-100  
presentació dels espectres, *presentation of spectra* 49  
pressió, *pressure / stress* 23, 29, 62-63, 72, 74, 79, 93, 97, 101, 135-136, 143, 166, 168, 182-183, 189, 191, 194, 197  
pressió de l'estat estàndard, *standard state pressure* 80



- pressió estàndard, *standard pressure* 63, 78-80  
 pressió osmòtica, *osmotic pressure* 74, 200  
 pressió parcial, *partial pressure* 54, 62-63, 81  
 pressió superficial, *surface pressure* 90, 200  
 pressió [total], *[total] pressure* 62  
 primera constant de radiació, *first radiation constant* 51, 114, 183  
 primera hiperpolaritzabilitat, *first hyper-polarizability* 38, 197  
 primera hipersusceptibilitat, *first hyper-susceptibility* 31  
 probabilitat, *probability* 32-34, 53, 61, 81-82, 191  
 probabilitat de transició, *transition probability* 53, 81, 191  
 probabilitat de transició d'Einstein, *Einstein transition probability* 50, 53, 56, 182  
 productes d'unitats, *products of units* 25  
 productes de magnituds físiques, *products of physical quantity* 25  
 propietats de les partícules, *particle properties* 117-118  
 propietats de transport, *transport properties* 92  
 propietats interfacials, *interface properties* 91  
 propietats superficials, *surface properties* 91  
 propietats termodinàmiques, *thermodynamic properties* 80  
 protó, *proton* 37-39, 43, 65, 83, 113-114, 118, 144, 191  
 pulsació, *pulsance / angular frequency / circular frequency* 50, 202  
 pulsància, *pulsatance / angular frequency / circular frequency* 50, 202  
 punt de càrrega zero, *point of zero charge* 92, 167  
 punt isoelèctric, *isoelectric point* 92

## Q

- quantitat, *amount / amount of substance / chemical amount* 21, 63-64, 70, 77, 97, 190  
 quantitat adsorbida, *adsorbed amount* 90  
 quantitat d'electricitat, *quantity of electricity / electric charge* 30, 192  
 quantitat de moviment, *momentum* 29, 61-62, 102, 191  
 quantitat de moviment generalitzada, *generalized momentum* 61  
 quantitat de moviment [lineal], *[linear] momentum* 102  
 quantitat de substància, *amount of substance / chemical amount / amount* 21, 24, 62, 64, 68-69, 82, 91, 95-97, 190  
 quantitat química, *chemical amount / amount of substance / amount* 21, 62, 69, 190  
 quantitat superficial, *surface amount* 90  
 quantitat superficial d'excés, *excess surface amount* 91  
 química col·loïdal, *colloid chemistry* 90, 92

química de superfícies, *surface chemistry* 74, 90  
 química general, *general chemistry* 62, 64  
 química quàntica, *quantum chemistry* 16, 32-34  
 quocient de reacció, *reaction quotient* 73, 192  
 quocients d'unitats, *quotients of units* 25  
 quocients de magnituds físiques, *quotients of physical quantity* 25

## R

racionalitzat -ada, *rational* 149  
 radi, *radius* 28, 81-86, 192  
 radi d'esferes rígides, *hard sphere radius* 81  
 radi de Bohr, *Bohr radius* 37, 114, 181  
 radi invers, *reciprocal radius* 85, 198  
 radi invers de l'atmosfera iònica, *reciprocal radius of ionic atmosphere* 85, 199  
 radiació electromagnètica, *electromagnetic radiation* 49  
 radian, *radian* 28, 97-98, 105, 144, 192  
 radiància, *radiance* 50, 52, 189  
 radioactivitat, *radioactivity* 144  
 raó de mobilitat, *mobility ratio* 59, 183  
 raó entre la circumferència i el diàmetre d'un cercle, *ratio of circumference to diameter of a circle* 114, 200  
 raó giromagnètica, *gyromagnetic ratio / magnetogyric ratio* 37, 114, 197  
 raó giromagnètica del protó, *proton magnetogyric ratio* 114, 197  
 raó magnetogírica, *magnetogyric ratio / gyromagnetic ratio* 37, 41-42, 197  
 raó magnetogírica del protó, *proton magnetogyric ratio* 114, 197  
 rapidesa, *speed* 28, 98, 183, 195  
 reacció de combustió, *combustion reaction* 76, 183  
 reacció de formació, *formation reaction* 76, 185  
 reacció en general, *reaction in general* 75-76  
 reacció química, *chemical reaction* 68, 75, 77, 80, 82-83  
 reaccions nuclears, *nuclear reactions* 65  
 reactància, *reactance* 31-32, 195  
 recobriment superficial, *surface coverage* 90, 199  
 recorregut, *path length* 28, 193  
 recorregut lliure mitjà, *mean free path* 59, 81, 93, 199  
 reflectància, *reflectance* 51, 161, 201  
 refracció molar, *molar refraction* 51, 193  
 raó de capacitats calorífiques, *ratio of heat capacities* 72, 197, 199  
 relació de Curie, *Curie relation* 139, 157

rem, *rem* 93, 144, 167, 192  
 rendiment, *yield* 51, 81, 83  
 rendiment fotoquímic, *photochemical yield* 81  
 rendiment quàntic, *quantum yield* 81, 83, 202  
 resistència elèctrica, *electric resistance* 31, 97, 145, 193  
 resistència tèrmica, *thermal resistance* 92, 193  
 resistivitat, *resistivity* 31, 58, 201  
 resistivitat residual, *residual resistivity* 58  
 resolució, *resolution* 51, 53, 136, 164, 169  
 ressonància d'espín electrònic, *electron spin resonance* 42, 49, 162  
 ressonància magnètica nuclear, *nuclear magnetic resonance* 41, 49, 167  
 ressonància paramagnètica electrònica, *electron paramagnetic resonance* 42, 162  
 RMN ('ressonància magnètica nuclear'), *NMR* ('*nuclear magnetic resonance*') 41, 49, 166-167  
 roentgen / röntgen, *roentgen / röntgen* 147, 193  
 rotació específica, *specific rotation* 54  
 rotació òptica, *optical rotation* 52, 54  
 rotacional d'un camp vectorial, *curl of a vector field* 111  
 rydberg, *rydberg* 37, 114, 142, 167, 193

## S

SCF ('[teoria del] camp autoconsistent'), *SCF* ('*self-consistent field [theory]*') 36, 160, 166, 168  
 secció eficaç, *cross section* 38, 51, 53-55, 81, 186-187  
 secció eficaç d'absorció, *absorption cross section* 51, 53-54, 201  
 secció eficaç d'absorció integrada, *integrated absorption cross section* 51, 186  
 secció eficaç d'absorció neta, *net absorption cross section* 51, 53  
 secció eficaç (d'una reacció nuclear), (*nuclear reaction*) *cross section* 38  
 secció eficaç de col·lisió, *collision cross section* 81  
 secció eficaç diferencial, *differential cross section* 81, 187  
 secció eficaç total, *total cross section* 81  
 segon, *second* 95-97, 101, 104, 142, 147, 193  
 segon coeficient del virial, *second virial coefficient* 72, 74, 183  
 segon (d'arc), *second (of arc)* 101, 144, 203  
 segon llum, *light second* 141  
 segona constant de radiació, *second radiation constant* 51, 114, 183  
 segona hiperpolaritzabilitat, *second hyper-polarizability* 38, 197  
 segona hipersusceptibilitat, *second hyper-susceptibility* 31

- SI ('sistema internacional [d'unitats]'), *SI* ('*international system [of units]*') 15-16, 21, 27-34, 37-38, 40-44, 50-53, 56-59, 61-63, 71-74, 80-81, 83-86, 90, 92-93, 95-104, 135, 140-153
- siemens, *siemens* 97, 194
- sievert, *sievert* 97-98, 144, 194
- sigles, *acronyms* 159-169 i *passim*
- signe de producte, *product sign* 109, 200
- símbol de Levi-Cívita, *Levi-Civita symbol* 110, 198
- símbols, *symbols* 159-169, 181-203 i *passim*
- símbols d'elements, *symbols for elements* 65, 119-123, 181
- símbols d'entitats excitades, *symbols for excited entities* 66-67
- símbols d'espècies de simetria, *symbols for symmetry species* 45
- símbols d'estat excitat, *excitation symbols* 66-67
- símbols d'estats, *symbols for states* 46-47, 75-80
- símbols d'estats d'agregació, *symbols for states of aggregation* 70-71
- símbols d'operacions de simetria, *symbols for symmetry operations* 45
- símbols d'operadors matemàtics, *symbols for mathematical operators* 109
- símbols d'unitats, *symbols for units* 22 i *passim*
- símbols de constants matemàtiques, *symbols for mathematical constants* 114
- símbols de funcions especials, *symbols for special functions* 109
- símbols de funcions matemàtiques, *symbols for mathematical functions* 109
- símbols de Herman-Mauguin d'operacions de simetria, *Herman-Mauguin symbols of symmetry operations* 46, 60
- símbols de les magnituds físiques, *symbols of physical quantities* 22, 86, 103, 136, 181
- símbols de les partícules, *particle symbols / symbols for particles* 65
- símbols de molècules, *symbols for molecules* 67
- símbols de processos, *symbols for processes* 75-78
- símbols de radicals, *symbols for radicals* 67
- símbols de reaccions nuclears, *symbols for nuclear reactions* 65
- símbols de reaccions químiques, *symbols for chemical reactions* 64, 68-69, 75-78
- símbols de Schönflies, *Schönflies symbols* 46
- símbols de tensors, *symbols for tensors* 23
- símbols de vectors, *symbols for vectors* 23
- símbols del reticle cristal·lí, *crystal lattice symbols* 60
- símbols dels nombres quàntics, *symbols for quantum numbers* 43-44
- símbols dels núclids, *symbols for nuclides* 66
- símbols dels operadors de moment angular, *symbols for angular momentum operators* 43-44
- símbols dels termes espectrals, *term symbols* 46
- símbols matemàtics, *mathematical symbols* 107-111

- sistema d'unitats, *unit system* 20  
 sistema d'unitats atòmiques, *atomic unit system* 101, 144-145, 153  
 sistema d'unitats de l'SI, *SI unit system* 95-97  
 sistema d'unitats gaussià, *Gaussian unit system* 148-149  
 sistema d'unitats SI, *SI unit system* 95-97  
 sistema d'unitats uem, *emu unit system* 148-149, 151-152  
 sistema d'unitats ues, *esu unit system* 148-151  
 sistema gaussià, *Gaussian system* 148-149, 152  
 sistema internacional d'unitats, *international system of units* 15, 95, 168  
 sistema uem, *emu system* 151-152  
 sistema ues, *esu system* 148, 150-153  
 sobrepotencial, *overpotential* 84, 198  
 sobretensió, *overpotential* 84, 198  
 sòlid, *solid* 42-43, 54, 52, 57, 70-71, 75, 79, 182, 193  
 sòlid amorf, *amorphous solid* 71, 182  
 solubilitat, *solubility* 63, 75, 193  
 solució, *solution* 54, 64, 71, 75, 88-89, 193  
 solució aquosa, *aqueous solution* 71, 182  
 solució aquosa a dilució infinita, *aqueous solution at infinite dilution* 71  
 solució molal, *molal solution* 64  
 solució molar, *molar solution* 64  
 solut, *solute* 54, 63-64, 75, 79, 138-139  
 solvent, *solvent* 75  
 STO ('orbital de Slater'), *STO ('Slater-type orbital')* 36, 168  
 stokes, *stokes* 143, 160-161, 194  
 sublimació, *sublimation* 75, 193  
 substància pura, *pure substance* 76, 78-79, 203  
 substància vítria, *vitreous substance* 70, 195  
 suma d'estats, *sum over states* 61  
 sumatori, *summation sign* 109, 201  
 susceptància, *susceptance* 31, 183  
 susceptibilitat elèctrica, *electric susceptibility* 31-32, 149, 152, 156, 202  
 susceptibilitat magnètica, *magnetic susceptibility* 32, 139, 147, 149, 152, 156, 199, 202  
 susceptibilitat magnètica molar, *molar magnetic susceptibility* 32, 139, 147, 202  
 svedberg, *svedberg* 142, 194

## T

taula de factors de conversió d'energia, *energy conversion factors table* [tercera pàgina de la guarda posterior](#)

- taula de factors de conversió de pressions, *pressure conversion factors table* [segona pàgina de la guarda posterior](#)
- taxa de dosi absorbida, *absorbed dose rate* 99
- temperatura, *temperature* 23, 52, 54, 56, 78, 93, 135, 140, 166, 168, 186, 193, 197, 199, [tercera pàgina de la guarda posterior](#)
- temperatura característica, *characteristic temperature* 61
- temperatura característica (de Weiss), *characteristic (Weiss) temperature* 59
- temperatura Celsius, *Celsius temperature* 54, 71, 97-98, 147, 194
- temperatura centígrada, *centigrade temperature* 74
- temperatura de Curie, *Curie temperature* 59
- temperatura de Néel, *Néel temperature* 59
- temperatura Rankine, *Rankine temperature* 143
- temperatura de Weiss, *Weiss temperature* 59
- temperatura Fahrenheit, *Fahrenheit temperature* 147
- temperatura termodinàmica, *thermodynamic temperature* 21, 71, 94-97, 143, 147, 194
- temps, *time* 21, 28, 33, 82, 93-95, 97, 100, 102, 140, 142, 148-150, 153, 181, 184, 187, 189, 194
- temps de relaxació, *relaxation time / characteristic time interval / time constant* 28, 38, 41, 43, 58, 80, 194, 201
- temps de relaxació longitudinal, *longitudinal relaxation time* 38, 41, 43
- temps de relaxació transversal, *transverse relaxation time* 38, 41, 43
- temps de vida, *lifetime* 60, 123
- tensió, *stress* 29, 43, 72, 90-93, 98
- tensió de cisallament, *shear stress* 29, 201
- tensió d'una pel·lícula, *film tension* 90, 201
- tensió interfacial, *interfacial tension* 90, 92
- tensió normal, *normal stress* 29, 201
- tensió superficial, *surface tension* 29, 72, 90-93, 98, 197, 201
- tensor conductivitat, *conductivity tensor* 58
- tensor conductivitat tèrmica, *thermal conductivity tensor* 58
- tensor d'energia d'interacció quadrupolar, *quadrupole interaction energy tensor* 38, 202
- tensor gradient de camp elèctric, *electric field gradient tensor* 38
- tensor resistivitat, *resistivity tensor* 58
- teoria d'orbitals moleculars de Hückel, *Hückel molecular orbital theory* 33
- teoria de Hartree-Fock, *Hartree-Fock theory* 34
- teoria de Hartree-Fock-Roothaan, *Hartree-Fock-Roothaan theory* 36
- teoria del camp autoconsistent, *self consistent field theory* 34-35
- teoria electromagnètica, *electromagnetic theory* 148-150, 152, 155
- tera-, *tera-* 99, 194

tercer coeficient del virial, *third virial coefficient* 72, 184  
 terme electrònic, *electronic term* 40, 68, 194  
 terme espectral, *term* 40  
 terme rotacional, *rotational term* 40, 186  
 terme total, *total term* 40, 194  
 terme vibracional, *vibrational term* 40, 42, 186  
 termodinàmica, *thermodynamics* 21, 61, 71, 75-76, 94-97, 111, 143, 147  
 termodinàmica estadística, *statistical thermodynamics* 61  
 termodinàmica química, *chemical thermodynamics* 71, 75  
 tesla, *tesla* 97, 146, 194  
 tipografia dels nombres, *printing of numbers* 107  
 tona, *tonne* 101, 142, 194  
 torr, *torr* 94, 136, 143, 194, segona pàgina de la guarda posterior  
 transferència de càrrega, *charge transfer* 161  
 transició, *transition* 40-41, 48, 52-56, 75-76, 81-83, 96, 190-192, 194, 203  
 transició d'Einstein, *Einstein transition* 50, 53, 56, 182-183  
 transició de dipol elèctric, *electric dipole transition* 52, 55  
 transició electrònica, *electronic transition* 53  
 transició radiant, *radiative transition* 54  
 transicions, *transitions* 48-49, 53-56  
 transicions espectroscòpiques, *spectroscopic transitions* 48  
 transicions rotacionals, *rotational transitions* 49  
 transicions vibròniques, *vibronic transitions* 48  
 transmitància, *transmittance / transmission factor* 51, 53, 194, 201  
 transposada conjugada, *conjugate transpose* 111  
 treball, *work* 29, 58, 71, 97, 113, 195  
 tritó, *triton* 65, 118, 194

## U

ua, *au* 144-146  
 ua d'acció, *au of action* 143  
 ua de força, *au of force* 142  
 ua de temps, *au of time* 142  
 uem, *emu* 144-147  
 ues, *esu* 144-146, 150-151  
 unça, *ounce* 142, 191  
 unitat astronòmica, *astronomical unit* 141, 160, 169, 182  
 unitat d'entropia, *entropy unit* 143, 169, 185  
 unitat d'una magnitud, *unit of physical quantity* 19

- unitat de massa atòmica, *atomic mass unit* 38, 63, 101, 117, 119, 142, 169
- unitat de massa atòmica unificada, *unified atomic mass unit* 38, 63, 101, 113, 117, 119, 142, 194
- unitat fórmula, *formula unit* 63, 67, 85
- unitat tèrmica britànica, *British thermal unit* 142, 160, 183
- unitat X, *X unit* 141, 195
- unitats, *units* 19-25, 53-54, 62, 67, 95-106, 135-140, 148, 181
- unitats atòmiques, *atomic units* 33-34, 39, 101-102, 135, 137, 148-149, 153-154
- unitats de base [de l'SI], *SI base units* 95-96, 142
- unitats de l'SI, *SI units* 44, 50-53, 57-59, 61-63, 71-74, 80-85, 90, 92-93, 95-101, 103, 135, 140, 148, 153
- unitats derivades [de l'SI], *SI derived units* 29, 95, 97-99
- unitats SI, *SI units* 44, 50-53, 57-59, 61-63, 71-74, 80-85, 90, 92-93, 95-101, 103, 135, 140, 148, 153
- unitats SI de base, *SI base units* 95-96, 142-147
- unitats SI derivades, *SI derived units* 29, 95, 97-99
- unitats SI suplementàries, *SI supplementary units* 28, 98
- unitats suplementàries [de l'SI], *SI supplementary units* 28, 98

## V

- valor esperat d'un operador, *expectation value of operator* 33
- valor esperat del hamiltonià del centre (*core*), *expectation value of the core hamiltonian* 35
- valor numèric d'una magnitud física, *numerical value of physical quantity* 19
- vapor, *vapour* 70, 136, 143, 161, 165, 169
- vaporització, *vaporization* 75-76, 195
- vector (circular) del reticle recíproc, *circular reciprocal lattice vector* 57
- vector d'ona, *wave vector* 188, 192
- vector d'ona angular, *angular wave vector* 59
- vector d'ona circular, *circular wave vector / propagation vector* 59
- vector de Burgers, *Burgers vector* 58, 182
- vector de desplaçament d'un ió, *displacement vector of an ion* 58, 194
- vector de posició, *position vector* 28, 58, 193
- vector de posició d'equilibri d'un ió, *equilibrium position vector of an ion* 58
- vector de posició d'una partícula, *particle position vector* 58
- vector de posició molecular, *molecular position vector* 61
- vector de Poynting, *Poynting vector* 32, 157, 193
- vector de Poynting-Umov, *Poynting-Umov vector* 32
- vector de propagació, *propagation vector / circular wave vector* 59



- vector de quantitat de moviment molecular, *molecular momentum vector* 61
- vector de reticle, *lattice vector* 57, 192
- vector del reticle recíproc, *reciprocal lattice vector* 57-59, 181-183, 186
- vector unitari, *unit vector* 110-111, 184, 187-188
- vector velocitat molecular, *molecular velocity vector* 61
- vectors, *vectors* 23, 32, 57, 59, 108, 110
- vectors (circulars) fonamentals de translació del reticle recíproc, (*circular*) *fundamental translation vectors for the reciprocal lattice* 57, 181-183
- vectors de translació, *translation vectors* 57
- vectors fonamentals de translació del reticle, *fundamental translation vectors for the crystal lattice* 57, 181-183
- velocitat (mòdul) *Vegeu rapidesa*
- velocitat (vector), *velocity* 28, 53, 59, 61, 80, 84, 86, 93-94, 98, 102, 183, 185-186, 188, 194-195
- velocitat angular, *angular velocity* 28-29, 98, 202
- velocitat d'arrossegament, *drift velocity* 59
- velocitat d'efusió, *rate of effusion* 94
- velocitat de canvi, *rate of change* 80-81, 192
- velocitat de canvi de concentració, *rate of concentration change* 80, 192
- velocitat de canvi (de la magnitud *X*), *rate of change (of quantity X)* 80
- velocitat de conversió, *rate of conversion* 80, 83
- velocitat de decaïment, *decay rate* 38
- velocitat de desintegració, *desintegration rate* 38, 199
- velocitat de difusió, *diffusion rate* 84
- velocitat de flux, *flow rate* 92, 157, 192
- velocitat de flux d'energia, *rate of energy flow* 157
- velocitat de flux de calor, *heat flow rate* 92, 202
- velocitat de flux en massa, *mass flow rate* 92
- velocitat de flux en volum, *volume flow rate* 92
- velocitat de la llum, *speed of light* 42, 50, 102, 113, 148
- velocitat de la llum en el buit, *speed of light in vacuum* 50, 113, 183
- velocitat de la llum en un medi, *speed of light in a medium* 50
- velocitat de reacció, *rate of reaction* 80, 81-82, 84, 195
- velocitat de sedimentació, *velocity of sedimentation* 91
- velocitat mitjana, *average speed* 61, 94
- velocitat molecular, *molecular velocity* 61
- velocitat relativa, *relative speed* 81
- velocitat relativa mitjana, *mean relative speed* 81
- vida mitjana, *mean life* 38, 118
- viscositat, *viscosity* 30, 93, 99, 143, 198, 200
- viscositat cinemàtica, *kinematic viscosity* 30, 99, 143, 200

viscositat dinàmica, *dynamic viscosity* 30, 99, 143  
volt, *volt* 97, 100-101, 117, 137, 142, 145, 195  
volt internacional, *international volt* 145  
volt internacional [dels] EUA, *US international volt* 145  
volt internacional mitjà, *mean international volt* 145  
volum, *volume* 23-24, 28, 61-62, 72, 74, 92-93, 98, 101-104, 141, 146, 186, 189, 195, 199, 202-203  
volum a l'espai de fases, *volume in phase space* 61, 203  
volum d'activació, *volume of activation* 81  
volum d'imantació, *magnetization volume* 146  
volum de polaritzabilitat, *polarizability volume* 146  
volum específic, *specific volume* 24, 29, 98, 195  
volum molar, *molar volume* 22, 24, 62-63, 71, 74, 98, 113, 144, 147  
volum molar d'un gas ideal, *molar volume of ideal gas* 113  
volum molar mitjà, *mean molar volume* 63

## W

watt, *watt* 97, 143, 195  
weber, *weber* 93, 97, 146, 195

## Y

yocto-, *yocto-* 99, 196  
yotta-, *yotta-* 99, 196

## Z

zepto-, *zepto-* 99, 196  
zero de l'escala Celsius, *Celsius scale zero* 113  
zetta-, *zetta-* 99, 196

## ÍNDIX DE MOTS ANGLÈS-CATALÀ

L'ordenació alfabètica de les entrades s'ha fet d'acord amb el sistema discontinu amb partícules, és a dir, mot a mot. Quan es dona més d'una pàgina de referència, la negreta indica la referència general més útil. Els termes sinònims o estretament relacionats estan separats per una barra.

### A

- ab initio* ('*from the beginning*'), *ab initio* ('des del començament') 34  
*abbreviations*, abreviatures / abreviacions 159-169 i pàssim  
*abcoulomb*, abcoulomb 144  
*absolute activity*, activitat absoluta 61, 72, 198  
*absolute electrode potential*, potencial absolut d'elèctrode 86  
*absorbance*, absorbància 51, 53, 56, 182-183  
*absorbed dose (of radiation)*, dosi absorbida (de radiació) 97, 144  
*absorbed dose rate*, taxa de dosi absorbida 99  
*absorptance*, absortància / factor d'absorció 30, 51, 196  
*absorption*, absorció 48  
*absorption band intensity*, intensitat [de la banda] d'absorció / intensitat [de la ratlla] d'absorció 43, 53-57, 182, 193  
*absorption coefficient*, coeficient d'absorció 24, 51-54, 56, 181, 188, 196  
*absorption cross section*, secció eficaç d'absorció 51, 53-54, 201  
*absorption factor*, factor d'absorció / absortància 30, 51, 196  
*absorption index*, índex d'absorció 51, 188  
*absorption intensity*, intensitat d'absorció 54-55, 57, 182, 193, 198  
*acceleration*, acceleració 28, 98, 142, 181  
*acceleration due to gravity*, acceleració de la gravetat / acceleració de caiguda lliure 29, 91, 93, 114, 142, 186

- acceleration of free fall*, acceleració de caiguda lliure / acceleració de la gravetat 29, 91, 93, 114, 142, 186
- acceptor ionization energy*, energia d'ionització de l'acceptor 59
- acid dissociation equilibrium constant*, constant d'equilibri de dissociació d'un àcid 75
- acoustic dissipation factor*, factor de dissipació acústica 30, 198
- acoustic factors*, factors acústics 30
- acoustic reflection factor*, factor de reflexió acústica 30, 201
- acoustics*, acústica 29-30, 104-106, 196-197, 200
- acre*, acre 141
- acronyms*, acrònims / sigles 159-169 i pàssim
- action*, acció / moment angular 29, 33-34, 37, 39-40, 43-44, 46, 117, 123, 143, 153, 187, 189-190, 200
- activated complex*, complex activat 76, 160
- activation energy*, energia d'activació 81-82
- activity coefficient*, coeficient d'activitat 73, 83, 89, 185, 197
- activity coefficient referenced to Henry's law concentration basis*, coeficient d'activitat referent a la llei de Henry expressat en concentracions 73
- activity coefficient referenced to Henry's law molality basis*, coeficient d'activitat referent a la llei de Henry expressat en molalitats 73
- activity coefficient referenced to Henry's law mole fraction basis*, coeficient d'activitat referent a la llei de Henry expressat en fraccions molars 73
- activity coefficient referenced to Raoult's law*, coeficient d'activitat referent a la llei de Raoult 73
- activity (of a radioactive substance)*, activitat (d'una substància radioactiva) 38, 97, 182
- activity of an electrolyte*, activitat d'un electròlit 83
- admittance*, admitància 31, 196
- adsorbed*, adsorbit -ida 71, 90-91, 182
- adsorbed amount*, quantitat adsorbida 90
- adsorbed species*, espècie adsorbida 71
- adsorption*, adsorció 76, 91
- advancement*, avançament / extensió de la reacció 63-64, 200
- affinity of reaction*, afinitat de reacció 73, 182
- Alfvén number*, nombre d'Alfvén 93, 182
- alpha-particle*, partícula alfa 65, 118, 197
- amagat*, amagat 28, 144, 147, 182
- amorphous solid*, sòlid amorf 71, 182
- amount*, quantitat / quantitat de substància / quantitat química 21, 63-64, 70, 77, 97, 190
- amount concentration [of substance]*, concentració en quantitat [de substància] 21, 24, 53-54, 63-64, 70, 98-99, 183

- amount density*, densitat en quantitat de substància 144, 147
- amount fraction*, fracció en quantitat / fracció molar / fracció en nombre 62, 195
- amount of substance*, quantitat de substància / quantitat química / quantitat 21, 24, 62, 64, 68-69, 82, 91, 95-97, 190
- ampere*, ampere 95-97, 144, 148, 151, 165, 182
- amplitude levels*, nivells d'amplitud 105
- angle of optical rotation*, angle de rotació òptica 52, 54, 196
- ångström*, ångstrom 43, 101, 136, 141, 182
- angular frequency*, freqüència angular / freqüència circular / pulsància / pulsació 28-29, 38, 50, 58, 104, 202
- angular momentum*, moment angular / acció 29, 33-34, 37, 39-40, 43-44, 46, 117, 123, 143, 153, 187, 189-190, 200
- angular momentum operator*, operador de moment angular 32
- angular momentum quantum number*, nombre quàntic de moment angular 40, 43-44, 188-190, 199, 203
- angular velocity*, velocitat angular 28-29, 98, 202
- angular wave vector*, vector d'ona angular 59
- anode*, ànode 86
- anticommutator*, anticommutador 33
- aqueous solution*, solució aquosa 71, 182
- aqueous solution at infinite dilution*, solució aquosa a dilució infinita 71
- area*, àrea 24, 28, 74, 92-93, 98, 101, 141, 181-182, 193
- area per molecule*, àrea per molècula 90-91, 201
- area per molecule in a filled monolayer*, àrea per molècula en una monocapa completa 90
- areic*, d'àrea 24, 32, 82, 92, 155-156
- areic charge*, càrrega superficial 24
- (Arrhenius) activation energy*, energia d'activació (d'Arrhenius) 81-82
- astronomical unit*, unitat astronòmica 141, 160, 169, 182
- asymmetry parameter*, paràmetre d'asimetria 40, 199
- atmosphere*, atmosfera 85, 104, 113, 136, 143, 182, segona pàgina de la guarda posterior
- atomic absorption spectroscopy*, espectroscòpia d'absorció atòmica 103, 160
- atomic mass*, massa atòmica / massa de l'àtom 37-38, 62-63, 101, 113, 117, 119-134, 142, 169, 189, 194
- atomic mass constant*, constant de massa atòmica 37, 62, 113, 119, 189
- atomic mass unit*, unitat de massa atòmica 38, 63, 101, 117, 119, 142, 169
- atomic masses of nuclides*, masses atòmiques dels núclids 123-134
- atomic number*, nombre atòmic / nombre de protons 35, 37, 65-67, 117, 123, 196
- atomic orbital*, orbital atòmic 160, 202
- atomic orbital basis function*, funció de base d'orbitals atòmics 33, 36

*atomic scattering factor*, factor de dispersió atòmica 58, 185  
*atomic states*, estats atòmics 46  
*atomic unit system*, sistema d'unitats atòmiques 101, 144-145, 153  
*atomic units*, unitats atòmiques 33-34, 39, 101-102, 135, 137, 148-149, 153-154  
*atomic weight*, pes atòmic / massa atòmica relativa 62-63, 119-122, 182  
*atomization*, atomització 76, 78, 182  
*atto-*, atto- 99, 181  
*au*, ua 144-146  
*au of action*, ua d'acció 143  
*au of force*, ua de força 142  
*au of time*, ua de temps 142  
*average molar mass*, massa molar mitjana 63, 90  
*average speed*, velocitat mitjana 61, 94  
*Avogadro constant*, constant d'Avogadro 21, 61-62, 69, 113, 189-190

## B

*bar*, bar 63, 101, 136, 143, 183, segona pàgina de la guarda posterior  
*barn*, barn 101, 124, 141, 183  
*barrel*, barril 141  
*base hydrolysis constant*, constant d'hidròlisi d'una base 75  
*base of natural logarithms*, base dels logaritmes neperians 109, 114, 184  
*base physical quantities*, magnituds físiques de base 21  
*becquerel*, becquerel 97-98, 144, 183  
*bel*, bel 105, 183  
*beta-particle*, partícula beta 118, 197  
*binomial coefficient*, coeficient binòmic 109  
*biot*, biot 144, 151, 183  
*Bloch function*, funció de Bloch 59, 194  
*bohr*, bohr 102, 114, 139, 141, 153, 183  
*Bohr magneton*, magnetó de Bohr 37, 102, 114, 139, 146, 148, 160, 200  
*Bohr radius*, radi de Bohr 37, 114, 181  
*Boltzmann constant*, constant de Boltzmann 61, 80, 94, 113, 188  
*bond order*, ordre d'enllaç 33-34, 190  
*Bragg angle*, angle de Bragg 58, 198  
*breadth*, amplària 28, 163, 182, 197  
*British thermal unit*, unitat tèrmica britànica 142, 160, 183  
*bulk modulus*, mòdul cúbic / mòdul de compressió 30, 188  
*bulk strain*, deformació cúbica 30, 199  
*Burgers vector*, vector de Burgers 58, 182

## C

- calorie*, caloria 142, 183  
 15 °C *calorie*, caloria a 15 °C 142  
*candela*, candela 52, 96-97, 183  
*capacitance*, capacitat 22, 24, 31, 38, 59, 71-72, 93, 97-98, 143, 152, 155, 183  
*cartesian space coordinates*, coordenades cartesianes espacials 28, 195-196  
*cathode*, càtode 86  
*cell* Vegeu *electrochemical cell*, *galvanic cell*  
*Celsius scale zero*, zero de l'escala Celsius 113  
*Celsius temperature*, temperatura Celsius 54, 71, 97-98, 147, 194  
*centi-*, centi- 99, 183  
*centigrade temperature*, temperatura centígrada 74  
*centimetre*, centímetre 141  
*centipoise*, centipoise 143  
*centrifugal distortion constants*, constants de distorsió centrífuga 40, 42, 184, 197-198  
 CGPM ('*Conférence Générale des Poids et Mesures*'), CGPM ('*Conferència General de Pesos i Mesures*') 38, 63, 95-96, 101, 154  
*characteristic temperature*, temperatura característica 61  
*characteristic time interval*, interval de temps característic / temps de relaxació / constant de temps 28, 194, 201  
*characteristic (Weiss) temperature*, temperatura característica (de Weiss) 59  
*charge*, càrrega 32, 34, 36, 65-67, 86-87, 102, 140, 152-153, 155  
*charge density*, densitat de càrrega 24, 30, 33, 39, 59-60, 84, 99, 145, 192, 201  
*charge density of electrons*, densitat de càrrega electrònica 33, 59  
*charge number*, nombre de càrrega 35, 66-67, 69, 83, 118, 190, 196  
*charge number of an ion*, nombre de càrrega d'un ió 66, 83, 118  
*charge number of electrochemical cell reaction*, nombre de càrrega de la reacció d'una cel·la electroquímica 69, 83, 200  
*charge transfer*, transferència de càrrega 161  
*chemical amount*, quantitat química / quantitat de substància / quantitat 21, 62, 69, 190  
*chemical elements*, elements [químics] 65, 78, 119-134, 181  
*chemical equation*, equació química 64  
*chemical formulae*, fórmules químiques 67-68  
*chemical kinetics*, cinètica química 16, 80  
*chemical potential*, potencial químic 23, 62, 72, 74, 78-79, 86, 200  
*chemical reaction*, reacció química 68, 75, 77, 80, 82-83  
*chemical shift*, desplaçament químic / escala  $\delta$  41, 198, 201  
*chemical thermodynamics*, termodinàmica química 71, 75  
*circular frequency*, freqüència circular / freqüència angular / pulsància / pulsació 28, 202

- (circular) *fundamental translation vectors for the reciprocal lattice*, vectors (circulars) fonamentals de translació del reticle recíproc 57, 181-183
- circular reciprocal lattice vector*, vector (circular) del reticle recíproc 57
- circular wave vector*, vector d'ona circular / vector de propagació 59
- classical mechanics*, mecànica clàssica 29
- clausius*, clàusius 143, 184
- coefficient of heat transfer*, coeficient de transferència de calor 92-93, 187-188, 197
- coefficient of thermal expansion*, coeficient de dilatació tèrmica 74
- collision cross section*, secció eficaç de col·lisió 81
- collision density*, densitat de col·lisions / nombre de col·lisions 81, 196
- collision diameter*, diàmetre de col·lisió 81, 184
- collision frequency factor*, factor de freqüència de col·lisions 81, 196
- collision number*, nombre de col·lisions / densitat de col·lisions 81, 196
- collisional frequency*, freqüència de col·lisions 81, 196
- colloid chemistry*, química col·loïdal 90, 92
- combustion reaction*, reacció de combustió 76, 183
- commutator*, commutador 33
- complex*, complex 51, 76, 110, 160, 162
- complex admittance*, admitància complexa 31
- complex conjugate*, complex conjugat 33, 110, 203
- complex impedance*, impedància complexa 31
- complex refractive index*, índex de refracció complex 51
- compressibility*, compressibilitat 59, 72, 195, 199
- compressibility factor*, factor de compressibilitat / factor de compressió 72, 196
- compression factor*, factor de compressió / factor de compressibilitat 72, 196
- compression modulus*, mòdul de compressió / mòdul cúbic 30, 188
- concentration*, concentració 54, 63-64, 75, 79-82, 85, 89, 99, 103-104, 190, 203
- concentration basis equilibrium constant*, constant d'equilibri en concentracions 73
- condensed*, condensat -ada 70, 140
- condensed phase*, fase condensada 70, 183
- conductance*, conductància 31
- conductivity*, conductivitat 24, 31, 58, 70, 85-86, 99, 138, 197, 199, 201
- conductivity cell constant*, constant de cel·la de conductivitat 85, 188
- conductivity tensor*, tensor conductivitat 58
- conjugate transpose*, transposada conjugada 111
- conservation matrix*, matriu de conservació 64
- contact angle*, angle de contacte 90, 198
- conversion factors*, factors de conversió 57, 100-101, 135, 138, 140-148, 153
- conversion of units*, conversió d'unitats 135, 137, 139-147, 149, 151, 153, 155, 157
- convolution of functions*, convolució de funcions 110
- coordinates*, coordenades 28, 34-36, 41, 43, 45-46, 58



- core hamiltonian of a single electron*, hamiltonià del centre (*core*) d'un electró 34  
*Coriolis coupling constant*, constant d'acoblament de Coriolis 44  
*Coriolis zeta constant*, constant zeta de Coriolis 40, 197  
*corrosion nomenclature*, nomenclatura de la corrosió 83  
*coulomb*, coulomb 58, 97, 144, 184  
*coulomb energy*, energia de Coulomb 58  
*coulomb integral*, integral coulombiana 33-35, 188, 197  
*coulomb operator*, operador coulombià 35, 188  
*coupling constant*, constant d'acoblament 40-44, 181-182, 184, 188  
*Cowling number*, nombre de Cowling 93, 184  
*critical coagulation concentration*, concentració crítica de coagulació 92  
*critical micellization concentration*, concentració miscel·lar crítica 92  
*cross section*, secció eficaç 38, 51, 53-55, 81, 186-187  
*crystal directions*, direccions en cristalls 60  
*crystal lattice symbols*, símbols del reticle cristal·lí 60  
*crystal planes*, plans del cristall 60  
*crystalline*, cristal·lí -ina 60, 70-71, 78, 183  
*cubic expansion coefficient*, coeficient de dilatació cúbica 59, 72, 197  
*cubic metre*, metre cúbic 141  
*(cumulative) number of states*, nombre (acumulatiu) d'estats 61, 190, 195  
*curie*, curie 59, 139, 144, 157, 184  
*Curie relation*, relació de Curie 139, 157  
*Curie temperature*, temperatura de Curie 59  
*curl of a vector field*, rotacional d'un camp vectorial 111  
*cylindrical coordinates*, coordenades cilíndriques 28, 198, 201

## D

- dalton*, dalton 38, 63, 101, 142, 184  
*day*, dia 100, 142, 147, 184  
*debye*, debye 42, 55, 58, 62, 86, 145, 184  
*Debye angular frequency*, freqüència angular de Debye 58  
*Debye angular wavenumber*, nombre d'ona angular de Debye 58  
*Debye length*, longitud de Debye 86  
*Debye-Waller factor*, factor de Debye-Waller 58, 183-184  
*deca-*, deca- 99, 184  
*[decadic] absorbance*, absorbància [decimal] 51, 53  
*decay rate*, velocitat de decaïment 38  
*decay [rate] constant*, constant [de velocitat] de decaïment 38  
*deci-*, deci- 99, 184

- decibel*, decibel 104-106
- degeneracy*, degeneració 41-42, 61, 184, 186
- degree Celsius*, grau Celsius 97-98, 184
- degree Fahrenheit*, grau Fahrenheit 147, 186
- degree (of arc)*, grau (d'arc) 101, 144, 203
- degree of dissociation*, grau de dissociació 64
- degree of ionization*, grau d'ionització 64
- degree of reaction*, grau de reacció 63, 197
- degree Rankine*, grau Rankine 143, 193
- density*, densitat 29, 36, 67, 93, 98, 156-157, 159
- density matrix*, matriu de densitat 36, 191
- density matrix element*, element de la matriu de densitat 36
- density of states*, densitat d'estats 58, 61, 190, 201
- derived physical quantities*, magnituds físiques derivades 21
- desintegration rate*, velocitat de desintegració 38, 199
- deuteron*, deuteró 65, 118, 184
- diameter*, diàmetre 28, 81, 114, 161, 184
- diatomic constants*, constants diatòmiques 41
- dielectric constant*, constant dielèctrica 32, 151
- dielectric polarization*, polarització dielèctrica 31, 191
- differential cross section*, secció eficaç diferencial 81, 187
- diffusion coefficient*, coeficient de difusió 59-60, 92-93, 99, 184
- diffusion length*, longitud de difusió 59
- diffusion rate*, velocitat de difusió 84
- diffusion rate constant*, constant de velocitat de difusió / coeficient de transferència de matèria 84, 188
- dilution*, dilució 71, 75-76, 184
- dimension one*, dimensió u 102
- dimensionless normal vibrational coordinates*, coordenades de vibració normals adimensionals 41, 43
- dimensionless quantities*, magnituds adimensionals 16, 22, 27, 93, 102, 154
- dipolar coupling constant*, constant d'acoblament dipolar 41
- dipole*, dipol 32, 42, 52, 55, 117, 123, 155-156
- dipole length*, longitud del dipol 42, 145
- dipole moment per volume*, moment dipolar per volum 31
- Dirac delta function*, funció delta de Dirac 110, 198
- direct coupling constant*, constant d'acoblament directe 184
- direct [dipolar] coupling constant*, constant d'acoblament [dipolar] directe 41
- disintegration energy*, energia de desintegració 38, 192
- disintegration [rate] constant*, constant [de velocitat] de desintegració 38, 199
- displacement*, desplaçament 31, 41, 49, 58, 76, 146, 152, 184

*displacement vector of an ion*, vector de desplaçament d'un ió 58, 194  
*displayed formula*, fórmula desenvolupada 68  
*dissociation energy*, energia de dissociació 37, 184  
*dissociation energy from the ground state*, energia de dissociació des de l'estat fonamental 37  
*dissociation energy from the potential minimum*, energia de dissociació des del mínim potencial 37  
*distance*, distància 28, 32, 35, 42-43, 59, 82, 96, 150-151, 153, 184  
*divergence of a vector field*, divergència d'un camp vectorial 111  
*donor ionization energy*, energia d'ionització del donador 59  
 *$\Lambda$ -doubling*, desdoblament  $\Lambda$  45  
*drift velocity*, velocitat d'arrossegament 59  
*dynamic viscosity*, viscositat dinàmica 30, 99, 143  
*dyne*, dina 142, 150, 152, 184

## E

*effective distance*, distància efectiva 43  
*effective mass*, massa eficaç 59  
*efficiencies*, eficiències 102  
*Einstein transition*, transició d'Einstein 50, 53, 56, 182-183  
*Einstein transition probability*, probabilitat de transició d'Einstein 50, 53, 56, 182  
*electric capacitance*, capacitat elèctrica 97  
*electric charge*, càrrega elèctrica / quantitat d'electricitat 30, 65, 97, 140, 144, 149, 151, 153, 186, 192  
*electric charge density*, densitat de càrrega elèctrica 99  
*electric conductance*, conductància elèctrica 93, 97, 186  
*electric current*, intensitat de corrent elèctric / corrent elèctric 21, 31, 84, 95, 97, 102, 144, 148-149, 151-152, 183, 187  
*[electric] current density*, densitat de corrent [elèctric] 31, 33, 84, 99, 156, 187  
*electric current intensity*, intensitat de corrent elèctric / corrent elèctric 21, 31, 84, 95, 97, 102, 144, 148-149, 151-152, 183, 187  
*electric dipole moment*, moment dipolar elèctric 31-32, 55, 102, 145, 152, 155, 184, 191, 199  
*electric dipole moment (of a molecule)*, moment dipolar elèctric (d'una molècula) 38, 41, 42  
*electric dipole transition*, transició de dipol elèctric 52, 55  
*electric displacement*, desplaçament elèctric 31, 146, 152, 184  
*electric field gradient*, gradient de camp elèctric 38, 145, 192  
*electric field gradient tensor*, tensor gradient de camp elèctric 38

- electric field strength*, intensitat de camp elèctric 31, 86, 99, 102, 145, 185
- electric flux*, flux elèctric 31, 202
- electric mobility*, mobilitat elèctrica 85, 194, 200
- electric polarizability of a molecule*, polaritzabilitat elèctrica d'una molècula 38, 196
- electric potential*, potencial elèctric 30, 39, 84, 86-87, 97, 145, 148, 152, 195, 202
- electric potential difference*, diferència de potencial elèctric 30, 86-87, 185, 195
- electric potential difference (of a galvanic cell)*, diferència de potencial elèctric (d'una pila galvànica) 84, 86
- electric quadrupole moment*, moment quadrupolar elèctric 124, 145
- electric quadrupole moment area*, àrea del moment quadrupolar elèctric 124
- electric resistance*, resistència elèctrica 31, 97, 145, 193
- electric susceptibility*, susceptibilitat elèctrica 31-32, 149, 152, 156, 202
- electrochemical cell*, cel·la electroquímica 69, 83, 84, 85, 200
- electrochemical potential*, potencial electroquímic 84, 86, 200
- (electrochemical) transfer coefficient*, coeficient de transferència (electroquímica) 84, 196
- electrochemistry*, electroquímica 69, 83-84
- electrode potential*, potencial d'elèctrode 88
- electrode reaction rate constant*, constant de velocitat de la reacció d'elèctrode 84
- electrokinetic potential*, potencial electrocinètic / potencial zeta 85, 198
- electromagnetic radiation*, radiació electromagnètica 49
- electromagnetic theory*, teoria electromagnètica 148-150, 152, 155
- electromotive force*, força electromotriu 30, 84-85, 87, 97, 163, 185
- electron*, electró 34-35, 37, 39, 43, 46, 59, 60, 65, 69, 85, 102, 113-114, 117-118, 142, 153, 162-165, 167, 169, 185, 189, 200
- electron affinity*, afinitat electrònica 37, 181
- electron charge*, càrrega de l'electró 34
- electron configuration*, configuració electrònica 46-47
- electron magnetic moment*, moment magnètic de l'electró 114, 118, 200
- electron mass*, massa de l'electró 142
- electron orbital angular momentum*, moment angular d'un orbital electrònic 44, 189
- electron paramagnetic resonance*, ressonància paramagnètica electrònica 42, 162
- electron rest mass*, massa de l'electró en repòs 37, 102, 113, 153, 189
- electron spin resonance*, ressonància d'espín electrònic 42, 49, 162
- electronegativity*, electronegativitat 37-39, 202
- electronic term*, terme electrònic 40, 68, 194
- electronic transition*, transició electrònica 53
- electronvolt*, electró-volt 101, 137, 142, 185
- elementary charge*, càrrega elemental / càrrega del protó 37, 39, 83, 102, 113, 153, 184
- elementary entities*, entitats elementals 69, 96

- elementary reaction chemical equation*, equació química d'una reacció elemental 69
- elements, elements* [químics] 65, 78, 119-134, 181
- elongation*, elongació 29
- emf* ('*electromotive force*'), FEM ('força electromotriu') 84-89, 163
- emf of the cell*, FEM d'una cel·la / potencial de la reacció d'una cel·la electroquímica 84
- emission*, emissió 48, 50, 52-55, 163-165, 168
- emittance*, emitància 51-52, 198
- emitted radiant flux*, flux radiant emès 50
- empirical formula*, fórmula empírica 68
- emu*, uem 144-147
- emu system*, sistema uem 151-152
- emu unit system*, sistema d'unitats uem 148-149, 151-152
- energy*, energia 28-30, 96-98, 101-102, 142, 185, [tercera pàgina de la guarda posterior](#)
- energy barrier*, barrera d'energia 82
- energy conversion factors*, factors de conversió d'energia 101, [tercera pàgina de la guarda posterior](#)
- energy conversion factors table*, taula de factors de conversió d'energia [tercera pàgina de la guarda posterior](#)
- energy density*, densitat d'energia 98, 201
- energy parameter*, paràmetre d'energia 33, 195
- enthalpy*, entalpia 22, 24, 71, 73-74, 76-78, 81, 187
- entity*, entitat 24, 62-64, 67, 70, 86
- entropy*, entropia 71, 92, 98, 143, 169, 184-185, 193
- entropy unit*, unitat d'entropia 143, 169, 185
- EPR* ('*electron paramagnetic resonance*'), EPR ('ressonància paramagnètica electrònica') 42, 162
- equations of electromagnetic theory*, equacions de la teoria electromagnètica 149-150, 155-157
- equilibrium constant*, constant d'equilibri 73, 75, 188
- equilibrium distance*, distància d'equilibri 41, 43
- equilibrium position vector of an ion*, vector de posició d'equilibri d'un ió 58
- equilibrium reaction chemical equation*, equació química d'una reacció en equilibri 69
- equivalent dose*, dosi equivalent 97, 144
- equivalent dose (of radiation)*, dosi equivalent (de radiació) 97, 144
- erg*, erg 140, 142-143, 145-146, 150-151, 153, 185
- ESR* ('*electron spin resonance*'), ESR ('ressonància d'espín electrònic') 42, 49, 162
- estructural formula*, fórmula estructural 68

- esu*, ues 144-146, 150-151  
*esu system*, sistema ues 148, 150-153  
*esu unit system*, sistema d'unitats ues 148-151  
*etendue* ('throughput'), *étendue* ('rendiment') 51-52, 184  
*Euler number*, nombre d'Euler 93, 185  
*evaporation*, evaporació 75  
*exa-*, *exa-* 99, 185  
*excess quantity*, magnitud d'excés 76, 185  
*excess surface amount*, quantitat superficial d'excés 91  
*exchange integral*, integral de bescanvi 35, 188  
*exchange operator*, operador de bescanvi 35, 188  
*excitation symbols*, símbols d'estat excitat 66-67  
*excited states*, estats excitats 47  
*expansivity coefficient*, coeficient d'expansió tèrmica 74  
*expectation value of operator*, valor esperat d'un operador 33  
*expectation value of the core hamiltonian*, valor esperat del hamiltonià del centre (core) 35  
*exposure* (*X and  $\gamma$  rays*), exposició (raigs X i  $\gamma$ ) 99  
*extensive*, extensiu -iva 23-24, 74, 76  
*extensive physical quantity*, magnitud física extensiva 23  
*extent of reaction*, extensió de la reacció / avançament 63, 77, 200  
*extinction*, extinció 53  
*extinction coefficient*, coeficient d'extinció 53

## F

- factorial*, factorial 109  
*Fahrenheit temperature*, temperatura Fahrenheit 147  
*farad*, farad 97, 186  
*Faraday constant*, constant de Faraday 83, 113, 186  
*femto-*, femto- 99, 185  
*fermi*, fermi 59, 120, 141, 185  
*Fermi energy*, energia de Fermi 59  
*field levels*, nivells de camp 105-106  
*film tension*, tensió d'una pel·lícula 90, 201  
*film thickness*, gruix d'una pel·lícula 90, 187, 194  
*fine structure constant*, constant d'estructura fina 37, 102, 113, 197  
*finesse*, finor 51, 185  
*finite change*, increment finit 110, 198  
*first hyper-polarizability*, primera hiperpolaritzabilitat 38, 197

- first hyper-susceptibility*, primera hipersusceptibilitat 31  
*first radiation constant*, primera constant de radiació 51, 114, 183  
*flow rate*, velocitat de flux / cabal 92, 157, 192  
*fluence*, fluència 50, 52, 186, 187  
*fluid phase*, fase fluida 70, 185  
*fluidity*, fluïdesa 30, 202  
*flux*, flux 92-94, 188  
*Fock operator*, operador de Fock 35-36, 185  
*foot*, peu 27-28, 141, 185  
*force*, força 29, 97, 101, 185  
*force constants*, constants de força 43  
*formation reaction*, reacció de formació 76, 185  
*formula matrix*, matriu de les fórmules 64  
*formula unit*, unitat fórmula 63, 67, 85  
*Fourier number*, nombre de Fourier 93, 186  
*Fourier number for mass transfer*, nombre de Fourier per a transferència de matèria 93  
*fractional coordinates*, coordenades fraccionàries 58, 196  
*fractions*, fraccions 55, 68, 73-74, 102, 123  
*franklin*, franklin 140, 144, 150-151, 186  
*free spectral range*, interval espectral lliure 51, 53, 163  
*frequency*, freqüència 28, 42, 49-50, 52-53, 93, 97-98, 135, 185, 200, tercera pàgina de la guarda posterior  
*frequency factor*, factor de freqüència / factor preexponencial 81, 182  
*friction factor*, factor de fricció 30, 185, 199  
*Froude number*, nombre de Froude 93, 186  
*fugacity*, fugacitat 73, 75, 185  
*fugacity coefficient*, coeficient de fugacitat 73, 202  
*fundamental physical constants*, constants físiques fonamentals 101, 113-115, 137-138, 153  
*fundamental translation vectors for the crystal lattice*, vectors fonamentals de translació del reticle 57, 181-183  
*fusion*, fusió 75, 166, 185

## G

- gal*, gal / galileu 141, 186  
*galileo*, galileu / gal 141, 186  
*gallon (UK)*, galó (RU) 141  
*gallon (US)*, galó (EUA) 141, 186

- Galvani potential difference*, diferència de potencial de Galvani 84
- galvanic cell*, pila / cel·la galvànica 84, 85, 86-87, 88-89
- gamma*, gamma 110, 142, 178, 198
- gamma function*, funció gamma 110, 198
- gap energy*, energia interbanda 59
- gas*, gas 54, 56, 63, 70-71, 74-75, 78, 94, 113, 144, 147, 186, 192, 196
- gas constant*, constant dels gasos 61, 113, 192
- gas phase*, fase gasosa 57, 78
- Gau*, Gau 144-147
- gauss*, gauss 146, 186
- Gaussian system*, sistema gaussià 148-149, 152
- Gaussian type orbitals*, orbitals de tipus gaussià 36
- Gaussian unit system*, sistema d'unitats gaussià 148-149
- general chemical equation*, equació química general 64
- general chemistry*, química general 62, 64
- generalized coordinates*, coordenades generalitzades 28, 61, 192
- generalized momentum*, quantitat de moviment generalitzada 61
- g-factor*, factor *g* 38, 42-43, 114, 186
- Gibbs energy*, energia de Gibbs 23, 72-73, 81, 186
- Gibbs function*, funció de Gibbs 72
- giga-*, giga- 99, 186
- grade*, grau centesimal 144
- gradient of a scalar field*, gradient d'un camp escalar 111
- grain*, gra 142, 186
- gram*, gram 141, 186
- grand canonical ensemble*, col·lectiu gran canònic / gran funció de partició 61, 200
- grand partition function*, gran funció de partició / col·lectiu gran canònic 61, 200
- Grashof number*, nombre de Grashof 93, 186
- Grashof number for mass transfer*, nombre de Grashof per a transferència de matèria 93
- gravitational constant*, constant gravitacional 29, 114, 186
- gray*, gray 97-98, 144, 186
- Greek alphabet*, alfabet grec 178
- Gregorian year*, any gregorià 147
- ground state distance*, distància en l'estat fonamental 41
- Grüneisen parameter*, paràmetre de Grüneisen 58, 198
- GTO* ('*gaussian type orbitals*'), GTO ('orbitals de tipus gaussià') 36, 163
- gyromagnetic*, giromagnètic -a 37, 114
- gyromagnetic ratio*, raó giromagnètica / raó magnetogràfica 37, 114, 197



## H

- half life*, període de semidesintegració / període de semireacció 38, 80, 194
- Hall coefficient*, coeficient de Hall 58, 182, 192
- Hamilton function*, funció de Hamilton 29, 187
- hamiltonian operator*, operador hamiltonià 32
- hard sphere radius*, radi d'esferes rígides 81
- harmonic vibration wavenumber*, nombre d'ona de vibració harmònica 40, 202
- Hartmann number*, nombre de Hartmann 93, 187
- hartree*, hartree 34-37, 137, 142, 163, 167, 185
- Hartree energy*, energia de Hartree 37, 114, 137, 185
- Hartree-Fock theory*, teoria de Hartree-Fock 34
- Hartree-Fock-Roothaan theory*, teoria de Hartree-Fock-Roothaan 36
- heat*, calor 71, 192
- heat capacity*, capacitat calorífica 22, 71-72, 98, 143, 183
- heat capacity at constant pressure*, capacitat calorífica a pressió constant 22, 24, 72, 93
- heat capacity at constant volume*, capacitat calorífica a volum constant 59, 72
- heat flow rate*, velocitat de flux de calor 92, 202
- heat flux*, flux de calor 92, 98
- heat flux density*, densitat de flux de calor 98
- Heaviside function*, funció de Heaviside 198
- hectare*, hectàrea 141, 187
- hecto-*, hecto- 99, 187
- height*, altura / alçària 28, 82, 187
- helion*, heliò 65, 118, 187
- Helmholtz energy*, energia de Helmholtz 28, 72, 74, 91, 182
- Helmholtz function*, funció de Helmholtz 72
- henry*, henry 73, 75, 97, 187
- Henry's law*, llei de Henry 75
- Henry's law constant*, constant de la llei de Henry 73, 75, 188
- Herman-Maugin symbols of symmetry operations*, símbols de Herman-Maugin d'operacions de simetria 46, 60
- hermitian conjugate*, conjugat hermitià 33
- hertz*, hertz 23, 97, 187
- HMO* ('*Hückel molecular orbitals*'), HMO ('orbitals moleculars de Hückel') 33-34, 163
- horse power*, cavall de vapor 143, 187
- hour*, hora 100, 135, 142, 159, 187
- Hückel molecular orbital theory*, teoria d'orbitals moleculars de Hückel 33
- hydrogen-like wavefunction*, funció d'ona hidrogenoide 32

*hyperbolic functions*, funcions hiperbòliques 109  
*hyperfine coupling constant*, constant d'acoblament hiperfí 42, 181-182, 194  
*hyper-polarizability*, hiperpolaritzabilitat 38, 197  
*hyper-susceptibility*, hipersusceptibilitat 31

## I

*ideal*, ideal 76, 187  
*ideal gas*, gas ideal 79, 114  
*identity symmetry operator*, operador de simetria d'identitat 45, 185  
*illuminance*, il·luminància 97  
*immersion*, immersió 76, 187  
*impact parameter*, paràmetre d'impacte 81-82, 182  
*impedance*, impedància 31, 196  
*inch*, polzada 141, 143, 187  
*[indirect] spin-spin coupling constant*, constant d'acoblament espín-espín [indirecte] 41, 188  
*induced emission*, emissió induïda 50, 53-55  
*inductance*, inductància 31, 97, 189  
*inertial defect*, defecte inercial 40, 198  
*infinite dilution*, dilució infinita 71, 76, 203  
*infinitesimal change*, increment infinitesimal 110, 198  
*infrared spectra*, espectres en l'infraroig 57  
*inner electric potential*, potencial elèctric intern 84, 202  
*integrated absorption cross section*, secció eficaç d'absorció integrada 51, 186  
*integrated absorption intensity*, intensitat integrada d'absorció 51, 53, 56  
*integration element*, element d'integració 33  
*intensity*, intensitat 50, 52  
*intensive*, intensiu -iva 23  
*intensive physical quantity*, magnitud física intensiva 23  
*interatomic distances*, distàncies interatòmiques 41, 192  
*interface properties*, propietats interfacials 91  
*interfacial tension*, tensió interfacial 90, 92  
*internal absorptance*, absorptància interna 53  
*internal energy*, energia interna 71, 81, 195  
*internal vibrational coordinates*, coordenades de vibració internes 41, 192, 199  
*international calorie*, caloria internacional 142  
*international system of units*, sistema internacional d'unitats 15, 95, 168  
*international volt*, volt internacional 145  
*inversion symmetry operator*, operador de simetria d'inversió 46

- ionic conductivity*, conductivitat iònica / conductivitat molar d'un ió 85, 199  
*ionic strength*, força iònica 74, 83, 85-86, 187  
*ionic strength concentration basis*, força iònica en concentracions 74, 83  
*ionic strength molality basis*, força iònica en molalitats 74, 83  
*ionization energy*, energia d'ionització 37, 49, 59, 153, 159  
*irradiance*, irradiància 50, 52, 98, 185  
*irrational*, no racionalitzat -ada 139-140, 146-151, 155-157  
*isentropic compressibility*, compressibilitat isoentròpica 72  
*ISO/TC 12 ('Technical Committee 12 of the International Organization for Standardization')*, ISO/TC 12 ('Comitè Tècnic 12 de l'Organització Internacional de Normalització') 15  
*isobars*, isòbars 66  
*isoelectric point*, punt isoelèctric 92  
*isothermal compressibility*, compressibilitat isotèrmica 59, 72  
*isotopes*, isòtops 43, 66, 123  
*isotopic abundance [of nuclides]*, abundància isotòpica [dels núclids] 123-134  
*IUPAP ('International Union of Pure and Applied Physics')*, IUPAP ('Unió Internacional de Física Pura i Aplicada') 15-16, 28-30, 32, 37, 40, 49, 57, 61-62, 71, 92

## J

- joule*, joule 23, 72, 97, 142, 188  
*Joule-Thomson coefficient*, coeficient de Joule-Thomson 72, 199  
*Julian year*, any julià 147

## K

- K-doubling*, desdoblament *K* 45  
*kelvin*, kelvin 95-98, 143, 189  
*kilo-*, kilo- 99, 188  
*kilogram*, kilogram 95-97, 141-142, 165, 188  
*kilogram-force*, kilogram-força 142, 188  
*kinematic viscosity*, viscositat cinemàtica 30, 99, 143, 200  
*kinetic energy*, energia cinètica 22, 29, 32, 49, 188, 193  
*kinetic energy operator*, operador d'energia cinètica 32  
*Knudsen number*, nombre de Knudsen 93, 188  
*Kronecker delta*, delta de Kronecker 110, 198

## L

- Lagrange function*, funció de Lagrange 29, 189
- lambda*, lambda 141, 178, 199
- Landé g-factor for free electron*, factor *g* de Landé de l'electró lliure 114
- langmuir*, langmuir 94, 189
- Laplacian operator*, operador laplacià 111
- Larmor angular frequency*, freqüència angular de Larmor / freqüència de Larmor / freqüència circular de Larmor 38
- Larmor circular frequency*, freqüència circular de Larmor / freqüència angular de Larmor / freqüència de Larmor 39
- Larmor frequency*, freqüència de Larmor / freqüència angular de Larmor / freqüència circular de Larmor 38
- lattice plane spacing*, espaiat reticular 58, 184
- lattice vector*, vector de reticle 57, 192
- l-doubling*, desdoblament *l* 45
- length*, longitud 28, 101, 141, 189
- length of arc*, longitud d'arc 28, 193
- level width*, amplària de nivell 38, 197
- levels*, nivells 45, 48, 55, 96, 105
- Levi-Civita symbol*, símbol de Levi-Civita 110, 198
- Lewis number*, nombre de Lewis 93, 189
- lifetime*, temps de vida 60, 123
- light gathering power*, potència col·lectora de llum 51-52
- light second*, segon llum 141
- light year*, any llum 141, 189
- line width*, amplària de ratlla 53
- [linear] decadic absorption coefficient*, coeficient d'absorció [lineal] decimal 51
- linear expansion coefficient*, coeficient de dilatació lineal 72
- [linear] momentum*, quantitat de moviment [lineal] 102
- [linear] napierian absorption coefficient*, coeficient d'absorció [lineal] neperià 51, 54
- linear strain*, deformació lineal / elongació relativa 29, 184, 198
- lineic*, longitudinal 24, 38, 41, 43
- liquid*, líquid 32, 42-43, 54, 70-71, 75, 79, 163, 189
- liquid crystal*, cristall líquid 70-71, 189
- litre*, litre 23, 101, 141-142, 189
- litre atmosphere*, atmosfera litre 142
- logarithmic functions*, funcions logarítmiques 109-110
- logarithmic quantities*, magnituds logarítmiques 104
- logical operators*, operadors lògics 111
- long range order parameters*, paràmetres d'ordre de llarg abast 58, 193

*longitudinal relaxation time*, temps de relaxació longitudinal 38, 41, 43  
*Lorenz coefficient*, coeficient de Lorenz 58, 189  
*loss angle*, angle de pèrdua 31, 198  
*lumen*, lumen 97, 189  
*luminance*, luminància 99  
*luminous flux*, flux lluminós 97  
*luminous intensity*, intensitat lluminosa 21, 52, 95-97, 187  
*luminous quantities*, magnituds lluminoses 52  
*lux*, lux 97, 189

## M

*Mach number*, nombre de Mach 93, 190  
*Madelung constant*, constant de Madelung 58, 190, 197  
*magnetic dipole moment*, moment dipolar magnètic 31, 37, 102, 124, 139, 146, 152, 189, 200  
*magnetic dipole moment per volume*, moment dipolar magnètic per volum 31  
*magnetic field*, camp magnètic 31-32, 43, 49, 99, 146, 152, 187, 191  
*magnetic field strength*, intensitat de camp magnètic 31, 99, 146, 187  
*magnetic flux*, flux magnètic 31, 93, 97, 146, 152, 202  
*magnetic flux density*, densitat de flux magnètic / inducció magnètica 31, 93, 97, 102, 146, 152, 183  
*magnetic induction*, inducció magnètica / densitat de flux magnètic 31, 43, 49, 97, 102, 183  
*magnetic Reynolds number*, nombre de Reynolds magnètic 93, 193  
*magnetic susceptibility*, susceptibilitat magnètica 31-32, 139, 147, 149, 152, 156, 199, 202  
*magnetic vector potential*, potencial del vector magnètic 32, 182  
*magnetism*, magnetisme 30  
*magnetizability*, magnetitzabilitat 37, 146, 152, 200  
*magnetization*, imantació 31, 146, 152, 190  
*magnetization volume*, volum d'imatció 146  
*magnetogyric ratio*, raó magnetogírica / raó giromagnètica 37, 41-42, 197  
*mass*, massa 29-30, 100-102, 141-142, 189  
*mass adjusted normal vibrational coordinates*, coordenades de vibració normals ponderades de massa 41, 192  
*mass average molar mass*, massa molar mitjana en massa 90  
*mass concentration*, concentració en massa / densitat en massa / densitat massica 54, 62-63, 103, 197, 201  
*mass constant*, constant de massa 37, 62, 113, 119, 189

- mass density*, densitat en massa / densitat màssica / concentració en massa 24, 29, 54, 62-63, 98, 103, 197, 201
- mass excess*, excés de massa 37, 198
- mass flow rate*, velocitat de flux en massa 92
- mass fraction*, fracció en massa 62, 102-104, 195
- mass number*, nombre màssic / nombre de nucleons 37, 66-67, 182
- mass of atom*, massa de l'àtom / massa atòmica 37, 62
- mass of entity*, massa d'una entitat 62
- mass transfer coefficient*, coeficient de transferència de matèria / constant de velocitat de difusió 84, 92-93, 188
- massic*, màssic -a 24, 29, 37, 66-67, 103
- Massieu function*, funció de Massieu 72, 188
- mathematical constants*, constants matemàtiques 108, 114
- mathematical functions*, funcions matemàtiques 108-109
- mathematical operators*, operadors matemàtics 109
- mathematical symbols*, símbols matemàtics 107-111
- matrices*, matrius 23, 108, 111
- matrix element of operator*, element de matriu d'un operador 33
- matrix element of the Fock operator*, element de matriu de l'operador de Fock 36
- maxwell*, maxwell 146, 157, 190
- Maxwell equations*, equacions de Maxwell 157
- mean free path*, recorregut lliure mitjà 59, 81, 93, 199
- mean international ohm*, ohm internacional mitjà 145
- mean international volt*, volt internacional mitjà 145
- mean ionic activity*, activitat iònica mitjana 83, 86, 89
- mean ionic activity coefficient*, coeficient d'activitat iònica mitjana 83, 89
- mean ionic concentration*, concentració iònica mitjana 85
- mean ionic molality*, molalitat iònica mitjana 83
- mean life*, vida mitjana 38, 118
- mean molar mass*, massa molar mitjana 63, 90
- mean molar volume*, volum molar mitjà 63
- mean relative speed*, velocitat relativa mitjana 81
- mechanics*, mecànica 16, 29, 32, 165
- mega-*, mega- 99, 190
- melting*, fusió 75, 166, 185
- metre*, metre 19, 23, 95-97, 141, 165, 189
- micro-*, micro- 99, 200
- micron*, micra / micròmetre 141, 200
- mile*, milla 141, 189
- Miller indices*, índexs de Miller 60, 187, 189
- milli-*, mil·li- 99, 189

- millimetre of mercury*, mil·límetre de mercuri 143, 189, [segona pàgina de la guarda posterior](#)
- millimicron*, mil·limicra 141
- minute*, minut 100-101, 142, 144, 189, 203
- minute (of arc)*, minut (d'arc) 100, 144
- mixing of fluids*, mescla de fluids / mixió de fluids 75
- mixture*, mescla 63, 66, 75, 78-79, 189
- mobility*, mobilitat 59, 85, 200
- mobility ratio*, raó de mobilitat 59, 183
- modulus of elasticity*, mòdul d'elasticitat 30, 185
- molal solution*, solució molal 64
- molality*, molalitat 64, 73-75, 79, 83, 85, 89, 138, 182, 189
- molality basis equilibrium constant*, constant d'equilibri en molalitats 73
- molality (of a solute)*, molalitat (d'un solut) 63-64
- molar*, molar 22-24, 190
- molar conductivity*, conductivitat molar 24, 70, 85-86, 99, 138, 199
- molar conductivity (of an electrolyte)*, conductivitat molar (d'un electròlit) 85
- molar conductivity of an ion*, conductivitat molar d'un ió / conductivitat iònica 85
- molar [decadic] absorption coefficient*, coeficient d'absorció molar [decimal] 51, 198
- molar energy*, energia molar 98, [tercera pàgina de la guarda posterior](#)
- molar entropy*, entropia molar 71, 73, 77, 98, 143
- [molar] gas constant*, constant [molar] dels gasos 61, 113, 192
- molar heat capacity*, capacitat calorífica molar 98, 143
- molar magnetic susceptibility*, susceptibilitat magnètica molar 32, 139, 147, 202
- molar mass*, massa molar 62-63, 70, 90, 119, 139, 190
- molar napierian absorption coefficient*, coeficient d'absorció molar neperiana 51, 199
- molar optical rotatory power*, poder rotatori òptic molar 52, 54
- molar quantity*, magnitud molar 24, 72, 76
- molar refraction*, refracció molar 51, 193
- molar solution*, solució molar 64
- molar volume*, volum molar 22, 24, 62-63, 71, 74, 98, 113, 144, 147
- molar volume of ideal gas*, volum molar d'un gas ideal 113
- molarity*, molaritat 64
- mole*, mol 95-100, 190
- mole fraction*, fracció molar / fracció en quantitat / fracció en nombre 22, 62, 79, 93, 102-103, 139, 195
- molecular formula*, fórmula molecular 68
- molecular geometry*, geometria molecular 43
- molecular magnetic [dipole] moment*, moment [dipolar] magnètic d'una molècula 37-39, 139

*molecular mass*, massa molecular 62-63, 68  
*molecular momentum vector*, vector de quantitat de moviment molecular 61  
*molecular orbital*, orbital molecular 33-34, 36, 163, 165-166, 202  
*molecular position vector*, vector de posició molecular 61  
*molecular spin-orbital*, espín-orbital molecular 34  
*molecular states*, estats moleculars 47  
*molecular velocity*, velocitat molecular 61  
*molecular velocity vector*, vector velocitat molecular 61  
*molecular weight*, pes molecular 62-63, 166  
*moment of a force*, moment d'una força / parell de forces 29, 98, 190, 194  
*moment of inertia*, moment d'inèrcia 29, 40, 188  
*momentum*, quantitat de moviment / moment 29, 61-62, 102, 191  
*momentum operator*, operador de quantitat de moviment 32  
*monomeric form*, forma monomèrica 71, 190  
*muon*, muó 65, 118, 200  
*muonium*, muoni 117  
*mutual inductance*, inductància mútua 31, 190

## N

*nabla operator*, operador nabla 33, 110  
*nano-*, nano- 99, 190  
*[napierian] absorbance*, absorbància [neperiana] 51, 53, 183  
*napierian absorption coefficient*, coeficient d'absorció neperià 51, 54  
*natural logarithm of 10*, logaritme neperià de 10 114  
*nautical mile*, milla nàutica 141  
*Néel temperature*, temperatura de Néel 59  
*neper*, neper 104-106, 190  
*net absorption cross section*, secció eficaç d'absorció neta 51, 53  
*net forward reaction chemical equation*, equació química d'una reacció directa neta 69  
*neutrino*, neutrí 118, 200  
*neutron*, neutró 38-39, 65, 113, 118, 190  
*neutron number*, nombre de neutrons 37, 190  
*neutron rest mass*, massa del neutró en repòs 113, 189  
*newton*, newton 97, 142, 190  
*n-fold rotation operator*, operador de rotació *n*-ari 46, 184  
*NMR* ('*nuclear magnetic resonance*'), RMN ('*ressonància magnètica nuclear*') 41, 49, 166-167  
*non-rational*, no racionalitzat -ada 139-140, 146-151, 155-157



- normal stress*, tensió normal 29, 201  
*nuclear g-factor*, factor *g* nuclear 38  
*nuclear magnetic moments*, moments magnètics nuclears 124-134  
*nuclear magnetic resonance*, ressonància magnètica nuclear 41, 49, 167  
*nuclear magneton*, magnetó nuclear 37, 114, 146, 200  
*nuclear orbital angular momentum*, moment angular d'un orbital nuclear 44, 192  
*(nuclear reaction) cross section*, secció eficaç (d'una reacció nuclear) 38  
*nuclear reactions*, reaccions nuclears 65  
*nuclear spin quantum number*, nombre quàntic d'espín nuclear 124  
*nucleon number*, nombre de nucleons / nombre màssic 37, 66, 182  
*nuclides*, núclids 66, 117, 119, 121-123  
*number*, nombre 21  
*number average molar mass*, massa molar mitjana en nombre 90  
*number concentration*, concentració en nombre 59, 61, 63, 81, 184  
*number density*, densitat en nombre 59, 94, 190  
*number density of donors*, densitat en nombre de donadors 59, 191  
*number density of entities*, densitat en nombre d'entitats 61, 63  
*number fraction*, fracció en nombre / fracció molar / fracció en quantitat 62, 102, 195  
*number of atoms per entity*, nombre d'àtoms per entitat 67  
*number of entities*, nombre d'entitats 21, 24, 61-62, 69, 190  
*number of moles*, nombre de mols 21, 69  
*number of states*, nombre d'estats 61, 190, 195  
*numbers*, nombres 20, 22, 60, 104-105, 107-111, 119, 138, 140, 154  
*numerical value of physical quantity*, valor numèric d'una magnitud física 19  
*Nusselt number*, nombre de Nusselt 93, 190  
*Nusselt number for mass transfer*, nombre de Nusselt per a transferència de matèria 93

## O

- oersted*, oersted 146, 191  
*ohm*, ohm 97, 145, 203  
*one-electron integrals*, integrals monoelèctroniques 35-36  
*one-electron orbital energy*, energia de l'orbital monoelèctrònic 35  
*operator*, operador 32-36, 44-46, 52, 110  
*optical rotation*, rotació òptica 52, 54  
*optical rotatory power*, poder rotatori òptic 52, 54  
*optical spectroscopy*, espectroscòpia òptica 53  
*orbital energy*, energia de l'orbital 34-35, 198

- order of reaction*, ordre de reacció 86, 189-190  
*order of reflection*, ordre de reflexió 58, 190  
*oscillator strength*, força d'un oscil·lador 53  
*osmole*, osmol 75  
*osmotic coefficient molality basis*, coeficient osmòtic en molalitats 74, 202  
*osmotic coefficient mole fraction basis*, coeficient osmòtic en fraccions molars 74, 202  
*osmotic pressure*, pressió osmòtica 74, 200  
*ounce*, unça 142, 191  
*outer electric potential*, potencial elèctric extern 84, 202  
*overall order of reaction*, ordre global de reacció 80  
*overlap integral*, integral de superposició 33, 193  
*overlap matrix element*, element de la matriu de superposició 36  
*overpotential*, sobretensió / sobrepotencial 84, 198  
*oxidation number*, nombre d'oxidació 67

## P

- parsec*, parsec 141, 191  
*part per billion*, part per mil milions 104, 191  
*part per hundred*, part per cent 104, 166, 191  
*part per hundred million*, part per cent milions 104, 166, 191  
*part per million*, part per milió 102-103, 166, 191  
*part per quadrillion*, part per mil bilions 104, 191  
*part per thousand*, part per mil 104, 191  
*part per trillion*, part per bilió 104, 191  
*partial molar Gibbs energy*, energia de Gibbs molar parcial 23, 72  
*partial molar quantity*, magnitud molar parcial 72  
*partial order of reaction*, ordre parcial de reacció 80  
*partial pressure*, pressió parcial 54, 62-63, 81  
*particle position vector*, vector de posició d'una partícula 58  
*particle properties*, propietats de les partícules 117-118  
*particle symbols*, símbols de les partícules 65  
*partition function*, funció de partició 55, 61, 192, 196, 203  
*pascal*, pascal 97, 143, 191, segona pàgina de la guarda posterior  
*path length*, recorregut 28, 193  
*Péclet number*, nombre de Péclet 93, 191  
*Péclet number for mass transfer*, nombre de Péclet per a transferència de matèria 93  
*Peltier coefficient*, coeficient de Peltier 58, 200  
*percent*, per cent 102-104, 123, 203

- period*, període 28, 38, 80, 119, 194  
*permeability*, permeabilitat 22, 31, 93, 99, 152, 200  
*permeability of vacuum*, permeabilitat del buit 31, 113, 148, 200  
*permille*, per mil 104, 203  
*permittivity*, permitivitat 31, 99, 113, 148, 151-152, 198  
*permittivity of vacuum*, permitivitat del buit 31, 113, 148, 198  
*permutation symmetry operator*, operador de simetria de permutació 45, 191  
*peta-*, peta- 99, 191  
*pH*, pH 84, 86, 88-89, 191  
*photochemical yield*, rendiment fotoquímic 81  
*photoelectrochemical energy conversion*, conversió fotoelectroquímica d'energia 83  
*photoelectron spectra*, espectres fotoelectrònics 49  
*photon*, fotó 52, 65, 118, 197  
*photon intensity*, intensitat fotogrònica 52  
*photon quantities*, magnituds fotogròniques 52  
*physical quantity*, magnitud física 19-22, 34, 69, 95, 97-102, 135, 140, 152, 154  
*pico-*, pico- 99, 191  
*pion*, pió 118, 200  
*Planck constant*, constant de Planck 37, 50, 113, 150, 153, 187  
*Planck constant/2π*, constant de Planck/2π 37, 50, 102  
*Planck function*, funció de Planck 72, 196  
*plane angle*, angle pla 28, 54, 97, 101, 144, 196-198, 202  
*point of zero change*, punt de càrrega zero 92, 167  
*poise*, poise 143, 191  
*polarization*, polarització 146  
*polarizability*, polaritzabilitat 38-39, 146, 148, 152  
*polarizability volume*, volum de polaritzabilitat 146  
*polyatomic constants*, constants poliatòmiques 41  
*polyatomic constants of dimensionless normal coordinates*, constants poliatòmiques de coordenades normals adimensionals 41  
*polyatomic constants of internal coordinates*, constants poliatòmiques de coordenades internes 41  
*polyatomic constants of symmetry coordinates*, constants poliatòmiques de coordenades de simetria 41  
*polymeric form*, forma polimèrica 71, 191  
*position vector*, vector de posició 28, 58, 193  
*positronium*, positroni 117  
*potential difference*, diferència de potencial 30, 32, 84, 86-87, 185, 195  
*potential energy*, energia potencial 29, 181, 195, 202  
*potential of electrochemical cell reaction*, potencial de la reacció d'una cel·la electroquímica / FEM d'una cel·la 84

- pound*, lliura 142, 189
- pound per square inch*, lliura per polzada quadrada 143, 191
- power*, potència 30, 97, 105-106, 143, 183, 187, 191
- power levels*, nivells de potència 105-106
- Poynting vector*, vector de Poynting 32, 157, 193
- Poynting-Umov vector*, vector de Poynting-Umov 32
- Prandtl number*, nombre de Prandtl 93, 191
- pre-exponential factor*, factor preexponencial / factor de freqüència 81, 182
- presentation of spectra*, presentació dels espectres 49
- pressure*, pressió / esforç 23, 29, 62-63, 72, 74, 79, 93, 97, 101, 135-136, 143, 166, 168, 182-183, 189, 191, 194, 197
- pressure basis equilibrium constant*, constant d'equilibri en pressions 73
- pressure coefficient*, coeficient de pressió 72, 197
- pressure conversion factors*, factors de conversió de pressió 101, segona pàgina de la guarda posterior
- pressure conversion factors table*, taula de factors de conversió de pressions segona pàgina de la guarda posterior
- principal (H atom) quantum number*, nombre quàntic principal (de l'àtom de H) 37, 190
- principal moments of inertia*, moments d'inèrcia principals 40
- printing of numbers*, tipografia dels nombres 107
- probability*, probabilitat 32-34, 53, 61, 81-82, 191
- probability current density*, densitat de corrent de probabilitat / flux de probabilitat 33, 193
- probability density*, densitat de probabilitat 32, 34, 191
- probability flux*, flux de probabilitat / densitat de corrent de probabilitat 33, 82, 193
- product sign*, signe de producte 109, 200
- products of physical quantity*, productes de magnituds físiques 25
- products of units*, productes d'unitats 25
- propagation vector*, vector de propagació / vector d'ona circular 59
- proton*, protó 37-39, 43, 65, 83, 113-114, 118, 144, 191
- proton charge*, càrrega del protó / càrrega elemental 37, 83, 118, 144, 184
- proton magnetic moment*, moment magnètic del protó 114, 200
- proton magnetogyric ratio*, raó magnetogírica del protó / raó giromagnètica del protó 114, 197
- proton number*, nombre de protons / nombre atòmic 37, 66, 123, 196
- proton resonance frequency per field in H<sub>2</sub>O*, freqüència de ressonància del protó per unitat de camp en H<sub>2</sub>O 114
- proton rest mass*, massa del protó en repòs 113, 189
- pulsatance*, pulsància / pulsació / freqüència angular / freqüència circular 50, 202

*pure phase*, fase pura 79  
*pure substance*, substància pura 76, 78-79, 203

## Q

*quadrupole area*, àrea del quadrupol 145  
*quadrupole interaction energy*, energia d'interacció quadrupolar 39, 202  
*quadrupole interaction energy tensor*, tensor d'energia d'interacció quadrupolar 38, 202  
*quadrupole moment*, moment quadrupolar 38-39, 124, 145, 148, 192, 199  
*quadrupole moment of a molecule*, moment quadrupolar d'una molècula 38  
*quadrupole moment of a nucleus*, moment quadrupolar d'un nucli 38  
*quality factor*, factor de qualitat 51, 192  
*quantity calculus*, càlcul de magnituds 19-20, 135-140  
*quantity of electricity*, quantitat d'electricitat / càrrega elèctrica 30, 192  
*quantum chemistry*, química quàntica 16, 32-34  
*quantum mechanics*, mecànica quàntica 16, 32  
*quantum number*, nombre quàntic 37, 43-44, 46, 48-49, 124  
*quantum yield*, rendiment quàntic 81, 83, 202  
*quotients of physical quantity*, quocients de magnituds físiques 25  
*quotients of units*, quocients d'unitats 25

## R

*radial frequency*, freqüència radial 98  
*radian*, radian 28, 97-98, 105, 144, 192  
*radiance*, radiància 50, 52, 189  
*radiant energy*, energia radiant 50, 52, 192, 195  
*radiant energy density*, densitat d'energia radiant 50, 52, 195  
*radiant energy per time*, energia radiant per unitat de temps / potència radiant 50  
*radiant exitance*, excitància radiant 50, 190  
*radiant flux*, flux radiant 50, 97  
*radiant flux received*, flux radiant rebut 50  
*radiant intensity*, intensitat radiant 50, 52, 96, 187  
*radiant power*, potència radiant / energia radiant per unitat de temps 50, 52, 202  
*radiant quantities*, magnituds radiants 50-52  
*radiation constants*, constants de radiació 51, 114, 183

- radiative transition*, transició radiant 54  
*(radioactive) activity*, activitat (radioactiva) 38, 97, 182  
*radioactivity*, radioactivitat 144  
*radius*, radi 28, 81, 86, 192  
*Raman spectra*, espectres Raman 49  
*Rankine temperature*, temperatura Rankine 143  
*rate coefficient*, coeficient de velocitat / constant de velocitat 80  
*rate constant*, constant de velocitat / coeficient de velocitat 80, 86, 188  
*rate of change*, velocitat de canvi 80-81, 192  
*rate of change (of quantity X)*, velocitat de canvi (de la magnitud X) 80  
*rate of concentration change*, velocitat de canvi de concentració 80, 192  
*rate of conversion*, velocitat de conversió 80, 83  
*rate of effusion*, velocitat d'efusió 94  
*rate of energy flow*, velocitat de flux d'energia 157  
*rate of reaction*, velocitat de reacció 80, 81-82, 84, 195  
*ratio of circumference to diameter of a circle*, raó entre la circumferència i el diàmetre d'un cercle 114, 200  
*ratio of heat capacities*, raó de capacitats calorífiques 72, 197, 199  
*rational*, racionalitzat -ada 149  
*Rayleigh number*, nombre de Rayleigh 93, 193  
*reactance*, reactància 31-32, 195  
*reaction equation*, equació de reacció 64, 68, 78, 82  
*reaction in general*, reacció en general 75-76  
*reaction quotient*, quocient de reacció 73, 192  
*reciprocal lattice vector*, vector del reticle recíproc 57-59, 181-183, 186  
*reciprocal radius*, radi invers 85, 198  
*reciprocal radius of ionic atmosphere*, radi invers de l'atmosfera iònica 85, 199  
*reciprocal temperature parameter*, paràmetre de temperatura inversa 61, 197  
*reciprocal thickness of double layer*, gruix invers de la doble capa 90, 199  
*reciprocal unit cell angle*, angle invers de la cel·la unitat 57  
*reciprocal unit cell length*, longitud inversa de la cel·la unitat 57  
*reduced adsorption*, adsorció reduïda 91  
*reduced mass*, massa reduïda 29, 82, 200  
*reduced spin-spin coupling constant*, constant d'acoblament espín-espín reduït 41, 188  
*reflectance*, reflectància 51, 161, 201  
*reflection factor*, factor de reflexió 51  
*reflection plane*, pla de reflexió 46, 201  
*refractive index*, índex de refracció 50-51, 190  
*(relative) activity*, activitat (relativa) 73-74  
*relative adsorption*, adsorció relativa 91  
*relative atomic mass*, massa atòmica relativa / pes atòmic 62-63, 119-122, 182

- relative density*, densitat relativa 29, 184  
*relative elongation*, elongació relativa / deformació lineal 29, 184, 198  
*relative molar mass*, massa molar relativa 62-63  
*relative molecular mass*, massa molecular relativa 62-63, 190  
*relative permeability*, permeabilitat relativa 22, 31, 152  
*relative permittivity*, permitivitat relativa 31, 151  
*relative pressure coefficient*, coeficient de pressió relativa 72, 197  
*relative speed*, velocitat relativa 81  
*relative uncertainties*, incertesa relativa 102-103  
*relaxation time*, temps de relaxació / interval de temps característic / constant de temps 28, 38, 41, 43, 58, 80, 194, 201  
*rem*, rem 93, 144, 167, 192  
*residual resistivity*, resistivitat residual 58  
*resistivity*, resistivitat 31, 58, 201  
*resistivity tensor*, tensor resistivitat 58  
*resolution*, resolució 51, 53, 136, 163, 168  
*resolving power*, poder de resolució 51, 193  
*resonance frequency*, freqüència de ressonància 43, 114  
*resonance integral*, integral de ressonància 33, 197  
*rest mass*, massa en repòs 118  
*rest mass of particles*, massa de les partícules en repòs 118  
*retarded van der Waals constant*, constant de Van der Waals retardada 90, 183, 196  
*Reynolds number*, nombre de Reynolds 22, 93, 193  
*rontgen / röntgen*, roentgen / röntgen 147, 192  
*rotational constants in frequency*, constants rotacionals en freqüència 40  
*rotational constants in wavenumber*, constants rotacionals en nombre d'ona 40  
*rotational constant*, constant rotacional 40, 182-183  
*rotational term*, terme rotacional 40, 186  
*rotational transitions*, transicions rotacionals 49  
*rotation-reflection symmetry operator*, operador de simetria de rotació-reflexió 46, 193  
*rotatory power*, poder rotatori 52, 54, 202  
*rydberg*, rydberg 37, 114, 142, 167, 193  
*Rydberg constant*, constant de Rydberg 37, 114, 193

## S

- $\delta$  scale, escala  $\delta$  / desplaçament químic 41, 198  
*scattering angle*, angle de dispersió 81, 198  
*scattering matrix*, matriu de dispersió 81-82, 193

- SCF* ('self-consistent field [theory]'), SCF ('[teoria del] camp autoconsistent')  
**36, 160, 165, 167**
- Schmidt number*, nombre de Schmidt **93, 193**
- Schönflies symbols*, símbols de Schönflies **46**
- second*, segon **95-97, 101, 104, 142, 147, 193**
- second hyper-polarizability*, segona hiperpolaritzabilitat **38, 197**
- second hyper-susceptibility*, segona hipersusceptibilitat **31**
- second (of arc)*, segon (d'arc) **101, 144, 203**
- second radiation constant*, segona constant de radiació **51, 114, 183**
- second virial coefficient*, segon coeficient del virial **72, 74, 183**
- sedimentation coefficient*, coeficient de sedimentació **90-91, 193**
- self consistent field theory*, teoria del camp autoconsistent **34-35**
- self-inductance*, autoinductància **31**
- semiconductor electrochemistry*, electroquímica dels semiconductors **83**
- shear modulus*, mòdul de cisallament **30, 186**
- shear strain*, deformació de cisallament **30, 197**
- shear stress*, tensió de cisallament **29, 201**
- Sherwood number*, nombre de Sherwood **94, 193**
- shielding constant*, constant de blindatge **41, 43, 201**
- shielding parameter*, paràmetre d'apantallament **36**
- short range order parameters*, paràmetres d'ordre de curt abast **58, 201**
- SI* ('international system [of units]'), SI ('sistema internacional [d'unitats]') **15-16, 21, 27-34, 37-38, 40-44, 50-53, 56-59, 61-63, 71-74, 80-81, 83-86, 90, 92-93, 95-104, 135, 140-153**
- SI base units*, unitats de base [de l'SI] / unitats SI de base **95-96, 142**
- SI derived units*, unitats derivades [de l'SI] / unitats SI derivades **29, 97-99**
- SI prefixes*, prefixos de l'SI / prefixos SI **95, 99-100**
- SI supplementary units*, unitats SI suplementàries / unitats suplementàries [de l'SI] **28, 98**
- SI unit system*, sistema d'unitats de l'SI / sistema d'unitats SI **95-97**
- SI units*, unitats de l'SI / unitats SI **44, 50-53, 57-59, 61-63, 71-74, 80-85, 90, 92-93, 95-101, 103, 135, 140, 148, 153**
- siemens*, siemens **97, 194**
- sievert*, sievert **97-98, 144, 194**
- Slater type orbitals*, orbitals de tipus Slater **36**
- solid*, sòlid **42-43, 54, 57, 70-71, 75, 79, 182, 193**
- solid angle*, angle sòlid **28, 52, 82, 97, 202-203**
- solid state*, estat sòlid **57**
- solubility*, solubilitat **63, 75, 193**
- solute*, solut **54, 63-64, 75, 79, 138-139**
- solution*, solució **54, 64, 71, 75, 88-89, 193**



- solvent*, solvent 75
- sound energy flux*, flux d'energia del so 30, 191
- space*, espai 28
- space-fixed inversion symmetry operator*, operador de simetria d'inversió fixa a l'espai 45, 185
- specific conductance*, conductància específica 86
- specific energy*, energia específica 98
- specific entropy*, entropia específica 98
- specific heat energy*, capacitat calorífica específica 98
- specific optical rotatory power*, poder rotatori òptic específic 52, 54, 203
- specific quantity*, magnitud específica 24, 72
- specific rotation*, rotació específica 54
- specific surface area*, àrea superficial específica 90, 181
- specific volume*, volum específic 24, 29, 98, 195
- spectra*, espectres 43, 49, 57
- [spectral] density of vibrational modes*, densitat [espectral] de modes de vibració 58, 186, 190
- spectral intensity*, intensitat espectral / irradiància espectral 50, 53-54, 57
- spectral irradiance*, irradiància espectral / intensitat espectral 50, 53-54, 57
- spectral radiant energy density*, densitat d'energia radiant espectral 50, 52
- spectral radiant energy density in terms of frequency*, densitat d'energia radiant espectral en termes de freqüència 50
- spectral radiant energy density in terms of wavelength*, densitat d'energia radiant espectral en termes de longitud d'ona 50
- spectral radiant energy density in terms of wavenumber*, densitat d'energia radiant espectral en termes de nombre d'ona 50
- spectroscopic transitions*, transicions espectroscòpiques 48
- spectroscopy*, espectroscòpia 30, 37, 39, 40-49, 53, 160-170
- speed*, rapidesa / velocitat (mòdul) 28, 98, 183, 195
- speed distribution function*, funció de distribució de la velocitat 61, 186
- speed of light*, velocitat de la llum 42, 50, 102, 113, 148
- speed of light in a medium*, velocitat de la llum en un medi 50
- speed of light in vacuum*, velocitat de la llum en el buit 50, 113, 183
- spherical harmonic function*, funció harmònica esfèrica / harmònics esfèrics 32, 196
- spherical polar coordinates*, coordenades polars esfèriques 28, 192, 199, 202
- spin angular momentum*, moment angular d'espín 34, 187, 193
- spin wave function*, funció d'ona d'espín 33, 197
- spin-orbit coupling constant*, constant d'acoblament espín-òrbita 40, 182
- spin-spin coupling constant*, constant d'acoblament espín-espín 188
- spontaneous emission*, emissió espontània 50

- square metre*, metre quadrat 141
- square root of minus one*, arrel quadrada de menys u 110, 187
- standard*, estàndard 74-76, 203
- [standard] acceleration of free fall*, acceleració [estàndard] de caiguda lliure 114, 142
- standard atmosphere*, atmosfera estàndard 113
- standard atomic weights*, pesos atòmics estàndard 63, 119, 123
- standard atomic weights of elements*, pesos atòmics estàndard dels elements 119
- standard chemical potential*, potencial químic estàndard 72, 74, 78-79
- standard concentration*, concentració estàndard 79
- standard electrode potential*, potencial estàndard d'elèctrode 85, 88
- standard emf*, FEM estàndard / potencial estàndard de la reacció d'una cel·la electroquímica 84
- standard enthalpy of activation*, entalpia estàndard d'activació 81
- standard entropy of activation*, entropia estàndard d'activació 81
- standard equilibrium constant*, constant d'equilibri estàndard 74-75, 77
- standard Gibbs energy of activation*, energia de Gibbs estàndard d'activació 81
- standard internal energy of activation*, energia interna estàndard d'activació 81
- standard molality*, molalitat estàndard 79
- standard partial molar enthalpy*, entalpia molar parcial estàndard 73
- standard partial molar entropy*, entropia molar parcial estàndard 73
- standard potential of the electrochemical cell reaction*, potencial estàndard de la reacció d'una pila electroquímica / FEM estàndard 84
- standard pressure*, pressió estàndard 63, 78-80
- standard pressure corrections*, correccions a pressió estàndard 88
- standard reaction enthalpy*, entalpia estàndard de reacció 73
- standard reaction entropy*, entropia estàndard de reacció 73
- standard reaction Gibbs energy*, energia de Gibbs estàndard de reacció 73
- standard reaction quantities*, magnituds estàndard de reacció 77
- standard state pressure*, pressió de l'estat estàndard 80
- standard states*, estats estàndard 78
- standard thermodynamic quantities*, magnituds termodinàmiques estàndard 74-75, 78-80
- standard uncertainty*, incertesa estàndard 108
- Stanton number*, nombre de Stanton 93, 194
- Stanton number for mass transfer*, nombre de Stanton per a transferència de matèria 93
- state function*, funció d'estat 32
- states of aggregation*, estats d'agregació 70, 181
- statistical thermodynamics*, termodinàmica estadística 61
- statistical weight*, pes estadístic 41, 61-62, 195, 197, 203

- Stefan-Boltzmann constant*, constant de Stefan-Boltzmann 51, 114, 201
- steradian*, estereoradian 28, 97, 193
- stereochemical formula*, fórmula estereoquímica 68
- stimulated emission*, emissió estimulada 50, 164-165, 168
- STO* ('Slater-type orbital'), STO ('orbital de Slater') 36, 168
- Stockholm convention*, convenció d'Estocolm 86
- stoichiometric chemical equation*, equació química estequiomètrica 64, 69, 77
- stoichiometric number*, coeficient estequiomètric 63-64, 69, 78, 200
- stokes*, stokes 143, 160-161, 194
- stress*, tensió / esforç 29, 43, 72, 90-93, 98, 191
- Strouhal number*, nombre de Strouhal 93, 194
- structure factor*, factor d'estructura 58, 186
- sublimation*, sublimació 75, 193
- substance concentration*, concentració de substància 21, 64
- substitution structure distance*, distància d'estructura de substitució 41
- sum over states*, suma d'estats 61
- summation sign*, sumatori 109, 201
- surface amount*, quantitat superficial 90
- [surface] charge density*, densitat de càrrega [superficial] 24, 30, 84, 201
- surface chemistry*, química de superfícies 74, 90
- surface concentration*, concentració superficial 63, 81, 90-91, 197
- surface coverage*, recobriment superficial 90, 199
- surface density*, densitat superficial 29, 201
- surface electric potential*, potencial elèctric de superfície 84, 202
- surface excess*, excés superficial 90-91
- surface excess concentration*, concentració superficial d'excés 90-91
- surface pressure*, pressió superficial 90, 200
- surface properties*, propietats superficials 91
- surface tension*, tensió superficial 29, 72, 90-93, 98, 197, 201
- susceptance*, susceptància 31, 183
- svedberg*, svedberg 142, 194
- symbols*, símbols 20-25
- symbols for angular momentum operators*, símbols dels operadors de moment angular 43-44
- symbols for chemical reactions*, símbols de reaccions químiques 64, 68-69, 75-78
- symbols for elements*, símbols d'elements 65, 119-123, 181
- symbols for excited entities*, símbols d'entitats excitades 66-67
- symbols for mathematical constants*, símbols de constants matemàtiques 114
- symbols for mathematical functions*, símbols de funcions matemàtiques 109
- symbols for mathematical operators*, símbols d'operadors matemàtics 109

- symbols for molecules*, símbols de molècules 67
- symbols for nuclear reactions*, símbols de reaccions nuclears 65
- symbols for nuclides*, símbols dels núclids 66
- symbols for particles*, símbols de les partícules 65
- symbols for processes*, símbols de processos 75-78
- symbols for quantum numbers*, símbols dels nombres quàntics 43-44
- symbols for radicals*, símbols de radicals 67
- symbols for special functions*, símbols de funcions especials 109
- symbols for states*, símbols d'estats 46-47, 75-80
- symbols for states of aggregation*, símbols d'estats d'agregació 70-71
- symbols for symmetry operations*, símbols d'operacions de simetria 45
- symbols for symmetry species*, símbols d'espècies de simetria 45
- symbols for tensors*, símbols de tensors 23
- symbols for units*, símbols d'unitats 22 i pàssim
- symbols for vectors*, símbols de vectors 23
- symbols of physical quantities*, símbols de les magnituds físiques 22, 86, 103, 136, 181
- symmetry number*, nombre de simetria 61, 193, 201
- symmetry operators*, operadors de simetria 45-46
- symmetry species*, espècies de simetria 45, 47, 108
- symmetry vibrational coordinates*, coordenades de vibració de simetria 41, 193

## T

- temperature*, temperatura 23, 52, 54, 56, 78, 93, 135, 140, 166, 168, 186, 193, 197, 199, [tercera pàgina de la guarda posterior](#)
- tensor quantities*, magnituds tensorials 108
- tera-*, *tera-* 99, 194
- term*, terme espectral 40
- term symbols*, símbols dels termes espectrals 46
- tesla*, *tesla* 97, 146, 194
- thermal conductance*, conductància tèrmica 92, 186
- thermal conductivity*, conductivitat tèrmica 58, 92-93, 99, 168, 188, 199
- thermal conductivity tensor*, tensor conductivitat tèrmica 58
- thermal diffusivity*, difusivitat tèrmica 92, 181
- thermal expansion coefficient*, coeficient de dilatació tèrmica 74
- thermal resistance*, resistència tèrmica 92, 193
- thermochemical calorie*, caloria termoquímica 142
- thermodynamic equilibrium constant*, constant d'equilibri termodinàmic 75
- thermodynamic properties*, propietats termodinàmiques 80

- thermodynamic temperature*, temperatura termodinàmica 21, 71, 94-97, 143, 147, 194
- thermodynamics*, termodinàmica 21, 61, 71, 75-76, 94-97, 111, 143, 147
- thermoelectric force*, força termoelectrònica 58, 185
- thickness*, gruix / gruixària 28, 90, 184, 198
- thickness layer*, gruix d'una capa 90, 194, 201
- thickness of diffusion layer*, gruix de la capa de difusió 84
- third virial coefficient*, tercer coeficient del virial 72, 184
- Thomson coefficient*, coeficient de Thomson 58, 198, 201
- threshold energy*, energia llindar 82
- time*, temps 21, 28, 33, 82, 93-95, 97, 100, 102, 140, 142, 148-150, 153, 181, 184, 187, 189, 194
- time constant*, constant de temps / interval de temps característic / temps de relaxació 28
- tonne*, tona 101, 142, 194, segona pàgina de la guarda posterior
- torque*, parell de forces / moment d'una força 29, 190, 194
- torr*, torr 94, 136, 143, 194, segona pàgina de la guarda posterior
- total cross section*, secció eficaç total 81
- total electronic energy*, energia electrònica total 35-36
- [total] pressure*, pressió [total] 62
- total surface excess concentration*, concentració superficial total d'excés 90-91
- total term*, terme total 40, 194
- total wavefunction*, funció d'ona total 34
- transfer coefficient*, coeficient de transferència 84, 92-93, 196
- transition*, transició 40-41, 48, 52-56, 75-76, 81-83, 96, 190-192, 194, 203
- transition dipole moment*, moment dipolar de transició 41, 52, 190, 192
- transition dipole moment (of a molecule)*, moment dipolar de transició (d'una molècula) 41
- transition frequency*, freqüència de la transició 40
- transition probability*, probabilitat de transició 53, 81, 191
- transition state*, estat de transició 76, 83, 168, 203
- transition wavenumber*, nombre d'ona de la transició 40
- transitions*, transicions 48-49, 53-56
- translation vectors*, vectors de translació 57
- transmission coefficient*, coeficient de transmissió 83, 199
- transmission factor*, factor de transmissió / transmissió 30, 51, 194, 201
- transmittance*, transmissió / factor de transmissió 51, 53, 194, 201
- transport number*, nombre de transport 85, 194
- transport properties*, propietats de transport 92
- transverse relaxation time*, temps de relaxació transversal 38, 41, 43
- trigonometric functions*, funcions trigonomètriques 109

*triton*, tritó 65, 118, 194  
*tropical year*, any tròpic 147  
*two-electron integrals*, integrals bielectròniques 35-36  
*two-electron repulsion integrals*, integrals de repulsió bielectròniques 35

## U

*ultraviolet spectra*, espectres en l'ultraviolat 49  
*uncertainties (of measurement)*, incertesa (d'un mesurament) 80, 107  
*unified atomic mass unit*, unitat de massa atòmica unificada 38, 63, 101, 113, 117, 119, 142, 194  
*unit cell angle*, angle de la cel·la unitat 57  
*unit cell length*, longitud de la cel·la unitat 57, 181-183  
*unit of physical quantity*, unitat d'una magnitud 19  
*unit step function*, funció esglaonada unitària 110, 198  
*unit system*, sistema d'unitats 20  
*unit vector*, vector unitari 110-111, 184, 187-188  
*units*, unitats 19-25, 28-30, 32-34, 36, 38-40, 42-44, 52-56, 62, 67, 75-77, 95-106, 123-124, 135-140, 146-154, 168, 181  
*uni-univalent electrolyte*, electròlit uni-univalent 89  
*unrationalized*, no racionalitzat -ada 139-140, 146-151, 155-157  
*US international ohm*, ohm internacional [dels] EUA 145  
*US international volt*, volt internacional [dels] EUA 145

## V

*van der Waals coefficient*, coeficient de Van der Waals 72, 181-182  
*van der Waals constant*, constant de Van der Waals 90, 199  
*van der Waals-Hamaker constant*, constant de Van der Waals-Hamaker 90, 182  
*vaporization*, vaporització 75-76, 195  
*vapour*, vapor 70, 136, 143, 161, 165, 169  
*vectors*, vectors 23, 32, 57, 59, 108, 110  
*velocity*, velocitat (vector) 28, 53, 59, 61, 80, 86, 93-94, 98, 102, 183, 185-186, 188, 194-195  
*velocity distribution function*, funció de distribució d'un component de la velocitat 61, 185  
*velocity of sedimentation*, velocitat de sedimentació 91  
*vibrational anharmonicity constant*, constant d'anharmonicitat vibracional 40, 186, 195  
*vibrational coordinates*, coordenades de vibració 41

*vibrational force constant*, constant de força vibracional 41, 186, 188, 202  
*vibrational quantum number*, nombre quàntic vibracional 40, 189, 195  
*vibrational states*, estats vibracionals 48  
*vibrational term*, terme vibracional 40, 42, 186  
*vibronic transitions*, transicions vibròniques 48  
*viscosity*, viscositat 30, 93, 99, 143, 198, 200  
*visible spectra*, espectres en el visible 49  
*vitreous substance*, substància vítria 70, 195  
*volt*, volt 97, 100-101, 117, 137, 142, 145, 195  
*Volta potential difference*, diferència de potencial de Volta 84  
*volume*, volum 23-24, 28, 61-62, 72, 74, 92-93, 98, 101-104, 141, 146, 186, 189, 195, 199, 202-203  
*volume flow rate*, velocitat de flux en volum 92  
*volume fraction*, fracció en volum 62, 102-104, 202  
*volume in phase space*, volum a l'espai de fases 61, 203  
*volume of activation*, volum d'activació 81  
*volume strain*, deformació volúmica 30, 199

## W

*Wang asymmetry parameter*, paràmetre d'asimetria de Wang 42  
*watt*, watt 97, 143, 195  
*wave vector*, vector d'ona 188, 192  
*wavefunction*, funció d'ona 32-34, 45, 47, 60, 202  
*wavelength*, longitud d'ona 19, 42, 49-50, 52-54, 136, 199  
*wavenumber*, nombre d'ona 40, 42-43, 49, 50, 52, 53, 56, 58, 98, 135, 137, 200, 201, tercera pàgina de la guarda posterior  
*wavenumber (in a medium)*, nombre d'ones (en un medi) 50  
*wavenumber in vacuum*, nombre d'ona en el buit 50, 52, 200  
*weber*, weber 93, 97, 146, 195  
*Weber number*, nombre de Weber 93, 195  
*weight*, pes 29, 41, 61-63, 104, 119-122, 166, 186, 191  
*Weiss temperature*, temperatura de Weiss 59  
*work*, treball 29, 58, 71, 97, 113, 195  
*work function*, funció de treball 58, 202

## X

*X unit*, unitat X 141, 195

## Y

- yard*, iarda 141, 196  
*year*, any 142, 147, 181  
*yield*, rendiment 51, 81, 83  
*yocto-*, yocto- 99, 196  
*yotta-*, yotta- 99, 196  
*Young's modulus*, mòdul de Young 30

## Z

- Z-average molar mass*, massa molar mitjana de Z 90  
*zepto-*, zepto- 99, 196  
*zero-point average distance*, distància mitjana en el punt zero 41  
*zeta potential*, potencial zeta / potencial electrocinètic 85, 198  
*zetta-*, zetta- 99, 196



# ÍNDIX GENERAL

Equip editorial	5
Taula	7
PRÒLEG A L'EDICIÓ CATALANA	9
PREFACI DE LA VERSIÓ ORIGINAL	13
INTRODUCCIÓ HISTÒRICA	15
1. MAGNITUDS FÍSQUES I UNITATS	19
1.1. Magnituds físiques i càlcul de magnituds	19
1.2. Magnituds físiques de base i magnituds físiques derivades	21
1.3. Símbols de les magnituds físiques i de les unitats	22
Regles generals per als símbols de les magnituds físiques	22
Regles generals per als símbols de les unitats	23
1.4. Ús dels mots <i>extensiu</i> , <i>intensiu</i> , <i>específic</i> i <i>molar</i>	23
1.5. Productes i quocients de magnituds físiques i d'unitats	25
2. TAULES DE MAGNITUDS FÍSQUES	27
2.1. Espai i temps	28
2.2. Mecànica clàssica	29
2.3. Electricitat i magnetisme	30
2.4. Mecànica quàntica i química quàntica	32
Teoria <i>ab initio</i> del camp autoconsistent de Hartree-Fock (SFC <i>ab initio</i> )	34
Teoria SCF de Hartree-Fock-Roothaan, basada en orbitals moleculars desenvolupats com a combinacions lineals de funcions de base d'orbitals atòmics (teoria CLOA-OM o LCAO-MO)	36

2.5.	Àtoms i molècules	37
2.6.	Espectroscòpia	40
	Símbols dels operadors de moment angular i dels nombres quàntics	43
	Símbols dels operadors de simetria i marques de les espècies de simetria	45
	I) Operadors de simetria en coordenades fixes a l'espai	45
	II) Operadors de simetria en coordenades fixes en la molècula (símbols de Schönflies)	46
	Altres símbols i convencions aplicats en espectroscòpia òptica	46
	I) Símbols dels termes dels estats atòmics	46
	II) Símbols dels termes dels estats moleculars	47
	III) Notació per a les transicions espectroscòpiques	48
	IV) Presentació dels espectres	49
2.7.	Radiació electromagnètica	49
	Magnituds i símbols relatius a la mesura de la intensitat d'absorció	54
2.8.	Estat sòlid	57
	Símbols per a plans i direccions en cristalls	60
	I) Símbols del reticle cristal·lí	60
	II) Símbols de Herman-Maugin d'operacions de simetria	60
2.9.	Termodinàmica estadística	61
2.10.	Química general	62
	Altres símbols i convencions en química	65
	I) Símbols per a partícules i reaccions nuclears	65
	II) Símbols químics dels elements	65
	III) Fórmules químiques	67
	IV) Equacions de les reaccions químiques	68
	V) Quantitat de substància i especificació d'entitats	69
	VI) Estats d'agregació	70
2.11.	Termodinàmica química	71
	Altres símbols i convencions en termodinàmica química	75
	I) Símbols emprats com a subíndexs per a indicar un procés químic o una reacció química	75
	II) Superíndexs recomanats	76
	III) Exemples d'ús d'aquests símbols	76
	IV) Estats estàndard	78
	V) Pressions, molalitats i concentracions en l'estat estàndard	79
	VI) Propietats termodinàmiques	80
2.12.	Cinètica química	80
2.13.	Electroquímica	83
	Convencions referents als signes de les diferències de potencial elèctric, les forces electromotrius i el potencial d'elèctrode	86
	I) Diferència de potencial elèctric d'una pila galvànica	86
	II) Potencial d'elèctrode (potencial d'una reacció electroquímica)	88
	III) Definició operacional de pH	88

2.14.	Química col·loïdal i de superfícies	90
	Recomanacions addicionals	91
2.15.	Propietats de transport	92
3.	DEFINICIONS I SÍMBOLS DE LES UNITATS	95
3.1.	El sistema internacional d'unitats (SI)	95
3.2.	Definicions de les unitats SI de base	95
3.3.	Noms i símbols de les unitats SI de base	96
3.4.	Unitats SI derivades que tenen noms i símbols especials	97
3.5.	Unitats SI derivades per a altres magnituds	98
3.6.	Prefixos del sistema internacional (prefixos SI)	99
3.7.	Unitats que s'utilitzen conjuntament amb les de l'SI	100
3.8.	Unitats atòmiques	101
3.9.	Magnituds adimensionals	102
	Fracçons (valors relatius, rendiments, eficiències)	102
	Usos no recomanables	103
	Unitats de magnituds logarítmiques: neper, bel i decibel	104
4.	SÍMBOLS MATEMÀTICS RECOMANATS	107
4.1.	Tipografia dels nombres i dels símbols matemàtics	107
4.2.	Símbols, operadors i funcions	109
5.	CONSTANTS FÍSiques FONAMENTALS	113
	Valors de constats matemàtiques comunes	114
6.	PROPIETATS DE PARTÍCULES, ELEMENTS I NÚCLIDS	117
6.1.	Propietats d'algunes partícules	117
6.2.	Pesos atòmics estàndard dels elements (2007)	119
6.3.	Propietats dels núclids	123
7.	LA CONVERSIÓ D'UNITATS	135
7.1.	L'ús del càlcul de magnituds	135
7.2.	Taules de conversió d'unitats (Factors de conversió de pressió, <i>segona pàgina de la guarda posterior</i> ; factors de conversió d'energia, <i>tercera pàgina de la guarda posterior</i> )	140
7.3.	Els sistemes ues, uem, gaussià i d'unitats atòmiques	148
	I) Canvi a magnituds i equacions no racionalitzades	149
	II) El sistema ues	150
	III) El sistema uem	151
	IV) El sistema gaussià	152
	V) Les unitats atòmiques	153
7.4.	Transformació de les equacions de la teoria electromagnètica entre l'SI, la forma no racionalitzada de quatre magnituds i la forma gaussiana	155

8. ABREVIACIONS	159
9. REFERÈNCIES	171
9.1. Fonts primàries	171
9.2. Referències de la IUPAC	173
9.3. Altres referències	175
ÍNDIXS	179
Alfabet grec	180
Índex de símbols	181
Símbols especials	203
Índex de mots català-anglès	205
Índex de mots anglès-català	243
Notes	285
Factors de conversió de pressió	<i>guarda posterior, segona</i>
Factors de conversió d'energia	<i>guarda posterior, tercera</i>

NOTES

## FACTORS DE CONVERSIÓ DE PRESSIÓ

Pa	kPa	bar	atm	Torr	psi
1 Pa =	1	$10^{-5}$	$9,869\ 23 \times 10^{-6}$	$7,500\ 62 \times 10^{-3}$	$1,450\ 38 \times 10^{-4}$
1 kPa =	$10^3$	$10^{-2}$	$9,869\ 23 \times 10^{-3}$	7,500 62	0,145 038
1 bar =	$10^5$	1	0,986 923	750,062	145,038
1 atm =	101,325	1,013 25	1	760	14,695 9
1 Torr =	133,322	$1,333\ 22 \times 10^{-3}$	$1,315\ 79 \times 10^{-3}$	1	$1,933\ 67 \times 10^{-2}$
1 psi =	6 894,76	$6,894\ 76 \times 10^{-2}$	$6,804\ 60 \times 10^{-2}$	51,715 07	1

Exemples d'ús d'aquesta taula:

$$1 \text{ bar} = 0,986\ 923 \text{ atm}$$

$$1 \text{ Torr} = 133,322 \text{ Pa}$$

*Nota:* 1 mmHg = 1 Torr, amb més precisió que  $2 \times 10^{-7}$  Torr (vegeu la p. 141).

## FACTORS DE CONVERSIÓ D'ENERGIA

$$E = h\nu = hc\tilde{\nu} = kT; E_m = LE$$

	Nombre d'ona $\tilde{\nu}$		Freqüència $\nu$		Energia $E$		Energia molar $E_m$		Temperatura $T$	
	$\text{cm}^{-1}$		MHz		aJ	eV	$E_h$	kJ/mol	kcal/mol	K
$\tilde{\nu}$ : 1 $\text{cm}^{-1}$	$\hat{=}$ 1		$2,997\,925 \times 10^4$		$1,986\,447 \times 10^{-5}$	$1,239\,842 \times 10^{-4}$	$4,556\,335 \times 10^{-6}$	$11,962\,66 \times 10^{-3}$	$2,859\,14 \times 10^{-3}$	1,438 769
$\nu$ : 1 MHz	$\hat{=}$ $3,335\,64 \times 10^{-5}$	1	1		$5,626\,076 \times 10^{-10}$	$4,135\,669 \times 10^{-9}$	$1,519\,830 \times 10^{-10}$	$3,990\,313 \times 10^{-7}$	$9,537\,08 \times 10^{-8}$	$4,799\,22 \times 10^{-5}$
1 aJ	$\hat{=}$ 50 341,1		$1,509\,189 \times 10^9$		1	6,241 506	0,229 371 0	602,213 7	143,932 5	$7,242\,92 \times 10^4$
$E$ : 1 eV	$\hat{=}$ 8 065,54		$2,417\,988 \times 10^8$		0,160 217 7	1	$3,674\,931 \times 10^{-2}$	96,485 3	23,060 5	$1,160\,45 \times 10^4$
1 $E_h$	$\hat{=}$ 219 474,63		$6,579\,684 \times 10^9$		4,359 748	27,211 4	1	2 625,500	627,510	$3,157\,73 \times 10^5$
1 kJ/mol	$\hat{=}$ 83,593 5		$2,506\,069 \times 10^6$		$1,660\,540 \times 10^{-3}$	$1,036\,427 \times 10^{-2}$	$3,808\,798 \times 10^{-4}$	1	0,239 006	120,272
$E_m$ : 1 kcal/mol	$\hat{=}$ 349,755		$1,048\,539 \times 10^7$		$6,947\,700 \times 10^{-3}$	$4,336\,411 \times 10^{-2}$	$1,593\,601 \times 10^{-3}$	4,184	1	503,217
$T$ : 1 K	$\hat{=}$ 0,695 039		$2,083\,67 \times 10^4$		$1,380\,658 \times 10^{-5}$	$8,617\,38 \times 10^{-5}$	$3,166\,83 \times 10^{-6}$	$8,314\,51 \times 10^{-3}$	$1,987\,22 \times 10^{-3}$	1

Exemples d'ús de la taula:

$$1 \text{ aJ} \hat{=} 50,341 \text{ cm}^{-1}$$

$$1 \text{ eV} \hat{=} 96,485 \text{ kJ mol}^{-1}$$

El símbol  $\hat{=}$  significa 'correspon a' o 'és equivalent a'.