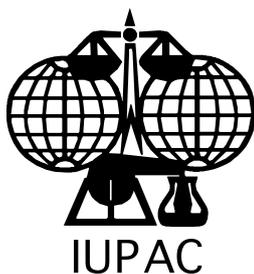


INTERNATIONAL UNION OF PURE AND APPLIED CHEMISTRY

Divisione di Chimica Fisica e Biofisica



Grandezze, Unità di Misura e Simboli
in Chimica Fisica
Terza Edizione

Preparata per la pubblicazione da

E. Richard Cohen	Tomislav Cvitaš	Jeremy G. Frey
Bertil Holmström	Kozo Kuchitsu	Roberto Marquardt
Ian Mills	Franco Pavese	Martin Quack
Jürgen Stohner	Herbert L. Strauss	Michio Takami
Anders J Thor		

La prima e seconda edizione erano state preparate per la pubblicazione da

Ian Mills	Tomislav Cvitaš	
Klaus Homann	Nikola Kallay	Kozo Kuchitsu

*Traduzione Italiana Terza Edizione 2010 preparata da
Franco Pavese*

IUPAC 2009/2010
(traduzione italiana 2011)

RSCPublishing

Prof. E. Richard Cohen
17735, Corinthian Drive
Encino, CA 91316-3704
USA
email: ercohen@aol.com

Prof. Tom Cvitaš
University of Zagreb
Dipartimento di Chimica
Horvatovac 102a
HR-10000 Zagreb
Croatia
email: cvitas@chem.pmf.hr

Prof. Jeremy G. Frey
University of Southampton
Dipartimento di Chimica
Southampton, SO 17 1BJ
United Kingdom
email: j.g.frey@soton.ac.uk

Prof. Bertil Holmström
Ulveliden 15
SE-41674 Göteborg
Sweden
email: bertilh@brikks.com

Prof. Kozo Kuchitsu
Tokyo University of Agriculture
and Technology
Graduate School of BASE
Naka-cho, Koganei, Tokyo 184-8588
Japan
email: kuchitsu@cc.tuat.ac.jp

Prof. Roberto Marquardt
Dipartimento di Chimica Quantistica
Université Louis Pasteur
4, Rue Blaise Pascal
F-67000 Strasbourg
France
email: roberto.marquardt@chimie.u-strasbg.fr

Prof. Ian Mills
University of Reading
Dipartimento di Chimica
Reading, RG6 6AD
United Kingdom
email: i.m.mills@rdg.ac.uk

Dr. Franco Pavese
National Research Council of Italy, Istituto di
Metrologia G.Colonnetti (CNR-IMGC), dal 2006
Istituto Nazionale di Ricerca Metrologica (INRIM)
strada delle Cacce 73-91
I-10135 Torino
Italia
email: frpavese@gmail.com, frpavese@yahoo.com

Prof. Martin Quack
ETH Zürich
Chimica Fisica
CH-8093 Zürich
Switzerland
email: martin@quack.ch oppure
quack@ir.phys.chem.ethz.ch

Prof. Jürgen Stohner
ZHAW Zürich University of Applied Sciences
ICBC Institute of Chemistry & Biological Chemistry
Campus Reidbach T, Einsiedlerstr. 31
CH-8820 Wädenswil
Switzerland
email: sthj@zhaw.ch oppure @ir.phys.chem.ethz.ch

Prof. Herbert L. Strauss
University of California
Berkeley, CA 94720-1460
USA
email: hls@berkeley.edu

Prof. Michio Takami
3-10-8 Atago
Niiza, Saitama 352-0021
Japan
email: takamimy@d6.dion.ne.jp

Dr. Anders J Thor
Segretario del ISO/TC 12
SIS Swedish Standards Institute
Sankt Paulsgatan 6
SE-11880 Stockholm, Sweden
email: anders.j.thor@sis.se

INDICE	v
PREFAZIONE	ix
INTRODUZIONE STORICA	xi
1 GRANDEZZE FISICHE ED UNITÀ DI MISURA	1
1.1 Grandezze fisiche e calcolo per grandezze	3
1.2 Grandezze base e grandezze derivate	4
1.3 Simboli delle grandezze fisiche ed unità di misura	5
1.3.1 Regole generali per i simboli delle grandezze	5
1.3.2 Regole generali per i simboli delle unità di misura	5
1.4 Uso delle parole “estensivo”, “intensivo”, “specifico” e “molare”	6
1.5 Prodotti e quozienti di grandezze fisiche e di unità di misura	7
1.6 Uso del corsivo e dei caratteri normali per i simboli nelle pubblicazioni scientifiche	7
2 TAVOLE DELLE GRANDEZZE FISICHE	11
2.1 Spazio e tempo	13
2.2 Meccanica classica	14
2.3 Eletticità e magnetismo	16
2.4 Meccanica quantistica e chimica quantistica	18
2.4.1 Teoria ab initio auto-coerente del campo di Hartree-Fock (ab initio SCF)	20
2.4.2 Teoria SCF di Hartree-Fock-Roothaan, che usa gli orbitali molecolari espansi come combinazioni lineari delle funzioni di base degli orbitali atomici (teoria LCAO-MO)	21
2.5 Atomi e molecole	22
2.6 Spettroscopia	25
2.6.1 Simboli per gli operatori di momento angolare e numeri quantistici	30
2.6.2 Simboli per operatori di simmetria ed indici per le specie di simmetria	31
2.6.3 Altri simboli e convenzioni in spettroscopia ottica	32
2.7 Radiazione elettromagnetica	34
2.7.1 Grandezze e simboli riguardanti la misura dell'intensità di assorbimento	38
2.7.2 Convenzioni per le intensità di assorbimento nelle fasi condensate	40
2.8 Stato solido	42
2.8.1 Simboli per i piani e le direzioni nei cristalli	44
2.9 Termodinamica statistica	45
2.10 Chimica generale	47
2.10.1 Altri simboli e convenzioni in chimica	49
2.11 Chimica termodinamica	56
2.11.1 Altri simbolo e convenzioni in chimica termodinamica	59
2.12 Cinetica chimica e fotochimica	63
2.12.1 Altri simboli, termini e convenzioni usate in cinetica chimica	68
2.13 Elettrochimica	70
2.13.1 Convenzioni per i segni e le notazioni in elettrochimica	73
2.14 Chimica dei colloidi e delle superfici	77
2.14.1 Struttura della superficie	79
2.15 Proprietà di trasporto	81
2.15.1 Numeri caratteristici di trasporto: grandezze di dimensione uno	82

3	DEFINIZIONI E SIMBOLI PER LE UNITÀ DI MISURA	83
3.1	Il Sistema Internazionale delle Unità di Misura (SI)	85
3.2	Nomi e simboli delle unità base SI	86
3.3	Definizioni delle unità base SI	87
3.4	Unità SI derivate con nomi e simboli speciali	89
3.5	Unità SI derivate per altre grandezze	90
3.6	Prefissi SI e prefissi per multipli binari	91
3.7	Unità non SI accettate per l'uso nel SI	92
3.8	Unità coerenti e controllo delle dimensioni	93
3.9	Costanti fisiche fondamentali usate come unità di misura	94
3.9.1	Unità atomiche	94
3.9.2	Le equazioni della chimica quantistica in termini di grandezze ridotte usando le unità atomiche	95
3.10	Grandezze adimensionate	97
3.10.1	Frazioni (valori relativi, stime ed efficienze)	97
3.10.2	Usi non ammessi	97
3.10.3	Unità per grandezze logaritmiche: neper, bel e decibel	98
4	SIMBOLI MATEMATICI RACCOMANDATI	101
4.1	La scrittura di numeri e simboli matematici	103
4.2	Simboli, operatori e funzioni	105
5	COSTANTI FISICHE FONDAMENTALI	109
6	PROPRIETÀ DELLE PARTICELLE, ELEMENTI E NUCLIDI	113
6.1	Proprietà di particelle scelte	115
6.2	Pesi atomici standard degli elementi (2005)	117
6.3	Proprietà dei nuclidi	121
7	CONVERSIONE DI UNITÀ DI MISURA	129
7.1	L'uso del calcolo per grandezze	131
7.2	Tabelle di conversione per le unità di misura	135
7.3	I sistemi esu, emu, Gaussiano e delle unità atomiche, in relazione al SI	143
7.4	Trasformazione delle equazioni della teoria elettromagnetica tra le forme ISQ(SI) e Gaussiana	146
8	VALUTAZIONE DELL'INCERTEZZA	149
8.1	Valutazione dell'incertezza di una singola grandezza misurata	151
8.2	Propagazione dell'incertezza per misure non correlate	153
8.3	Valutazione dell'incertezza in termini di intervalli di confidenza	154
9	ABBREVIAZIONI ED ACRONIMI	155
10	RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI	165
10.1	Fonti primarie	167
10.2	Fonti secondarie	169

11 ALFABETO GRECO	179
12 INDICE DEI SIMBOLI USATI	181
13 INDICE PER SOGGETTO	195
NOTE	231
FATTORI DI CONVERSIONE DELLA PRESSIONE	233
FATTORI NUMERICI DI CONVERSIONE DELL'ENERGIA	
IUPAC, TAVOLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI	

PREFAZIONE

Lo scopo di questo manuale è quello di migliorare la qualità dello scambio scientifico tra i lettori esperti in discipline diverse e di diversi Paesi. Mentre la quantità della letteratura scientifica disponibile cresce, ogni disciplina tende a trincerarsi dietro al proprio gergo linguistico. Questo libro tenta di fornire un sommario leggibile dei termini e dei simboli usati corredati da una breve definizione facilmente comprensibile. Questa terza edizione riflette l'esperienza di coloro che hanno contribuito alle due edizioni precedenti e siamo loro grati per i molti utili commenti che abbiamo ricevuto. La maggior parte del materiale di questa edizione è "standard", ma su alcune definizioni e simboli non vi è ancora un'accettazione universale. In questi casi, abbiamo cercato di fornire una lista di alternative accettabili. La bibliografia riporta pubblicazioni di IUPAC ed altre fonti nelle quali alcuni di questi problemi di notazione sono discussi. IUPAC è l'acronimo dell'Unione Internazionale di Chimica Pura ed Applicata.

Un esempio paradigmatico delle conseguenze della confusione tra unità di misura è quello fornito dalla perdita del satellite NASA degli USA, il "Mars Climate Orbiter" (MCO). Il Mishap Investigation Board (Phase I Report, November 10, 1999)¹ trovò che alla radice delle cause che provocarono la perdita di MCO fu "il mancato uso delle unità metriche nel codificare un programma nel software di terra". L'impulso inviato era stato codificato nella 'Imperial unit' libbra(forza)-secondo (lbf-s) invece che nell'unità metrica Newton(forza)-secondo (N-s). Ciò causò un errore di un fattore 4.45 che spinse ovviamente il satellite fuori orbita.² Invitiamo caldamente chi userà questo libro a definire sempre esplicitamente ed esattamente i termini, le unità di misura ed i simboli usati.

Questa edizione è stata compilata in Latex da Martin Quack e Jürgen Stohner. L'intero testo del manuale nella sua versione inglese sarà disponibile gratuitamente su Internet qualche tempo dopo la pubblicazione del libro e sarà accessibile sul sito web di IUPAC, <http://www.iupac.org>. Suggerimenti e commenti sono ben accetti e possono essere inviati a

IUPAC Secretariat
PO Box 13757
Research Triangle Park, NC 27709-3757, USA
email: secretariat@iupac.org

Correzioni al manuale saranno rese pubbliche periodicamente.

Il libro è stato sistematicamente aggiornato e nuove sezioni sono state aggiunte rispetto alle edizioni precedenti. Come in quelle, il primo capitolo è dedicato all'uso del calcolo per grandezze per trattare grandezze fisiche e le regole generali del simbolismo delle grandezze e delle unità di misura, ed include una descrizione più dettagliata dell'uso dei caratteri corsivi e grassetto nella stampa in materie scientifiche. Il secondo capitolo è dedicato agli elenchi dei simboli delle grandezze in un vasto ventaglio di argomenti di chimica fisica. Nuove parti di questo capitolo riguardano una sezione sulle strutture superficiali. Il terzo capitolo descrive l'uso del Sistema internazionale delle unità di misura (SI) e di alcuni altri sistemi, come quello delle unità atomiche. Il Capitolo 4 raccoglie i simboli matematici ed indica il loro uso nella stampa di argomenti scientifici. Il Capitolo 5 riporta l'aggiornamento 2006 delle costanti fisiche sperimentali, ed il Capitolo 6 le proprietà delle particelle elementari, degli elementi e dei nuclidi. Seguono le formule di conversione tra sistemi di unità di misura nel Capitolo 7, incluse le varie forme delle equazioni dell'elettricità e del magnetismo. Il Capitolo 8 è completamente nuovo e riportati concetti fondamentali sul trattamento dell'incertezza nelle misure fisiche ed il relativo simbolismo. Il Capitolo 9 è dedicato alle abbreviazioni ed agli acronimi. Il Capitolo 10 contiene la bibliografia ed il Capitolo 11 elenca l'alfabeto greco. I Capitoli finali 12 e 13 contengono l'indice dei simboli e l'indice per soggetto. La tavola periodica degli elementi IUPAC è riportata all'interno della copertina posteriore, mentre la pagina precedente riporta i fattori di conversione tra le unità più frequentemente utili, della pressione e dell'energia.

¹ Il Rapporto MCO si trova al link ftp://ftp.hq.nasa.gov/pub/pao/reports/1999/MCO_report.pdf.

² Impulso (variazione del momento) significa qui un integrale nel tempo della forza.

Molte persone hanno contribuito a questo volume. Quelle più direttamente responsabili sono elencate nell'Introduzione Storica. Molti dei membri della Commissione IUPAC I.1 hanno contribuito attivamente e continuativamente anche per molto tempo dopo il termine della loro funzione di membri della Commissione. Si vuole anche ringraziare i membri di altre Commissioni delle Divisioni di Chimica Fisica: Cinetica Chimica, Chimica dei Colloidi e delle Superfici; Elettrochimica, Spettroscopia e Termodinamica, che hanno contribuito alle rispettive Sezioni del libro.

Si ringrazia anche chi, avendo contribuito, fosse stato inavvertitamente omissso nelle citazioni precedenti.

*Commissione sui Simboli,
Terminologia ed Unità di Misura in Chimica Fisica*

Jeremy G. Frey e Herbert L. Strauss

PREFAZIONE ALL'EDIZIONE IN ITALIANO

L'impegno ad effettuare la traduzione in italiano di questo libro è stato preso da F. Pavese, a quel tempo già membro della Commissione, sin dalla fine della seconda edizione. Tuttavia, pur avendola già in gran parte completata, egli decise di attendere la terza edizione, anche per la sua disponibilità in LaTeX, che rende la traduzione stessa più sicura e la sua veste editoriale identica all'originale.

Questa traduzione è stata autorizzata dall'Organizzazione aderente per l'Italia, il Consiglio Nazionale delle Ricerche, e da IUPAC.

Devo ringraziare innanzitutto il Professor Luigi Campanella, allora rappresentante italiano del CNR in IUPAC e poi anche Presidente della Società Chimica Italiana fino al 2010, per l'incoraggiamento datomi alla traduzione e per l'aiuto dato per organizzare la revisione della traduzione. Ringrazio caldamente, a questo proposito, il Dott. Mario Rampichini ed il Dott. Sergio Palazzi per la preziosissima opera di rilettura e correzione del testo da me tradotto, e la Prof.ssa. Maria Grazia Vicario per la revisione del Capitolo 8.

Ringrazio anche il Dr. Jürgen Stohner del ETH di Zurigo per i preziosi consigli nell'uso di LaTeX.

Questa versione 1.0 è resa disponibile gratuitamente in base al Copyright Creative Commons 4.0 CC BY-NC-ND.

Sono graditi commenti e segnalazioni. Franco Pavese

INTRODUZIONE STORICA

Il *Manuale dei Simboli e della Terminologia delle Grandezze ed Unità di Misura della Chimica Fisica* [1.a], di cui questo libro è il diretto successore, fu preparato la prima volta per la pubblicazione, promosso dalla Divisione di Chimica Fisica di IUPAC, da M. L. McGlashan nel 1969, quando egli era il Presidente della Commissione per i Simboli, la Terminologia e Unità di Misura (I.1). Egli fornì un contributo essenziale per il raggiungimento dell'obiettivo che egli descrisse nella prefazione alla prima edizione, cioè quello di "assicurare chiarezza e precisione ed un ampio consenso nell'uso dei simboli tra i chimici di Paesi diversi, dei chimici tra loro e tra i chimici e gli ingegneri e tra gli editori delle riviste scientifiche". La seconda edizione del manuale, preparata per la pubblicazione da M. A. Paul nel 1973 [1.b], e la terza edizione preparata da D. H. Whiffen nel 1976 [1.c], furono revisioni che tennero conto dei vari sviluppi del Sistema Internazionale delle Unità di Misura (SI) e dei più recenti sviluppi nella terminologia.

La prima edizione di *Grandezze, Unità di Misura e Simboli in Chimica Fisica* pubblicata nel 1988 [2.a] fu una sostanziale revisione ed estensione dei precedenti manuali. La decisione di impegnarsi in questo progetto, originariamente proposto da N. Kallay fu presa all'Assemblea Generale IUPAC di Leuven nel 1981, quando D. R. Lide era Presidente della Commissione. Il gruppo di lavoro fu stabilito poi nella riunione del 1983 di Lyngby, quando K. Kuchitsu era il Presidente ed il progetto ebbe un forte supporto per tutto il periodo successivo da tutti i membri correnti e passati della Commissione I.1 e di altre Commissioni di Chimica Fisica, in particolare di D. R. Lide, D. H. Whiffen e N. Sheppard.

L'allargamento degli argomenti incluse parte del materiale prima incluso in Appendice [1.d–1.k]; tutte le nuove risoluzioni e raccomandazioni sulle unità di misura delle Conferenze Generali dei Pesi e Misure (CGPM); le raccomandazioni della Unione Internazionale di Fisica Pura ed Applicata (IUPAP) del 1978 e del Comitato Tecnico 12 della Organizzazione Internazionale per la Normativa, *Grandezze, unità di misura, simboli, fattori di conversione* (ISO/TC 12). Le tabelle delle grandezze fisiche (Capitolo 2) furono estese per includere le equazioni di definizione e le unità di misura SI per ciascuna grandezza. Anche lo stile fu cambiato un poco, da un libro di regole ad un manuale di consigli ed assistenza per chi deve ogni giorno applicare tali regole. Esempi di ciò sono l'inclusione di note estese e di testi di spiegazione nel Capitolo 2, l'introduzione al calcolo per grandezze e le tabelle dei fattori di conversione tra unità di misura SI e non SI, e le equazioni del Capitolo 7.

La seconda edizione (1993) fu una revisione ed una versione più estesa della precedente. Le revisioni furono basate sulle più recenti risoluzioni del CGPM [3]; sulle nuove raccomandazioni di IUPAP [4]; sulle nuove norme internazionali contenute nella ISO 31 [5,6]; su alcune delle raccomandazioni pubblicate da altre Commissioni IUPAC; su numerosi commenti ricevuti dai chimici di tutto il mondo. La seconda edizione rivista fu promossa e portata a compimento specialmente da Ian Mills e da Tom Cvitaš con sostanziali contributi di Robert Alberty, Kozo Kuchitsu, Martin Quack e degli altri membri della Commissione su Simboli, Terminologia ed Unità di Misura di IUPAC.

Il manuale ha trovato un vasto consenso nella comunità dei chimici e diverse edizioni sono state tradotte in lingue nazionali, quali il russo [2.c], l'ungherese [2.d], il giapponese [2.e], il tedesco [2.f], il rumeno [2.g], lo spagnolo [2.h] e il catalano [2.i]. Ampie sue porzioni sono state riprodotte nelle edizioni 71ma e successive del *Handbook of Chemistry and Physics* pubblicato da CRC Press.

Il lavoro di revisione della seconda edizione cominciò immediatamente dopo la sua pubblicazione e, tra il 1995 ed il 1997, fu discusso il cambio di titolo in "Grandezze, Unità di Misura e Simboli in Chimica Fisica" e fu deciso di effettuare una completa revisione di tutte le parti. Si decise anche che il libro avrebbe dovuto riguardare la maggior parte possibile dei campi di quella che viene chiamata "Chimica Fisica" come pure del campo chiamato "Fisica Chimica". Ciò per tenere in considerazione un più ampio campo interdisciplinare dove il confine tra fisica e chimica è quasi scomparso [10]. Allo stesso tempo fu deciso di produrre il libro in un formato elettronico tale da poter essere direttamente accessibile in futuro per via informatica, qualche tempo dopo la disponibilità della versione stampata. L'appoggio a tale decisione venne dalla Segreteria IUPAC del Research Triangle Park, NC (USA) (John W. Jost). Il lavoro pratico riguardante le revisioni fu condotto presso il ETH di Zurigo, provenendo le revisioni stesse di questa edizione in massima parte dal gruppo di editori indicati in copertina. La nuova edizione è stata ottenuta in accordo con la nuova struttura di IUPAC, che prevede la collaborazione di partecipanti ad un progetto e non solo dei membri della commissione. La struttura base di questa edizione è stata definita in una riunione del gruppo di lavoro del progetto tenutasi a Engelberg in Svizzera nel marzo 1999, con ulteriori revisioni discusse alla riunione di Berlino dell'agosto

1999 e successivamente. Nel 2001 fu poi deciso di mantenere il vecchio titolo. In questa edizione l'intero testo e tutte le tabelle sono state riviste, anche sostanzialmente in molti capitoli. Il lavoro editoriale è stato condotto presso il ETH di Zurigo, dove Jürgen Stohner ha coordinato i vari contributi e correzioni ricevuti dai membri correnti della gruppo del progetto e preparato la versione elettronica 'print-ready' dell'intero testo. Le modifiche maggiori rispetto alle edizioni precedenti riguardano un aggiornamento sostanziale e completo dei valori delle costanti fondamentali, nuove sezioni sull'incertezza nella misura delle grandezze fisiche, sulle grandezze adimensionali, sui simboli matematici, oltre a mutamenti in numerose altre sezioni.

Al termine di questo excursus storico dobbiamo far riferimento a quello che può essere considerata la tradizione di questo manuale. Non è scopo di questo manuale di fornire un elenco di raccomandazioni in forma tassativa. Si è invece sempre seguito il principio che questo manuale deve aiutare l'utilizzatore in ciò che si potrebbe chiamare una "buona pratica nell'uso del linguaggio scientifico". Se ci sono più usi o convenzioni consolidate, esse sono tutte menzionate, pur dando la preferenza ad una, quando ciò fosse utile, ma lasciando intatta la varietà, se esse non rischiava di produrre solo confusione. In pochi casi sono anche indicati possibili miglioramenti alle convenzioni o di linguaggio, indicando i relativi riferimenti bibliografici, anche se non così noti, ma senza farne oggetto di specifiche raccomandazioni. Nei pochi casi in cui certi usi sono sconsigliati, vi sono ragioni molto forti che hanno portato a tale indicazione, e ci si aspetta che il lettore si adegui all'indicazione.

Zürich, 2007

Martin Quack

I membri della Commissione nel periodo dal 1963 al 2006, durante il quale le successive edizioni del manuale sono state preparate, sono stati i seguenti:

Membri titolari

Presidenti: 1963–1967 G. Waddington (USA); 1967–1971 M.L. McGlashan (UK); 1971–1973 M.A. Paul (USA); 1973–1977 D.H. Whiffen (UK); 1977–1981 D.R. Lide Jr (USA); 1981–1985 K. Kuchitsu (Giappone); 1985–1989 I.M. Mills (UK); 1989–1993 T. Cvitaš (Croazia); 1993–1999 H.L. Strauss (USA); 2000–2007 J.G. Frey (UK); 2008– R. Marquardt (Francia).

Segretari: 1963–1967 H. Brusset (Francia); 1967–1971 M.A. Paul (USA); 1971–1975 M. Fayard (Francia); 1975–1979 K.G. Weil (Germania); 1979–1983 I. Ansara (Francia); 1983–1985 N. Kallay (Croazia); 1985–1987 K.H. Homann (Germania); 1987–1989 T. Cvitaš (Croazia); 1989–1991 I.M. Mills (UK); 1991–1997, 2001–2005 M. Quack (Svizzera); 1997–2001 B. Holmström (Svezia).

Altri membri titolari

1975–1983 I. Ansara (Francia); 1965–1969 K.V. Astachov (Russia); 1963–1971 R.G. Bates (USA); 1963–1967 H. Brusset (Francia); 1985–1997 T. Cvitaš (Croazia); 1963 F. Daniels (USA); 1979–1981 D.H.W. den Boer (Olanda); 1981–1989 E.T. Denisov (Russia); 1967–1975 M. Fayard (Francia); 1997–2005 J. Frey (UK); 1963–1965 J.I. Gerassimov (Russia); 1991–2001 B. Holmström (Svezia); 1979–1987 K.H. Homann (Germania); 1963–1971 W. Jaenicke (Germania); 1967–1971 F. Jellinek (Olanda); 1977–1985 N. Kallay (Croazia); 1973–1981 V. Kellö (Cecoslovacchia); 1989–1997 I.V. Khudyakov (Russia); 1985–1987 W.H. Kirchhoff (USA); 1971–1979 J. Koefoed (Danimarca); 1979–1987 K. Kuchitsu (Giappone); 1971–1981 D.R. Lide Jr (USA); 1997–2001, 2006– R. Marquardt (Francia); 1963–1971 M.L. McGlashan (UK); 1983–1991 I.M. Mills (UK); 1963–1967 M. Milone (Italia); 1967–1973 M.A. Paul (USA); 1991–1999, 2006– F. Pavese (Italia); 1963–1967 K.J. Pedersen (Danimarca); 1967–1975 A. Perez-Masiá (Spagna); 1987–1997 and 2002–2005 M. Quack (Svizzera); 1971–1979 A. Schuyff (Olanda); 1967–1970 L.G. Sillén (Svezia); 2008– J. Stohner (Svizzera); 1989–1999 and 2002–2005 H.L. Strauss (USA); 1995–2001 M. Takami (Giappone); 1987–1991 M. Tasumi (Giappone); 1963–1967 G. Waddington (USA); 1981–1985 D.D. Wagman (USA); 1971–1979 K.G. Weil (Germania); 1971–1977 D.H. Whiffen (UK); 1963–1967 E.H. Wiebenga (Olanda).

Membri associati

1983–1991 R.A. Alberty (USA); 1983–1987 I. Ansara (Francia); 1979–1991 E.R. Cohen (USA); 1979–1981 E.T. Denisov (Russia); 1987–1991 G.H. Findenegg (Germania); 1987–1991 K.H. Homann (Germania); 1971–1973 W. Jaenicke (Germania); 1985–1989 N. Kallay (Croazia); 1987–1989 and 1998–1999 I.V. Khudyakov (Russia); 1979–1980 J. Koefoed (Danimarca); 1987–1991 K. Kuchitsu (Giappone); 1981–1983 D.R. Lide Jr (USA); 1971–1979 M.L. McGlashan (UK); 1991–1993 I.M. Mills (UK); 1973–1981 M.A. Paul (USA); 1999–2005 F. Pavese (Italia); 1975–1983 A. Perez-Masiá (Spagna); 1997–1999 M. Quack (Svizzera); 1979–1987 A. Schuyff (Olanda); 1963–1971 S. Seki (Giappone); 2000–2001 H.L. Strauss (USA); 1991–1995 M. Tasumi (Giappone); 1969–1977 J. Terrien (Francia); 1994–2001 A J Thor (Svezia); 1975–1979 L. Villena (Spagna); 1967–1969 G. Waddington (USA); 1979–1983 K.G. Weil (Germania); 1977–1985 D.H. Whiffen (UK).

Rappresentanti nazionali

Numerosi rappresentanti nazionali hanno partecipato ai lavori della Commissione nell'arco di molti anni. Non se ne fornisce qui la lista.

1 GRANDEZZE FISICHE E UNITÀ

1.1 GRANDEZZE FISICHE E CALCOLO PER GRANDEZZE

Il valore di una *grandezza fisica* Q è espresso come il prodotto di un *valore numerico* $\{Q\}$ e di una *unità di misura* $[Q]$

$$Q = \{Q\} [Q] \quad (1)$$

Né il nome della grandezza fisica né il simbolo usato per indicarlo implicano la scelta di una particolare unità di misura (vedi nota ¹ a piè di p. 4).

Grandezze fisiche, valori numerici ed unità di misura possono tutte essere trattate secondo le regole ordinarie dell'algebra. Perciò si può scrivere, per esempio, per la lunghezza d'onda λ di una delle righe gialle del sodio

$$\lambda = 5.896 \times 10^{-7} \text{ m} = 589.6 \text{ nm} \quad (2)$$

dove m è il simbolo dell'unità di misura della lunghezza chiamata metro (in inglese 'metre' o 'meter', vedi Sez. 3.2 e 3.3, p. 86 e 87), nm è il simbolo del nanometro e le unità di misura metro e nanometro sono legate dall'equazione

$$1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m} \quad \text{oppure} \quad \text{nm} = 10^{-9} \text{ m} \quad (3)$$

L'equivalenza delle due espressioni per λ nell'Eq. (2) discende direttamente dal trattamento delle unità di misura con le regole dell'algebra e dal considerare identiche le espressioni 1 nm e 10^{-9} m nell'Eq. (3). La lunghezza d'onda può anche essere espressa nella forma

$$\lambda/\text{m} = 5.896 \times 10^{-7} \quad (4)$$

oppure

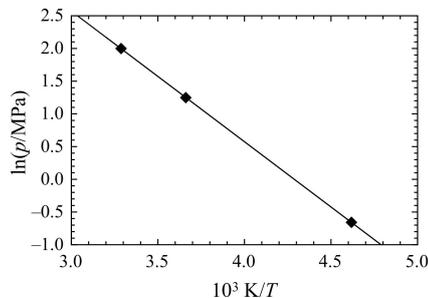
$$\lambda/\text{nm} = 589.6 \quad (5)$$

È utile infatti usare variabili che sono definite dalla divisione di una grandezza fisica per una particolare unità di misura. Per esempio, nel tabulare valori numerici di una grandezza fisica o nel contrassegnare gli assi di un grafico è particolarmente conveniente usare il quoziente di una grandezza fisica e dell'unità di misura: in tal modo i valori tabulati sono valori numerici puri, come nelle Eq. (4) e (5).

Esempio

$$\ln(p/\text{MPa}) = \frac{a + b/T}{a + b'(10^3 \text{ K}/T)} \quad (6)$$

T/K	$10^3 \text{ K}/T$	p/MPa	$\ln(p/\text{MPa})$
216.55	4.6179	0.5180	-0.6578
273.15	3.6610	3.4853	1.2486
304.19	3.2874	7.3815	1.9990



Si possono usare forme equivalenti invece di $10^3 \text{ K}/T$, come kK/T oppure $10^3 (T/\text{K})^{-1}$.

Le equazioni tra valori numerici dipendono dalla scelta della unità di misura, mentre le equazioni tra grandezze hanno il vantaggio di essere indipendenti da tale scelta [Nota edizione italiana: per un sistema di misura 'coerente' come quello SI]. Perciò l'uso di equazioni tra grandezze è in genere da preferire.

Il metodo qui descritto per trattare grandezze fisiche e le loro unità di misura è noto come *calcolo per grandezze* [11–13]. Il suo uso è raccomandato in ogni campo della scienza e della tecnologia. L'uso del calcolo per grandezze non implica la scelta di alcuna particolare unità di misura; peraltro uno dei vantaggi di tale calcolo è quello di rendere particolarmente semplice il cambiamento dell'unità di misura. Ulteriori esempi sull'uso del calcolo per grandezze sono riportati nella Sez. 7.1, p. 131 che riguarda i problemi relativi alla conversione di una unità di misura in un'altra.

1.2 GRANDEZZE BASE E GRANDEZZE DERIVATE

Convenzionalmente, il Sistema Internazionale delle Grandezze (SIG), sul quale il Sistema Internazionale delle Unità di Misura (SI) è fondato, è organizzato in un sistema dimensionale costruito attorno a sette *grandezze base*, ciascuna delle quali è considerata avere una propria specifica dimensione. Nel SI queste grandezze base, i principali simboli usati per indicarle e le loro dimensioni sono le seguenti:

<i>Grandezza base</i>	<i>Simbolo della grandezza</i>	<i>Simbolo della dimensione</i>
lunghezza	l	L
massa	m	M
tempo	t	T
corrente elettrica	I	I
temperatura termodinamica	T	Θ
quantità di sostanza	n	N
intensità luminosa	I_v	J

Tutte le altre grandezze sono chiamate *grandezze derivate* e sono considerate avere dimensioni derivate algebricamente dalle sette grandezze base mediante moltiplicazione e divisione di esse.

Esempio la dimensione dell'energia è $M L^2 T^{-2}$
Ciò può essere scritto anche usando il simbolo dim per dimensione (vedi nota ¹ a piè di questa pagina)

$$\dim(E) = \dim(m \cdot l^2 \cdot t^{-2}) = M L^2 T^{-2}$$

La grandezza *quantità di sostanza* è di speciale interesse in chimica. La quantità di sostanza è proporzionale ad un numero delle entità elementari specificate per la sostanza in esame. Il fattore di proporzionalità è uguale per tutte le sostanze; il suo reciproco è la *costante di Avogadro* (vedi Sez. 2.10, p. 47, Sez. 3.3, p. 88, e Capitolo 5, p. 111). L'unità SI della quantità di sostanza è la mole, definita in Sez. 3.3, p. 88. La grandezza fisica "quantità di sostanza" non deve mai essere chiamata "numero di moli", così come la grandezza fisica "massa" non è chiamata "numero di kilogrammi". Invece di "quantità di sostanza" in inglese è talvolta usato il termine "chemical amount", o il termine abbreviato "quantità", specialmente in espressioni del tipo "concentrazione in quantità" ("amount concentration") (vedi nota ² a piè di questa pagina), oppure è usato "quantità di N₂". Per un uso internazionale è anche stato suggerito il possibile uso del termine : "enpletia" [10] (dal greco, per similitudine con entalpia ed entropia).

Il numero e la scelta delle grandezze base è una pura convenzione. Altre grandezze potrebbero essere considerate più fondamentali, come la carica elettrica Q invece della corrente elettrica I .

$$Q = \int_{t_1}^{t_2} I dt \quad (7)$$

Tuttavia, nel SIG, la corrente elettrica stata scelta come grandezza base e l'ampere è l'unità di misura base nel SI. In fisica atomica e molecolare viene utilmente impiegata la così chiamata *unità atomica*(vedi Sez. 3.9, p. 94).

¹ Il simbolo $[Q]$ è stato usato in passato per *dimensione* di Q , ma questo simbolo è usato di preferenza per l'*unità di misura* di Q .

² La Divisione di Chimica Clinica della IUPAC ha raccomandato che "concentrazione di quantità di sostanza" sia abbreviato in "concentrazione di sostanza" [14].

1.3 SIMBOLI DELLE GRANDEZZE FISICHE E DELLE UNITÀ DI MISURA [5.a]

I nomi ed i simboli usati per denominare ed indicare le grandezze fisiche devono rimanere ben distinti dai nomi e simboli usati per denominare ed indicare le unità di misura. Nomi e simboli per molte grandezze sono riportati nel Capitolo 2, p. 11; i simboli ivi riportati sono *raccomandati*. Se altri simboli vengono eventualmente impiegati, essi devono essere chiaramente definiti. Nomi e simboli per le unità di misura sono riportati nel Capitolo 3, p. 83; i simboli per le unità di misura ivi indicati sono stabiliti dal Bureau International des Poids et Mesures (BIPM) ed il loro uso è *obbligatorio*.

1.3.1 Regole generali per i simboli delle grandezze

Il simbolo di una grandezza fisica deve essere formato da una singola lettera (vedi nota ¹ a piè di questa pagina) dell'alfabeto latino o greco (vedi Sez. 1.6, p. 7). Possono essere usate lettere maiuscole o minuscole. La lettera deve essere scritta in carattere corsivo. Se necessario, il simbolo può essere modificato da pedici o apici il cui significato deve essere specificato. Pedici ed apici che siano essi stessi simboli di grandezze o indici numerici devono anch'essi essere scritti in caratteri corsivi; altri apici e pedici devono essere scritti in caratteri normali (in inglese: Roman o upright).

<i>Esempi</i>	C_p	per capacità termica a pressione costante
	p_i	per pressione parziale della i -ma sostanza
ma	C_B	per capacità termica della sostanza B
	μ_B^α	per potenziale chimico della sostanza B in fase α
	E_k	per energia cinetica
	μ_r	per permeabilità relativa
	$\Delta_r H^\ominus$	per entalpia standard di reazione
	V_m	per volume molare
	A_{10}	per assorbanza decadica

Il significato dei simboli delle grandezze fisiche può essere ulteriormente specificato mediante l'uso di uno o più pedici o mediante informazioni a seguire inserite tra parentesi.

Esempi $\Delta_f S^\ominus(\text{HgCl}_2, \text{cr}, 25^\circ\text{C}) = -154.3 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
 $\mu_i = (\partial G / \partial n_i)_{T,p,\dots,n_j,\dots; j \neq i}$ or $\mu_i = (\partial G / \partial n_i)_{T,p,n_j \neq i}$

Vettori e matrici sono scritti in caratteri grassetto corsivo, ad esempio \mathbf{A}, \mathbf{a} . I tensori sono scritti in caratteri grassetto e del tipo a bastoncino (anche denominato sans-serif), ad esempio \mathbf{S}, \mathbf{T} . I vettori, in alternativa, possono essere caratterizzati sovrascrivendo una freccia, \vec{A}, \vec{a} ed i tensori di rango due sovrascrivendo una doppia freccia, $\vec{\vec{S}}, \vec{\vec{T}}$.

1.3.2 Regole generali per i simboli delle unità di misura

I simboli delle unità di misura devono essere scritti in caratteri normali (né corsivo né grassetto). Essi non devono essere alterati al plurale (ciò vale specialmente in alcune lingue diverse dall'italiano) e non devono essere seguiti dal punto fermo ad eccezione di quando sono l'ultimo carattere di una frase.

<i>Esempio</i>	$r = 10 \text{ cm}$, non cm . (nemmeno, in inglese, cms).
<i>Esempio</i>	numero di Reynolds, Re ; un altro esempio è pH (vedi Sez. 2.13 e 2.13.1 (viii), p. 70 e 75).

Quando tali simboli appaiono come fattori in un prodotto, essi devono essere distinti dagli altri mediante uno spazio, un segno di moltiplicazione o una parentesi.

¹ Rappresentano casi eccezionali certi numeri caratteristici o "grandezze adimensionate" usate in studi di processi di trasporto per i quali il simbolo riconosciuto internazionalmente consiste di due lettere (vedi Sez. 2.15.1, p. 82).

I simboli delle unità di misura devono essere scritti in lettere minuscole, a meno che derivino da un nome di persona nel qual caso iniziano con una lettera maiuscola. Un'eccezione è il simbolo per il litro che può essere una *elle* maiuscola o minuscola (vedi nota ² a piè di questa pagina).

Esempi m (metro), s (secondo), ma J (joule), Hz (hertz)

Multipli e submultipli decimali delle unità di misura possono essere indicati mediante prefissi, come indicato nella Sez. 3.6, p. 91.

Esempi nm (nanometro), MHz (megahertz), kV (kilovolt)

1.4 USO DEI TERMINI “ESTENSIVO”, “INTENSIVO”, “SPECIFICO”, “MOLARE”

Una grandezza che sia additiva per sistemi indipendenti e non interagenti è chiamata *estensiva*; esempi sono la massa m , il volume V , l'energia di Gibbs G . Una grandezza che è indipendente dall'estensione di un sistema è chiamata *intensiva*; esempi sono la temperatura T , la pressione p , il potenziale chimico (energia molare parziale di Gibbs) μ .

L'aggettivo *specifico* prima del nome di una grandezza estensiva è usato col significato *diviso per la massa*. Quando il simbolo della grandezza estensiva è una lettera maiuscola, il simbolo usato per indicare la grandezza specifica è spesso la corrispondente lettera minuscola.

Esempi volume, V , e
 volume specifico, $v = V/m = 1/\rho$ (dove ρ è la densità massica);
 capacità termica (a pressione costante), C_p , e
 calore specifico a pressione costante, $c_p = C_p/m$

ISO [5.a] e la Divisione di Chimica Clinica di IUPAC raccomandano sistematicamente nomi appositi per grandezze fisiche derivanti dalla divisione per la massa, volume, area e lunghezza che consistono nell'usare gli attributi massico oppure specifico, volumico, areico e lineico, rispettivamente. Inoltre, la Divisione di Chimica Clinica di IUPAC raccomanda l'uso dell'attributo entitico per grandezze derivanti dalla divisione per il numero di entità [14]. Quindi, per esempio, il volume specifico può diventare volume massico e la densità di carica superficiale può diventare carica areica.

L'aggettivo *molare* prima del nome di una grandezza estensiva in genere significa *diviso per la quantità di sostanza*. Il pedice m aggiunto al simbolo di una grandezza estensiva indica la corrispondente grandezza molare.

Esempi volume, V volume molare, $V_m = V/n$ (Section 2.10, p. 47)
 entalpia, H entalpia molare, $H_m = H/n$

Se il nome enpletico (vedi Sez. 1.2, p. 4) fosse accettato in luogo di “quantità di sostanza” si potrebbe usare, ad esempio, volume enpletico invece di volume molare. Il termine “molare” viola il principio che il nome di una quantità non può confondersi con quello dell'unità di misura (mole in questo caso). L'uso di enpletico risolverebbe il problema. È talora conveniente dividere tutte le grandezze estensive per la quantità di sostanza, in modo che diventino tutte intensive; il pedice m può essere ommesso se questa convenzione viene applicata ed è chiaramente detta senza possibilità di equivoci (vedi anche i simboli raccomandati per le grandezze parziali molari nella Sez. 2.11, p. 57, e Sez. 2.11.1 (iii), p. 60.)

In alcuni rari casi l'aggettivo *molare* ha un diverso significato, in particolare di *diviso per la concentrazione della quantità di sostanza*.

Esempi coefficiente di assorbimento, a
 coefficiente di assorbimento molare, $\varepsilon = a/c$ (vedi Sez. 2.7, nota 22, p. 37)
 conducibilità, κ
 conducibilità molare, $\Lambda = \kappa/c$ (vedi Sez. 2.13, p. 73)

² Tuttavia, solo la lettera minuscola l è usata da ISO e dalla International Electrotechnical Commission (IEC).

1.5 PRODOTTI E QUOZIENTI DI GRANDEZZE FISICHE ED UNITÀ DI MISURA

I prodotti di grandezze fisiche possono essere scritti in uno qualunque dei seguenti modi

$$a b \quad \text{oppure} \quad ab \quad \text{oppure} \quad a \cdot b \quad \text{oppure} \quad a \times b$$

e analogamente i quozienti possono essere scritti come

$$a/b \quad \text{oppure} \quad \frac{a}{b} \quad \text{oppure scrivendo il prodotto di } a \text{ e } b^{-1}, \text{ ad esempio } ab^{-1}$$

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

Non più di una linea di frazione (/) può essere usata in una espressione, a meno che si usino delle parentesi per eliminare l'ambiguità.

Esempio $(a/b)/c$ oppure $a/(b/c)$ (in generale il significato è differente), non $a/b/c$

Nel valutare combinazioni di molti fattori, le moltiplicazioni scritte senza il segno di moltiplicazione precedono la divisione, nel senso che a/bc va interpretato come $a/(bc)$ e non come $(a/b)c$; tuttavia in certi casi l'uso di parentesi è necessario per evitare ambiguità di interpretazione, per cui sono da evitare espressioni come a/bcd etc. Inoltre $a/b + c$ è da interpretare come $(a/b) + c$ e non come $a/(b+c)$. Anche in casi come questo è raccomandato l'uso di parentesi (necessarie nel caso $a/(b+c)$).

Prodotti e quozienti di unità di misura possono essere scritti in modo analogo, ad eccezione del fatto che il segno (\times) non è mai usato come segno di moltiplicazione tra unità di misura. Quando un prodotto di unità di misura è scritto senza alcun segno di moltiplicazione, uno spazio dev'essere lasciato tra i simboli delle unità.

Esempio $1 \text{ N} = 1 \text{ m kg s}^{-2} = 1 \text{ m} \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-2} = 1 \text{ m kg/s}^2, \quad \text{non} \quad 1 \text{ mkg s}^{-2}$

1.6 USO DEL CORSIVO PER I SIMBOLI NELLE PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE

Gli scritti scientifici devono seguire le convenzioni adottate per la scrittura sia riguardo all'uso del carattere corsivo per i simboli sia riguardo i casi in cui essi non devono essere usati. Parole e caratteri in corsivo sono usati in generale per dare enfasi al testo, mentre invece hanno un significato speciale quando riguardano i simboli nei testi scientifici e nelle equazioni. Nel seguito si intende riassumere i principali casi, per fornire un aiuto all'uso corretto dei caratteri in corsivo nella preparazione di materiale per gli scritti scientifici.

1. Le regole generali riguardanti l'uso dei caratteri corsivi od i casi in cui non devono essere usati sono presentate nella Sez. 1.3.2, p. 5 e Sez. 4.1, p. 103 relativamente ai simboli e operatori matematici. Queste regole si trovano anche descritte negli Standard Internazionali ISO 31 (successivamente sostituito da ISO/IEC 80000) [5], ISO 1000 [6] e nella Brochure SI [3].
2. La regola generale è che i simboli che rappresentano grandezze fisiche o una variabile vanno scritti in corsivo, mentre i simboli che rappresentano unità di misura o costanti matematiche o indici no. In certi casi può essere dubbio se un simbolo rappresenta una grandezza fisica o è un semplice indice: una buona regola per comprendere la differenza è che una grandezza o una variabile può assumere diversi valori numerici, gli indici no. I simboli dei vettori, dei tensori e delle matrici sono scritti in grassetto, ma anche in corsivo perché denotano grandezze.

Esempi La costante di Planck $h = 6.626\ 068\ 96(33) \times 10^{-34}$ J s.
L'intensità di campo elettrico \mathbf{E} ha componenti E_x , E_y , e E_z .
La massa della mia penna è $m = 24$ g = 0.024 kg.

3. La regola indicata si applica a tutte le lettere dell'alfabeto greco e latino, sebbene alcuni autori si ostinino a non usare il corsivo per le lettere greche.

Esempio Quando il simbolo μ è usato per indicare una grandezza fisica (come la permeabilità o la massa ridotta) deve essere scritto in corsivo, ma quando è usato come prefisso in una unità di misura come microgrammo, μg , o quando è usato come simbolo per indicare il muone μ (vedi oltre, par. 5), esso non va scritto in corsivo.

4. Numeri e indici non sono scritti in corsivo.

Esempi Lo stato base ed il primo stato elettronico eccitato della molecola CH_2 sono indicati rispettivamente come $\dots(2a_1)^2(1b_2)^2(3a_1)^1(1b_1)^1$, \tilde{X}^3B_1 , e $\dots(2a_1)^2(1b_2)^2(3a_1)^2$, \tilde{a}^1A_1 . La configurazione elettronica π e la simmetria della molecola del benzene nello stato base sono indicate: $\dots(a_{2u})^2(e_{1g})^4$, \tilde{X}^1A_{1g} . Tutti questi simboli non devono essere scritti in corsivo.

5. I simboli degli elementi nel sistema periodico non vanno scritti in corsivo. Analogamente i simboli usati per indicare una particella elementare non vanno scritti in corsivo. (Si veda però il seguente par. 9 per l'uso del corsivo nei nomi dei composti chimici.)

Esempi H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne, ... per gli atomi; e per l'elettrone, p per il protone, n per il neutrone, μ per il muone, α per la particella alfa, ecc.

6. I simboli per le grandezze fisiche sono costituiti da una, o eccezionalmente due, lettere dell'alfabeto latino o greco, e sono spesso corredati da apici, pedici o informazioni tra parentesi per ulteriori specificazioni della grandezza. Gli ulteriori simboli usati in tal modo possono essere in corsivo o no in relazione a ciò che essi rappresentano.

Esempi H indica l'entalpia, ma H_m indica l'entalpia molare (m è un indice che ricorda che si tratta di quantità molare, e quindi non va scritto in corsivo). C_p and C_V indicano rispettivamente la capacità termica a pressione p ed a volume V costante (si noti che m non è in corsivo, mentre lo sono p e V). Il potenziale chimico dell'argon può essere indicato come μ_{Ar} o $\mu(\text{Ar})$, ma il potenziale chimico del i -mo componente di una miscela sarebbe scritto come μ_i , dove i è in corsivo perché tale pedice è una variabile.

7. I simboli per gli operatori matematici non vanno mai scritti in corsivo. Ciò si applica al simbolo Δ per una differenza, a δ per una variazione infinitesimale, a d per una differenza infinitesimale (nel calcolo infinitesimale) ed alle lettere Σ e Π maiuscole rispettivamente come segno di somma e prodotto. I simboli π (3.141 592...), e (2.718 281..., base dei logaritmi naturali), i (radice quadrata di -1), etc. non vanno mai scritti in corsivo perché sono i simboli di specifiche funzioni, quali \log (\lg per \log_{10} , \ln per \log_e , o \lg per \log_2), \exp , \sin , \cos , \tan , erf , ***div***, ***grad***, ***rot***, etc. Gli operatori speciali ***grad*** e ***rot*** ed i corrispondenti simboli ∇ per ***grad***, $\nabla \times$ per ***rot***, e $\nabla \cdot$ per ***div*** sono scritti in grassetto per indicare il carattere vettoriale o tensoriale [5.k]. Alcune di queste lettere, per esempio e per carica elementare, sono anche talora usati per rappresentare grandezze fisiche; in quel caso esse devono essere scritte in corsivo per distinguerle dai corrispondenti simboli matematici.

Esempi $\Delta H = H(\text{finale}) - H(\text{iniziale})$; (dp/dt) usato per la derivata della pressione nel tempo ; δx usato per indicare una variazione infinitesimale di x . Ma per un oscillatore lineare smorzato l'ampiezza F in funzione del tempo t può essere espresso dall'equazione $F = F_0 \exp(-\delta t) \sin(\omega t)$ dove δ è il coefficiente di decadimento (unità SI: Np/s) e ω è la frequenza angolare (unità SI: rad/s). Si noti che l'operatore δ per una variazione infinitesimale di x , δx non è scritto in corsivo, mentre δ per il coefficiente di decadimento nel prodotto δt lo è. Si noti che i prodotti δt e ωt sono entrambi adimensionati, ma sono descritti rispettivamente in base all'unità neper (Np = 1) e radiante (rad = 1).

8. Le costanti fisiche fondamentali sono sempre considerate come grandezze soggette a misura (sebbene non siano delle variabili) e quindi devono essere scritte in corsivo. Alcune costanti fondamentali sono talora usate come se fossero delle unità di misura, ma vanno scritte comunque in corsivo. Un esempio è il hartree, E_h (vedi Sez. 3.9.1, p. 95). Invece, l'elettronvolt, eV, il dalton, Da, l'unità atomica di massa unificata, u, e l'unità astronomica, ua, sono stati riconosciuti come unità di misura dal Comité International des Poids et Mesures (CIPM) e quindi il loro simbolo non è in corsivo.

Esempi c_0 per la velocità della luce nel vuoto, m_e per la massa dell'elettrone, h per la costante di Planck, N_A o L per la costante di Avogadro, e per la carica elementare, a_0 per il raggio di Bohr, ecc.

Per l'elettronvolt $1 \text{ eV} = e \cdot 1 \text{ V} = 1.602\,176\,487(40) \times 10^{-19} \text{ J}$.

9. Lettere greche sono usate nella nomenclatura sistematica in chimica organica, inorganica, macromolecolare ed in biochimica. Esse non vanno scritte in corsivo perchè non sono simboli di grandezze fisiche. Esse indicano la posizione di sostituzione in catene laterali, collegamenti di atomi di legame e modi-ponte in composti di coordinazione, gruppi di testa in nomi basati sulla struttura di macromolecole e stereochimica in carboidrati e prodotti naturali. I simboli letterali per gli elementi sono in corsivo quando essi indicano locazioni nei nomi di composti chimici indicando collegamenti a eteroatomi, per esempio *O*-, *N*-, *S*-, and *P*-. Il simbolo corsivo *H* significa idrogeno indicato o aggiunto (vedi [15]).

Esempi acido α -ethylciclopentanacetico
 β -metil-4-propilcicloesanoetanolo
 cromo tetracarbonile(η^4 -2-metilidenpropano-1,3-dil)
 α -(triclorometil)- ω -cloropoli(1,4-fenilenmetilene)
 α -D-glucopiranosio
 5 α -androstan-3 β -olo
N-metilbenzammide
O-etil esantioato
 3*H*-pirrolo
 naftalen-2(1*H*)-one

2 TABELLE DELLE GRANDEZZE FISICHE

Le tabelle seguenti contengono i nomi ed i simboli raccomandati internazionalmente delle grandezze fisiche più usate in chimica. Altre grandezze e simboli si trovano nelle raccomandazioni della IUPAC [4] e ISO [5].

Ogni autore è libero di utilizzare i nomi e simboli che preferisce per le grandezze che utilizza, purché definisca con chiarezza la notazione usata e si attenga alle regole generali indicate nel Capitolo 1. Tuttavia, l'utilizzo da parte di tutti di notazioni standard contribuisce evidentemente alla chiarezza della comunicazione scientifica. I simboli qui riportati sono stati scelti in modo da essere conformi all'uso corrente e da minimizzare le possibilità di confusione. Piccoli cambiamenti rispetto ai simboli raccomandati sono talora opportuni in particolari situazioni, in genere con l'aggiunta di apici o pedici, o con l'uso alternativo di lettere maiuscole e minuscole. Per trattazioni riguardanti argomenti ben delimitati, è anche possibile semplificare certe notazioni, per esempio omettendo certi apici o pedici specifici, senza introdurre ambiguità. In ogni caso la notazione usata deve essere definita in anticipo, con tanta più cura quanto più si discosta da quella raccomandata.

Le tabelle sono organizzate per argomento. Le cinque colonne in ogni tabella riportano i nomi delle grandezze, il simbolo o i simboli raccomandati, una breve definizione, il simbolo dell'unità di misura SI coerente (senza prefissi di multipli o sottomultipli, vedi Sez. 3.6, p. 91), note e riferimenti bibliografici. Quando sono raccomandati due o più simboli, una virgola separa quelli ugualmente accettabili, mentre i simboli di scelta secondaria sono posti tra parentesi. Un punto e virgola è usato per separare simboli che riguardano grandezze con un significato leggermente differente. Le definizioni sono date principalmente per identificare il simbolo e non sono necessariamente complete; esse non devono essere considerate delle definizioni formali ma solo utili. Per alcune delle grandezze riportate nel capitolo, le definizioni riportate da vari documenti IUPAC sono raccolte in [16]. Utili definizioni di grandezze fisiche in chimica fisica organica si trovano in [17] e definizioni usate in chimica dei polimeri in [18]. Per grandezze adimensionate un 1 è riportato nella colonna delle unità di misura SI (vedi Sez. 3.10, p. 97). Ulteriori informazioni si trovano nelle Note e nei testi opportunamente inseriti tra le tabelle. Altri simboli sono inoltre definiti talora all'interno della stessa tabella (non necessariamente nell'ordine di apparizione) o nelle note.

2.1 SPAZIO E TEMPO

I nomi ed i qui raccomandati sono in accordo con quelli raccomandati da IUPAP [4] e ISO [5.b].

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>Unità SI</i>	<i>Note</i>
coordinate spaziali cartesiane	$x; y; z$		m	
coordinate cilindriche	$\rho; \vartheta; z$		m, 1, m	
coordinate sferiche polari	$r; \vartheta; \varphi$		m, 1, 1	
coordinate generalizzate	q, q_i		(varie)	
vettore di posizione	\mathbf{r}	$\mathbf{r} = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z$	m	
lunghezza	l		m	
speciali:				
altezza	h			
larghezza	b			
spessore	d, δ			
distanza	d			
raggio	r			
diametro	d			
lunghezza di percorso	s			
lunghezza di arco	s			
area	A, A_s, S		m ²	1
volume	$V, (v)$		m ³	
angolo piano	$\alpha, \beta, \gamma, \vartheta, \varphi, \dots$	$\alpha = s/r$	rad, 1	2
angolo solido	$\Omega, (\omega)$	$\Omega = A/r^2$	sr, 1	2
tempo, durata	t		s	
periodo	T	$T = t/N$	s	3
frequenza	ν, f	$\nu = 1/T$	Hz, s ⁻¹	
frequenza angolare	ω	$\omega = 2\pi\nu$	rad s ⁻¹ , s ⁻¹	2, 4
intervallo di tempo caratteristico, tempo di rilassamento,	τ, T	$\tau = dt/d \ln x $	s	
costante di tempo				
velocità angolare	ω	$\omega = d\varphi/dt$	rad s ⁻¹ , s ⁻¹	2, 5
velocità vettoriale (velocity)	$\mathbf{v}, \mathbf{u}, \mathbf{w}, \mathbf{c}, \dot{\mathbf{r}}$	$\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$	m s ⁻¹	
velocità scalare (speed)	v, u, w, c	$v = \mathbf{v} $	m s ⁻¹	6
accelerazione	\mathbf{a}	$\mathbf{a} = d\mathbf{v}/dt$	m s ⁻²	7

(1) Un'area infinitesimale può essere considerata come un vettore $\mathbf{e}_n dA$, dove \mathbf{e}_n è il vettore unitario normale al piano.

(2) Le unità di misura radiante (rad) e steradiano (sr) per angoli piani e solidi sono unità derivate. Poiché esse hanno dimensione 1 (cioè sono adimensionate), possono essere esplicitamente incluse in espressioni di altre unità SI derivate, quando il caso, oppure essere omesse se ciò non crea problemi.

(3) N è il numero di eventi (periodici) identici nel tempo t .

(4) L'unità di misura Hz non può essere usata per la frequenza angolare.

(5) La velocità angolare può essere trattata come un vettore $\boldsymbol{\omega}$ perpendicolare al piano di rotazione definito come $\mathbf{v} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}$.

(6) Per la velocità della luce e del suono il simbolo c è quello normalmente usato.

(7) Per l'accelerazione di caduta libera si usa il simbolo g .

2.2 MECCANICA CLASSICA

I nomi ed i qui raccomandati sono in accordo con quelli raccomandati da IUPAP [4] e ISO [5.c]. Grandezze e usati in acustica si trovano in [4,5.g].

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
massa	m		kg	
massa ridotta	μ	$\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$	kg	
densità, densità massica	ρ	$\rho = m/V$	kg m ⁻³	
densità relativa	d	$d = \rho/\rho^\ominus$	1	1
densità superficiale	ρ_A, ρ_S	$\rho_A = m/A$	kg m ⁻²	
volume specifico	v	$v = V/m = 1/\rho$	m ³ kg ⁻¹	
momento	\mathbf{p}	$\mathbf{p} = m\mathbf{v}$	kg m s ⁻¹	
momento angolare	\mathbf{L}	$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$	J s	2
momento di inerzia	I, J	$I = \sum_i m_i r_i^2$	kg m ²	3
forza	\mathbf{F}	$\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt = m\mathbf{a}$	N	
momento della forza, coppia	$\mathbf{M}, (\mathbf{T})$	$\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}$	N m	
energia	E		J	
energia potenziale	E_p, V, Φ	$E_p = - \int \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r}$	J	4
energia cinetica	E_k, T, K	$E_k = (1/2)mv^2$	J	
lavoro	W, A, w	$W = \int \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r}$	J	
potenza	P	$P = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} = dW/dt$	W	
coordinate generalizzate	q		(varie)	
momento generalizzato	p		(varie)	
funzione di Lagrange	L	$L(q, \dot{q}) = T(q, \dot{q}) - V(q)$	J	
funzione di Hamilton	H	$H(q, p) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q})$	J	
azione	S	$S = \int L dt$	J s	5
pressione	$p, (P)$	$p = F/A$	Pa, N m ⁻²	
tensione superficiale	γ, σ	$\gamma = dW/dA$	N m ⁻¹ , J m ⁻²	
peso	$G, (W, P)$	$G = mg$	N	
costante gravitazionale	G	$F = Gm_1 m_2 / r^2$	N m ² kg ⁻²	

(1) Di solito $\rho^\ominus = \rho(\text{H}_2\text{O}, 4^\circ\text{C})$.

(2) Altri sono solitamente usati in spettroscopia atomica e molecolare (vedi Sez. 2.6, p. 25).

(3) In generale \mathbf{I} è una grandezza tensoriale: $I_{\alpha\alpha} = \sum_i m_i (\beta_i^2 + \gamma_i^2)$, e $I_{\alpha\beta} = -\sum_i m_i \alpha_i \beta_i$ se $\alpha \neq \beta$, dove α, β, γ è una permutazione di x, y, z . Per una distribuzione di massa continua le somme sono sostituite da integrali.

(4) In senso stretto solo differenze di energia potenziale hanno un significato fisico, per cui l'integrale deve essere interpretato come un integrale definito, per esempio

$$E_p(r_1, r_2) = - \int_{r_1}^{r_2} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r}$$

o eventualmente con limite superiore infinito

$$E_p(r) = - \int_r^\infty \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r}$$

(5) L'azione è l'integrale della funzione di Lagrange L nel tempo, equivalente a $\int p dq - \int H dt$ (vedi [19]).

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>Unità SI</i>	<i>Note</i>
sforzo normale	σ	$\sigma = F/A$	Pa	6
sforzo di taglio (scorrimento)	τ	$\tau = F/A$	Pa	6
deformazione lineare, elongazione relativa	ε, e	$\varepsilon = \Delta l/l$	1	
modulo di elasticità, modulo di Young	E	$E = \sigma/\varepsilon$	Pa	6
deformazione di taglio	γ	$\gamma = \Delta x/d$	1	6, 7
modulo di taglio, modulo di Coulomb	G	$G = \tau/\gamma$	Pa	6
deformazione di volume,	ϑ	$\vartheta = \Delta V/V_0$	1	6
modulo di volume, modulo di compressione	K	$K = -V_0 (dp/dV)$	Pa	6
viscosità, viscosità dinamica	$\eta, (\mu)$	$\tau_{xz} = \eta (dv_x/dz)$	Pa s	
fluidità	φ	$\varphi = 1/\eta$	$\text{m kg}^{-1} \text{s}$	
viscosità cinematica	ν	$\nu = \eta/\rho$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	
fattore dinamico di frizione	$\mu, (f)$	$F_{\text{friz}} = \mu F_{\text{norm}}$	1	
flusso di energia sonora	P, P_a	$P = dE/dt$	W	
fattori acustici di, riflessione	ρ	$\rho = P_r/P_0$	1	8
assorbimento	$\alpha_a, (\alpha)$	$\alpha_a = 1 - \rho$	1	9
trasmissione	τ	$\tau = P_{\text{tr}}/P_0$	1	8
dissipazione	δ	$\delta = \alpha_a - \tau$	1	

(6) In generale possono essere grandezze tensoriali.

(7) d è la distanza tra gli strati distanti Δx .

(8) P_0 è il flusso di energia sonora incidente, P_r il flusso riflesso e P_{tr} quello trasmesso.

(9) Questa definizione è specifica dell'acustica e diversa da quella usata in radiazione, dove il fattore di assorbimento della radiazione corrisponde al fattore di dissipazione acustica.

2.3 ELETTRICITÀ E MAGNETISMO

I nomi ed i qui raccomandati sono in accordo con quelli raccomandati da IUPAP [4] e ISO [5.e].

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>Unità SI</i>	<i>Note</i>
corrente elettrica	I, i		A	1
densità di corrente elettrica	\mathbf{j}, \mathbf{J}	$I = \int \mathbf{j} \cdot \mathbf{e}_n \, dA$	A m ⁻²	2
carica elettrica, quantità di elettricità	Q	$Q = \int I \, dt$	C	1
densità di carica	ρ	$\rho = Q/V$	C m ⁻³	
densità superficiale di carica	σ	$\sigma = Q/A$	C m ⁻²	
potenziale elettrico	V, ϕ	$V = dW/dQ$	V, J C ⁻¹	
differenza di potenziale elettrico, tensione elettrica	$U, \Delta V, \Delta \phi$	$U = V_2 - V_1$	V	
forza elettromotrice	$E,$ (E_{MK})	$E = \oint (\mathbf{F}/Q) \cdot d\mathbf{r}$	V	3
intensità del campo elettrico	\mathbf{E}	$\mathbf{E} = \mathbf{F}/Q = -\nabla V$	V m ⁻¹	
flusso elettrico	Ψ	$\Psi = \int \mathbf{D} \cdot \mathbf{e}_n \, dA$	C	2
spostamento elettrico	\mathbf{D}	$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$	C m ⁻²	
capacità	C	$C = Q/U$	F, C V ⁻¹	
permittività	ε	$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}$	F m ⁻¹	4
costante elettrica, permittività del vuoto	ε_0	$\varepsilon_0 = \mu_0^{-1} c_0^{-2}$	F m ⁻¹	5
permittività relativa	ε_r	$\varepsilon_r = \varepsilon/\varepsilon_0$	1	6
polarizzazione dielettrica, polarizzazione elettrica (momento di dipolo elettrico di volume)	\mathbf{P}	$\mathbf{P} = \mathbf{D} - \varepsilon_0 \mathbf{E}$	C m ⁻²	
suscettività elettrica	χ_e	$\chi_e = \varepsilon_r - 1$	1	
1-ma iper-suscettività	$\chi_e^{(2)}$	$\chi_e^{(2)} = \varepsilon_0^{-1} (\partial^2 P / \partial E^2)$	C m J ⁻¹ , m V ⁻¹	7
2-da iper-suscettività	$\chi_e^{(3)}$	$\chi_e^{(3)} = \varepsilon_0^{-1} (\partial^3 P / \partial E^3)$	C ² m ² J ⁻² , m ² V ⁻²	7

(1) La corrente elettrica I è una delle grandezze base del ISQ.

(2) $\mathbf{e}_n dA$ è un elemento vettoriale di area (vedi Sez. 2.1, nota 1, p. 13).

(3) Il nome forza elettromotrice e il simbolo f.e.m. non sono più raccomandati perché la differenza di potenziale elettrico non è una forza (vedi Sez. 2.13, nota 14, p. 71).

(4) ε può essere un tensore di rango due.

(5) c_0 è la velocità della luce nel vuoto.

(6) Questa grandezza era chiamata costante dielettrica.

(7) Le iper-suscettività sono i coefficienti dei termini non lineari dell'espansione dell'ampiezza P della polarizzazione dielettrica \mathbf{P} in serie di potenze dell'intensità di campo elettrico \mathbf{E} , che è in relazione con l'espansione del vettore di momento dipolare descritto nella Sez. 2.5, nota 17, p. 24. In un mezzo isotropo, l'espansione della componente i della polarizzazione elettrica è data da

$$P_i = \varepsilon_0 [\chi_e^{(1)} E_i + (1/2) \chi_e^{(2)} E_i^2 + (1/6) \chi_e^{(3)} E_i^3 + \dots]$$

dove E_i è il i -mo componente dell'intensità di campo elettrico e $\chi_e^{(1)}$ è l'usuale suscettività elettrica χ_e , uguale a $\varepsilon_r - 1$ in assenza di termini superiori. In mezzi anisotropi, $\chi_e^{(1)}$, $\chi_e^{(2)}$ e $\chi_e^{(3)}$ sono tensori di rango 2, 3, e 4. Per un mezzo isotropo (come un liquido), o per un cristallo con cella unitaria centro-simmetrica, $\chi_e^{(2)}$ è zero per simmetria. Queste sono grandezze macroscopiche che caratterizzano un mezzo dielettrico nello stesso modo in cui le grandezze microscopiche polarizzabilità (α) e iper-polarizzabilità (β, γ) caratterizzano una molecola.

Nota della traduzione italiana: per intensità (del campo elettrico) in inglese si usa il termine 'strength'.

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>Unità SI</i>	<i>Note</i>
momento di dipolo elettrico	$\mathbf{p}, \boldsymbol{\mu}$	$\mathbf{p} = \sum_i Q_i \mathbf{r}_i$	C m	8
densità di flusso magnetico, induzione magnetica	\mathbf{B}	$\mathbf{F} = Q \mathbf{v} \times \mathbf{B}$	T	9
flusso magnetico	Φ	$\Phi = \int \mathbf{B} \cdot \mathbf{e}_n \, dA$	Wb	2
intensità di campo magnetico, intensità di campo magnetizzante	\mathbf{H}	$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j}$	A m ⁻¹	
permeabilità costante magnetica, permeabilità del vuoto	μ μ_0	$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$ $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ H m}^{-1}$	N A ⁻² , H m ⁻¹ H m ⁻¹	10
permeabilità relativa	μ_r	$\mu_r = \mu/\mu_0$	1	
magnetizzazione (momento di dipolo magnetico volumico)	\mathbf{M}	$\mathbf{M} = \mathbf{B}/\mu_0 - \mathbf{H}$	A m ⁻¹	
suscettività magnetica	$\chi, \kappa, (\chi_m)$	$\chi = \mu_r - 1$	1	11
suscettività magnetica molare	χ_m	$\chi_m = V_m \chi$	m ³ mol ⁻¹	
momento dipolare magnetico	$\mathbf{m}, \boldsymbol{\mu}$	$\mathbf{E} = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$	A m ² , J T ⁻¹	
resistenza elettrica	R	$R = U/I$	Ω	12
conduttanza	G	$G = 1/R$	S	12
angolo di perdita	δ	$\delta = \varphi_U - \varphi_I$	rad	13
reattanza	X	$X = (U/I) \sin \delta$	Ω	
impedenza, (impedenza complessa)	Z	$Z = R + iX$	Ω	
ammettenza, (ammettenza complessa)	Y	$Y = 1/Z$	S	
suscettanza	B	$Y = G + iB$	S	
resistività	ρ	$\mathbf{E} = \rho \mathbf{j}$	$\Omega \text{ m}$	14
conducibilità	κ, γ, σ	$\mathbf{j} = \boldsymbol{\kappa} \mathbf{E}$	S m ⁻¹	14, 15
auto induttanza	L	$\mathbf{E} = -L(dI/dt)$	H, V s A ⁻¹	
mutua induttanza	M, L_{12}	$\mathbf{E}_1 = -L_{12}(dI_2/dt)$	H, V s A ⁻¹	
potenziale del vettore magnetico	\mathbf{A}	$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$	Wb m ⁻¹	
vettore di Poynting	\mathbf{S}	$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$	W m ⁻²	16

(7) (continua) Per un mezzo omogeneo, saturo ed isotropo di volume molare V_m si ha $\alpha_m = \varepsilon_0 \chi_e V_m$, dove $\alpha_m = N_A \alpha$ è la polarizzabilità molare (vedi Sez. 2.5, nota 17, p. 24 e Sez. 2.7.2, p. 40).

(8) Quando un dipolo è composto da due cariche puntuali Q e $-Q$ separate da una distanza r , la direzione del vettore dipolo è presa in modo da andare dalla carica negativa a quella positiva. Talora è usata la convenzione opposta, ma il suo uso è da scoraggiare. Il momento di dipolo di uno ione dipende dalla scelta dell'origine.

(9) Questa grandezza non deve essere chiamata "campo magnetico".

(10) μ è un tensore del rango due nei materiali anisotropi.

(11) Il simbolo χ_m è talora usato per la suscettività magnetica, ma dovrebbe essere riservato per la suscettività magnetica molare.

(12) In un materiale con reattanza $R = (U/I) \cos \delta$ e $G = R/(R^2 + X^2)$.

(13) φ_I e φ_U sono le fasi della corrente e della differenza di potenziale.

(14) Questa grandezza è un tensore nei materiali anisotropi.

(15) ISO definisce solo γ e σ , ma non κ .

(16) Questa grandezza è anche chiamata il vettore di Poynting-Umov.

2.4 MECCANICA E CHIMICA QUANTISTICA

I nomi ed i per le grandezze usate in meccanica quantistica e qui raccomandati sono in accordo con quelli raccomandati da IUPAP [4]. I nomi ed i per le grandezze principalmente usate in chimica quantistica sono stati scelti sulla base della pratica corrente nel campo. Una guida che illustra le scelte metodologiche da seguire nella pubblicazione di risultati di calcolo si trova in [20]. Una lista di acronimi usati in chimica teorica è stata pubblicata da IUPAC [21]; vedi anche Cap. 9, p. 157.

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
operatore momento	$\hat{\mathbf{p}}$	$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$	J s m ⁻¹	1
operatore energia cinetica	\hat{T}	$\hat{T} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2$	J	1
operatore hamiltoniano, hamiltoniano	\hat{H}	$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$	J	1
funzione d'onda, funzione di stato	Ψ, ψ, ϕ	$\hat{H}\psi = E\psi$	(m ^{-3/2})	2, 3
funzione d'onda idrogenoide	$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$	$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$	(m ^{-3/2})	3
funzione armonica sferica	$Y_{lm}(\theta, \phi)$	$Y_{lm} = N_{l m }P_l^{ m }(\cos \theta)e^{im\phi}$	1	4
densità di probabilità	P	$P = \psi^*\psi$	(m ⁻³)	3, 5
densità di carica degli elettroni	ρ	$\rho = -eP$	(C m ⁻³)	3, 5, 6
densità corrente di probabilità, flusso di probabilità	\mathbf{S}	$\mathbf{S} = -(i\hbar/2m)\times$ $(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$	(m ⁻² s ⁻¹)	3
densità di corrente elettrica degli elettroni	\mathbf{j}	$\mathbf{j} = -e\mathbf{S}$	(A m ⁻²)	3, 6
elemento di integrazione	$d\tau$	$d\tau = dx dy dz$	(varia)	
elemento di matrice dell'operatore \hat{A}	$A_{ij}, \langle i A j\rangle$	$A_{ij} = \int \psi_i^*\hat{A}\psi_j d\tau$	(varie)	7
valore atteso dell'operatore \hat{A}	$\langle A\rangle, \bar{A}$	$\langle A\rangle = \int \psi^*\hat{A}\psi d\tau$	(varie)	7

(1) L'accento circonflesso $\hat{}$ serve a distinguere un operatore da una grandezza algebrica. Questa definizione si applica ad una rappresentazione per coordinate, dove ∇ rappresenta l'operatore divergenza ("nabla") (vedi Sez. 4.2, p. 107).

(2) Lettere maiuscole e minuscole Ψ e ψ sono comunemente usate rispettivamente per la funzione dipendente dal tempo $\Psi(x, t)$ e per la funzione ampiezza $\psi(x)$. Quindi per uno stato stazionario $\Psi(x, t) = \psi(x)\text{esp}(-iEt/\hbar)$.

(3) Per la funzione l'onda normalizzata di una singola particella nello spazio tridimensionale, l'unità SI appropriata è data tra parentesi. Tuttavia, i risultati in chimica quantistica sono comunemente espressi in termini di unità atomiche (vedi Sez. 3.9.2, p. 95, Sez. 7.3 (iv), p. 146 e [22]). Se distanze, energie, momenti angolari, cariche e masse sono tutte espresse in rapporti adimensionati r/a_0 , E/E_h , ecc., allora tutte le grandezze sono adimensionate.

(4) $P_l^{|m|}$ indica la funzione di Legendre associata di grado l e ordine $|m|$. $N_{l|m|}$ è un fattore di normalizzazione.

(5) ψ^* è il complesso coniugato di ψ . Per una funzione d'onda antisimmetrica di n elettroni, $\Psi(r_1, \dots, r_n)$, la densità totale di probabilità degli elettroni è $\int_2 \dots \int_n \Psi^*\Psi d\tau_2 \dots d\tau_n$, dove l'integrazione si estende alle coordinate di tutti gli elettroni meno uno.

(6) $-e$ è la carica di un elettrone.

(7) L'unità di misura è la stessa della grandezza fisica A che l'operatore rappresenta.

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
hermitiano coniugato dell'operatore \hat{A}	\hat{A}^\dagger	$(A^\dagger)_{ij} = (A_{ji})^*$	(varie)	7
commutatore di \hat{A} e \hat{B}	$[\hat{A}, \hat{B}], [\hat{A}, \hat{B}]_-$	$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$	(varie)	8
anticommutatore di \hat{A} e \hat{B}	$[\hat{A}, \hat{B}]_+$	$[\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$	(varie)	8
operatori di momento angolare	vedi SPETTROSCOPIA, Sez. 2.6.1, p. 30			
funzione d'onda di spin	$\alpha; \beta$		1	9

Teoria degli orbitali molecolari di Hückel

funzione di base degli orbitali atomici	χ_r		$m^{-3/2}$	3
orbitale molecolare	ϕ_i	$\phi_i = \sum_r \chi_r c_{ri}$	$m^{-3/2}$	3, 10
integrale di Coulomb	H_{rr}, α_r	$H_{rr} = \int \chi_r^* \hat{H} \chi_r d\tau$	J	3, 10, 11
integrale di risonanza	H_{rs}, β_{rs}	$H_{rs} = \int \chi_r^* \hat{H} \chi_s d\tau$	J	3, 10, 12
parametro di energia	x	$-x = (\alpha - E) / \beta$	1	13
integrale di sovrapposizione	S_{rs}, S	$S_{rs} = \int \chi_r^* \chi_s d\tau$	1	10
ordine di carica	q_r	$q_r = \sum_{i=1}^n b_i c_{ri}^2$	1	14, 15
ordine di legame	p_{rs}	$p_{rs} = \sum_{i=1}^n b_i c_{ri} c_{si}$	1	15, 16

(8) L'unità di misura è la stessa del prodotto delle grandezze fisiche A e B .

(9) Le funzioni d'onda di spin di un singolo elettrone, α e β , sono definite dagli elementi di matrice della componente z del momento angolare di spin, \hat{s}_z , mediante le relazioni $\langle \alpha | \hat{s}_z | \alpha \rangle = +(1/2)$, $\langle \beta | \hat{s}_z | \beta \rangle = -(1/2)$, $\langle \beta | \hat{s}_z | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{s}_z | \beta \rangle = 0$ in unità di \hbar . Le funzioni d'onda di spin totale degli elettroni per un atomo con molti elettroni sono indicate con lettere greche α, β, γ , ecc., a seconda del valore di $\sum m_s$, nell'ordine dalla maggiore alla minore.

(10) \hat{H} è una hamiltoniana effettiva per il singolo elettrone, i e j sono gli indici degli orbitali molecolari, r e s gli indici degli orbitali atomici. Nella teoria degli orbitali molecolari di Hückel, H_{rs} è considerato diverso da zero solo per coppie di atomi legati r e s , e tutti gli S_{rs} sono considerati nulli per $r \neq s$.

(11) Si noti che il nome "integrale di Coulomb" ha un diverso significato nella teoria HMO (dove si riferisce all'energia dell'orbitale χ_r nel campo del nucleo) rispetto alla teoria di Hartree-Fock considerata successivamente (dove si riferisce all'integrale di repulsione tra due elettroni).

(12) Questa espressione descrive un'interazione di legame tra gli orbitali atomici r e s . Per una interazione di antilegame, il corrispondente integrale di risonanza è uguale all'integrale di risonanza dell'interazione di legame col segno meno.

(13) Nell'applicazione più semplice della teoria di Hückel agli elettroni degli idrocarburi planari coniugati, α è preso uguale per tutti gli atomi di carbonio, e β uguale per tutte le coppie legate di atomi di carbonio; è quindi abituale scrivere il determinante secolare di Hückel in termini del parametro adimensionato x .

(14) $-eq_r$ è la carica elettronica sull'atomo r . q_r indica il contributo di tutti gli n elettroni π alla carica totale al centro di r , con $\sum q_r = n$.

(15) b_i indica il numero di elettroni che occupano un dato livello di energia dell'orbitale ε_i ; per orbitali non degeneri b_i può assumere i valori 0, 1, o 2.

(16) p_{rs} è l'ordine del legame tra gli atomi r e s .

2.4.1 Teoria ab initio di Hartree-Fock, o del campo autocostante (ab initio SCF)

I risultati in chimica quantistica sono tipicamente espressi in unità atomiche (vedi Sez. 3.9.1, p. 94 e Sez. 7.3 (iv), p. 146). Nelle tabelle rimanenti di questa sezione tutte le lunghezze, energie, masse, cariche e momenti angolari sono espressi come rapporti adimensionati delle corrispondenti unità atomiche, rispettivamente a_0 , E_h , m_e , e ed \hbar . Quindi tutte le grandezze sono adimensionate e la colonna dell'unità di misura SI è omessa.

Nome	Simbolo	Definizione	Note
orbitale molecolare	$\phi_i(\mu)$		17
orbitale di spin molecolare	$\phi_i(\mu)\alpha(\mu);$ $\phi_i(\mu)\beta(\mu)$		17
funzione d'onda totale	Ψ	$\Psi = (n!)^{-1/2} \ \phi_i(\mu)\ $	17, 18
hamiltoniana del guscio interno di un singolo elettrone	$\hat{H}_\mu^{\text{guscio}}$	$\hat{H}_\mu = -(1/2)\nabla_\mu^2 - \sum_A Z_A/r_{\mu A}$	17, 19
integrali per un elettrone:			
valore atteso della hamiltoniana del guscio interno	H_{ii}	$H_{ii} = \int \phi_i^*(1)\hat{H}_1^{\text{guscio}}\phi_i(1)d\tau_1$	17, 19
integrale di repulsione tra due elettroni:			
integrale di Coulomb	J_{ij}	$J_{ij} = \iint \phi_i^*(1)\phi_j^*(2)\frac{1}{r_{12}}\phi_i(1)\phi_j(2)d\tau_1d\tau_2$	17, 20
integrale di scambio	K_{ij}	$K_{ij} = \iint \phi_i^*(1)\phi_j^*(2)\frac{1}{r_{12}}\phi_j(1)\phi_i(2)d\tau_1d\tau_2$	17, 20
energia orbitale di un elettrone	ε_i	$\varepsilon_i = H_{ii} + \sum_j (2J_{ij} - K_{ij})$	17, 21
energia elettronica totale	E	$E = 2\sum_i H_{ii} + \sum_i \sum_j (2J_{ij} - K_{ij})$ $= \sum_i (\varepsilon_i + H_{ii})$	17, 21, 22
operatore di Coulomb	\hat{J}_i	$\hat{J}_i\phi_j(2) = \left\langle \phi_i(1) \left \frac{1}{r_{12}} \right \phi_i(1) \right\rangle \phi_j(2)$	17
operatore di scambio	\hat{K}_i	$\hat{K}_i\phi_j(2) = \left\langle \phi_i(1) \left \frac{1}{r_{12}} \right \phi_j(1) \right\rangle \phi_i(2)$	17
operatore di Fock	\hat{F}	$\hat{F} = \hat{H}^{\text{guscio}} + \sum_i (2\hat{J}_i - \hat{K}_i)$	17, 21, 23

(17) Gli indici i and j sono relativi agli orbitali molecolari e sia μ che i numeri 1 e 2 indicano le coordinate degli elettroni.

(18) La doppia barra verticale indica un prodotto anti-simmetrizzato degli orbitali di spin molecolare occupati $\phi_i\alpha$ e $\phi_i\beta$ (talora indicati come ϕ_i e $\bar{\phi}_i$); per un sistema a guscio chiuso Ψ sarebbe un determinante di Slater normalizzato. $(n!)^{-1/2}$ è il fattore di normalizzazione e n è il numero di elettroni.

(19) Z_A è il numero di protoni (numero di carica) del nucleo A e $r_{\mu A}$ è la distanza dell'elettrone μ dal nucleo A. H_{ii} è l'energia di un elettrone nell'orbitale ϕ_i e nel campo del guscio interno.

(20) L'integrale di repulsione interelettronica viene scritto in diverse forme sintetiche: in $J_{ij} = \langle ij|ij \rangle$ il primo e terzo indice si riferiscono all'indice dell'elettrone 1 ed il secondo e quarto indice all'elettrone 2. In $J_{ij} = (i^*i|j^*j)$ i primi due indici si riferiscono all'elettrone 1 ed i secondi due indici all'elettrone 2. Normalmente le funzioni sono reali e gli asterischi sono omessi. L'integrale di scambio è scritto in varie forme sintetiche con la stessa convenzione per gli indici: $K_{ij} = \langle ij|ji \rangle$ oppure $K_{ij} = (i^*j|j^*i)$.

(21) Queste relazioni si applicano solo a sistemi a guscio chiuso e le somme si estendono agli orbitali molecolari occupati.

(22) La somma in j include il termine $j = i$ per il quale $J_{ii} = K_{ii}$, così che questo termine si semplifica nella somma per dare $2J_{ii} - K_{ii} = J_{ii}$.

2.4.2 Teoria SCF di Hartree-Fock-Roothaan, che usa gli orbitali molecolari espansi come combinazioni lineari delle funzioni di base degli orbitali atomici (teoria LCAO-MO)

Nome	Simbolo	Definizione	Note
funzioni di base degli orbitali atomici	χ_r		24
orbitale molecolare	ϕ_i	$\phi_i = \sum_r \chi_r c_{ri}$	
elemento matriciale di sovrapposizione	S_{rs}	$S_{rs} = \int \chi_r^* \chi_s d\tau, \quad \sum_{r,s} c_{ri}^* S_{rs} c_{sj} = \delta_{ij}$	
elemento matriciale di densità	P_{rs}	$P_{rs} = 2 \sum_i^{\text{occ}} c_{ri}^* c_{si}$	25
integrali delle funzioni di base:			
per un elettrone	H_{rs}	$H_{rs} = \int \chi_r^*(1) \hat{H}_1^{\text{guscio}} \chi_s(1) d\tau_1$	
per due elettroni	$(rs tu)$	$(rs tu) = \iint \chi_r^*(1) \chi_s(1) \frac{1}{r_{12}} \chi_t^*(2) \chi_u(2) d\tau_1 d\tau_2$	26, 27
energia elettronica totale	E	$E = \sum_r \sum_s P_{rs} H_{rs} + (1/2) \sum_r \sum_s \sum_t \sum_u P_{rs} P_{tu} [(rs tu) - (1/2)(ru ts)]$	25, 27
elemento matriciale dell'operatore di Fock	F_{rs}	$F_{rs} = H_{rs} + \sum_t \sum_u P_{tu} [(rs tu) - (1/2)(ru ts)]$	25, 28

(Note, continua)

(23) Le equazioni di Hartree-Fock indicano $(\hat{F} - \varepsilon_j)\phi_j = 0$. Si noti che la definizione dell'operatore di Fock comprende tutte le sue autofunzioni ϕ_i tramite gli operatori di Coulomb e di scambio, \hat{J}_i e \hat{K}_i .

(24) Gli indici r e s denotano le funzioni di base. Nei calcoli numerici, le funzioni di base sono prese o come orbitali di tipo Slater (OS) o come orbitali di tipo Gaussiano (OG). Una funzione base OS in coordinate sferiche polari ha la forma generale $\chi(r, \theta, \phi) = N r^{n-1} \exp(-\zeta_n r) Y_{lm}(\theta, \phi)$, dove ζ_n è un parametro di schermo che rappresenta la carica effettiva nello stato con numeri quantici n e l . Le funzioni OG sono espresse tipicamente in coordinate spaziali cartesiane della forma $\chi(x, y, z) = N x^a y^b z^c \exp(-\alpha r^2)$. In genere, una combinazione lineare di tali funzioni con vari esponenti α è usata in modo tale da modellare una OS. N indica un fattore di normalizzazione.

(25) Per specie a guscio chiuso con due elettroni per orbitale occupato. La somma si estende a tutti gli orbitali molecolari occupati. P_{rs} è anche chiamato l'ordine di legame tra gli atomi r e s .

(26) La notazione sintetica per gli integrali per due elettroni estesi alle funzioni di base, $(rs|tu)$, è basata sulla stessa convenzione indicata in nota 20.

(27) Qui l'integrale per due elettroni è espresso in termini di integrali estesi alle funzioni di base spaziali degli orbitali atomici. Gli elementi di matrice H_{ii} , J_{ij} e K_{ij} possono essere analogamente espressi in termini di integrali estesi alle funzioni di base spaziali degli orbitali atomici, secondo le equazioni seguenti:

$$H_{ii} = \sum_r \sum_s c_{ri}^* c_{si} H_{rs}$$

$$J_{ij} = (i^* i | j^* j) = \sum_r \sum_s \sum_t \sum_u c_{ri}^* c_{si} c_{tj}^* c_{uj} (r^* s | t^* u)$$

$$K_{ij} = (i^* j | j^* i) = \sum_r \sum_s \sum_t \sum_u c_{ri}^* c_{si} c_{tj}^* c_{uj} (r^* u | t^* s)$$

(28) Le equazioni SCF di Hartree-Fock-Roothaan, espresse in termini degli elementi di matrice dell'operatore di Fock F_{rs} , e gli elementi della matrice di sovrapposizione S_{rs} , prendono la forma:

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

2.5 ATOMI E MOLECOLE

I nomi ed i qui raccomandati sono in accordo con quelli raccomandati da IUPAP [4] e ISO [5.i]. Grandezze addizionali ed i loro usati in fisica atomica, nucleare e dei plasmi, si trovano in [4,5.j].

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>Unità SI</i>	<i>Note</i>
numero di nucleoni, numero di massa	A		1	
numero di protoni, numero atomico	Z		1	
numero di neutroni	N	$N = A - Z$	1	
massa dell'elettrone	m_e		kg	1, 2
massa di un atomo, massa atomica	m_a, m		kg	
costante di massa atomica	m_u	$m_u = m_a(^{12}\text{C})/12$	kg	1, 3
eccesso di massa	Δ	$\Delta = m_a - Am_u$	kg	
carica elementare	e	carica protonica	C	2
costante di Planck	h		J s	
costante di Planck divisa per 2π	\hbar	$\hbar = h/2\pi$	J s	2
raggio di Bohr	a_0	$a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2$	m	2
energia di Hartree	E_h	$E_h = \hbar^2/m_e a_0^2$	J	2
costante di Rydberg	R_∞	$R_\infty = E_h/2hc$	m^{-1}	
costante di struttura fine	α	$\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$	1	
energia di ionizzazione	E_i, I		J	4
affinità elettronica	E_{ae}, A		J	4
elettronegatività	χ	$\chi = (1/2)(E_i + E_{ae})$	J	5
energia di dissociazione	E_d, D		J	
dallo stato base	D_0		J	6
dal minimo di potenziale	D_e		J	6

(1) analoghi sono usati per altre particelle con pedici: p per il protone, n per il neutrone, a per l'atomo, N per il nucleo, ecc.

(2) Questa grandezza è anche usata come unità atomica (vedi Sez. 3.9.1, p. 94 e Sez. 7.3 (iv), p. 146).

(3) m_u è uguale all'unità della massa atomica unificata, con simbolo u, cioè $m_u = 1 \text{ u}$ (vedi Sez. 3.7, p. 92). Il nome dalton, simbolo Da, è usato come nome alternativo per l'unità della massa atomica unificata [23].

(4) L'energia di ionizzazione è spesso chiamata potenziale di ionizzazione (I_p). L'affinità elettronica è l'energia necessaria per allontanare un elettrone.

(5) Il concetto di elettronegatività è stato introdotto da L. Pauling come il potere di un atomo in una molecola di attrarre a sé elettroni. Ci sono vari modi per calcolare questa grandezza [24]. Quella indicata nella tabella ha un chiaro significato fisico di energia ed è dovuta a R. S. Mulliken. La scala più comunemente usata, dovuta a Pauling, si basa sulle energie di dissociazione di legame E_d in eV ed è relativa, nel senso che i valori sono adimensionati e che sono definite solo differenze di elettronegatività. Per atomi A e B

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

dove χ_r indica la elettronegatività relativa di Pauling. La scala è scelta in modo da rendere l'elettronegatività relativa dell'idrogeno $\chi_{r,H} = 2.1$. Non è facile scegliere il segno della radice quadrata, che determina il segno di $\chi_{r,A} - \chi_{r,B}$. Pauling ha fatto una scelta su basi intuitive.

(6) I D_0 e D_e sono usati per le energie di dissociazione di molecole diatomiche e politomiche.

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
numero quantico principale (atomo idrogenoide)	n	$E = hcZ^2 R_\infty/n^2$	1	7
momento angolare numeri quantici	vedi SPETTROSCOPIA, Sez. 2.6			
momento dipolare magnetico di una molecola	$\mathbf{m}, \boldsymbol{\mu}$	$E_p = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$	J T ⁻¹	8
magnetizzabilità di una molecola	ξ	$\mathbf{m} = \xi \mathbf{B}$	J T ⁻²	
magnetone di Bohr	μ_B	$\mu_B = e\hbar/2m_e$	J T ⁻¹	
magnetone nucleare	μ_N	$\mu_N = e\hbar/2m_p = (m_e/m_p) \mu_B$	J T ⁻¹	
rapporto giromagnetico, fattore g di Landé	γ, g_e	$\gamma_e = -g_e \mu_B/\hbar$ $g_e = -\gamma_e(2m_e/e)$	s ⁻¹ T ⁻¹	9
fattore g nucleare	g_N	$g_N = \gamma_N(2m_p/e)$	1	10
frequenza angolare di Larmor	$\boldsymbol{\omega}_L$	$\boldsymbol{\omega}_L = -\gamma \mathbf{B}$	s ⁻¹	11
frequenza di Larmor	ν_L	$\nu_L = \omega_L/2\pi$	Hz	
tempo di rilassamento, longitudinale	T_1		s	12
trasversale	T_2		s	12
momento di dipolo elettrico di una molecola	$\mathbf{p}, \boldsymbol{\mu}$	$E_p = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}$	C m	13
momento quadrupolare di una molecola	$\mathbf{Q}; \boldsymbol{\Theta}$	$E_p = (1/2)\mathbf{Q} : \mathbf{V}'' = (1/3)\boldsymbol{\Theta} : \mathbf{V}''$	C m ²	14

(7) Per un elettrone in un campo centrale di Coulomb di un nucleo di massa infinita di numero atomico Z .
(8) Momenti magnetici di specifiche particelle possono essere indicati con pedici, ad esempio μ_e, μ_p, μ_n rispettivamente per un elettrone, un protone ed un neutrone. I valori tabulati si riferiscono di solito al massimo valore atteso per la componente z . Valori per nuclei stabili sono riportati nella Sez. 6.3, p. 121.

(9) Il rapporto giromagnetico di un nucleo è $\gamma_N = g_N \mu_N/\hbar$.

(10) Per ragioni storiche, $g_e > 0$. e è la carica elementare (positiva), perciò $\gamma_e < 0$. Per il nucleo γ_N e g_N hanno lo stesso segno. Una convenzione di segno differente per il fattore elettronico g è discussa in [25].

(11) Questa è una grandezza vettoriale di ampiezza ω_L . Questa grandezza è talora chiamata frequenza circolare di Larmor.

(12) Queste grandezze sono usate in un contesto di effetti di saturazione in spettroscopia, specialmente in spettroscopia a risonanza di spin (vedi Sez. 2.6, p. 27–28).

(13) Si veda Sez. 2.6, nota 9, p. 26.

(14) Il momento quadrupolare di una molecola può essere rappresentato sia come il tensore \mathbf{Q} , definito da un integrale esteso alla densità di carica ρ :

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

in cui α e β indicano x, y o z , o dal tensore $\boldsymbol{\Theta}$ con traccia nulla definito come

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

\mathbf{V}'' è la derivata seconda del potenziale elettronico:

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

Il contributo all'energia potenziale è quindi dato da

$$E_p = (1/2)\mathbf{Q} : \mathbf{V}'' = (1/2) \sum_\alpha \sum_\beta Q_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta}''$$

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>Unità SI</i>	<i>Note</i>
momento quadrupolare del nucleo	eQ	$eQ = 2 \langle \Theta_{zz} \rangle$	C m ²	15
tensore di gradiente di campo elettrico	\mathbf{q}	$q_{\alpha\beta} = -\partial^2 V / \partial \alpha \partial \beta$	V m ⁻²	
tensore di energia di interazione quadrupolare	χ	$\chi_{\alpha\beta} = eQq_{\alpha\beta}$	J	16
polarizzabilità elettrica della molecola	α	$\alpha_{ab} = \partial p_a / \partial E_b$	C ² m ² J ⁻¹	17
1-ma iper-polarizzabilità	β	$\beta_{abc} = \partial^2 p_a / \partial E_b \partial E_c$	C ³ m ³ J ⁻²	17
2-da iper-polarizzabilità	γ	$\gamma_{abcd} = \partial^3 p_a / \partial E_b \partial E_c \partial E_d$	C ⁴ m ⁴ J ⁻³	17
attività (di una sostanza radioattiva)	A	$A = -dN_B / dt$	Bq	18
costante (di velocità) di decadimento, di disintegrazione	λ, k	$A = \lambda N_B$	s ⁻¹	18
semivita	$t_{1/2}, T_{1/2}$	$N_B(t_{1/2}) = N_B(0) / 2$	s	18, 19
vita media, tempo di vita	τ	$\tau = 1 / \lambda$	s	19
ampiezza di livello	Γ	$\Gamma = \hbar / \tau$	J	
energia di disintegrazione	Q		J	
sezione d'urto	σ		m ²	
carica elettrodebole di un nucleo	Q_W	$Q_W \approx Z(1 - 4 \sin^2 \theta_W) - N$	1	20

(15) I momenti quadrupolari nucleari sono definiti convenzionalmente in modi diversi da quelli molecolari. Q ha le dimensioni di un'area ed e è la carica elementare. eQ è preso come il doppio del massimo valore atteso dell'elemento zz del tensore (vedi nota 14). I valori di Q di alcuni nuclei sono riportati nella Sez. 6.3, p. 121.

(16) Il tensore di energia di interazione quadrupolare nucleare χ è normalmente misurato in MHz e corrisponde al valore di eQq/h anche se h è normalmente omissso.

(17) La polarizzabilità α e le iper-polarizzabilità β, γ, \dots sono i coefficienti dell'espansione in serie del momento di dipolo \mathbf{p} in potenze dell'intensità di campo elettrico \mathbf{E} (vedi Sez. 2.3, nota 7, p. 16). L'espansione della componente a è data da

$$p_a = p_a^{(0)} + \sum_b \alpha_{ab} E_b + (1/2) \sum_{bc} \beta_{abc} E_b E_c + (1/6) \sum_{bcd} \gamma_{abcd} E_b E_c E_d + \dots$$

in cui α_{ab} , β_{abc} e γ_{abcd} sono elementi rispettivamente dei tensori α , β e γ di rango 2, 3 e 4. Le componenti di questi tensori sono contraddistinte da pedici $abc\dots$, come indicato nelle definizioni: il primo pedice a indica sempre la componente di p , ed i successivi le componenti del campo elettrico. La polarizzabilità e le iper-polarizzabilità hanno proprietà di simmetria. Perciò α è normalmente un tensore simmetrico e tutte le componenti di β sono nulle per una molecola con un centro di simmetria, ecc. Il valore della polarizzabilità è in genere indicato come $\alpha/4\pi\epsilon_0$, che è un volume. Il valore è comunemente espresso nell'unità \AA^3 (\AA non dovrebbe essere usato, vedi Sez. 2.6, nota 11, p. 27) o nell'unità a_0^3 (unità atomiche, vedi Sez. 3.9.1, p. 94). Commenti simili si possono fare per le iper-polarizzabilità con $\beta/(4\pi\epsilon_0)^2$ in unità di $a_0^5 e^{-1}$, $\gamma/(4\pi\epsilon_0)^3$ in unità di $a_0^7 e^{-2}$, ecc.

(18) N_B è il numero di entità B che decadono ($1 \text{ Bq} = 1 \text{ s}^{-1}$, vedi Sez. 3.4, p. 89).

(19) La semivita e la vita media sono normalmente misurate in anni (unità di misura a), vedi Sez. 7.2, nota 4, p. 137. $t_{1/2} = \tau \ln 2$ per decadimento esponenziale.

(20) La carica elettrodebole di un nucleo è data approssimativamente dal numero di neutroni N e di protoni Z con angolo di interazione debole θ_W (vedi Cap. 5, p. 111). È importante, nel calcolo di proprietà atomiche e molecolari, includere l'interazione nucleare debole [26].

2.6 SPETTROSCOPIA

Questa sezione è stata considerevolmente ampliata rispetto al manuale originale [1.a–1.c] e rispetto al corrispondente documento IUPAP [4]. Essa è basata sulle raccomandazioni del Comitato Congiunto per la Spettroscopia ICSU [27, 28] e sulla pratica corrente nel campo, che è ben rappresentata nei libri di Herzberg [29–31]. La Commissione IUPAC di Struttura Molecolare e Spettroscopia ha anche pubblicato raccomandazioni che sono state tenute in debito conto [32–43].

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>Unità SI</i>	<i>Note</i>
termine totale	T	$T = E_{\text{tot}}/hc$	m^{-1}	1, 2
numero d'onda della transizione	$\tilde{\nu}$	$\tilde{\nu} = T' - T''$	m^{-1}	1
frequenza della transizione	ν	$\nu = (E' - E'')/h$	Hz	
termine elettronico	T_e	$T_e = E_e/hc$	m^{-1}	1, 2
termine vibrazionale	G	$G = E_{\text{vib}}/hc$	m^{-1}	1, 2
termine rotazionale	F	$F = E_{\text{rot}}/hc$	m^{-1}	1, 2
costante di accoppiamento spin-orbita	A	$T_{\text{so}} = A \langle \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \rangle$	m^{-1}	1, 3
momenti di inerzia principali	$I_A; I_B; I_C$	$I_A \leq I_B \leq I_C$	kg m^2	
costanti rotazionali, in numeri d'onda	$\tilde{A}; \tilde{B}; \tilde{C}$	$\tilde{A} = h/8\pi^2 c I_A$	m^{-1}	1, 2
in frequenza	$A; B; C$	$A = h/8\pi^2 I_A$	Hz	
difetto inerziale	Δ	$\Delta = I_C - I_A - I_B$	kg m^2	
parametro di asimmetria	κ	$\kappa = \frac{2B - A - C}{A - C}$	1	4
costanti di distorsione centrifuga, riduzione S	$D_J; D_{JK}; D_K; d_1; d_2$		m^{-1}	5
riduzione A	$\Delta_J; \Delta_{JK}; \Delta_K; \delta_J; \delta_K$		m^{-1}	5
numero d'onda della vibrazione armonica	$\omega_e; \omega_r$		m^{-1}	6
costante di anarmonicità vibrazionale	$\omega_e x_e; x_{rs}; g_{tt'}$		m^{-1}	6

(1) In spettroscopia l'unità cm^{-1} è usata per la grandezza numero d'onda, e valore di termine e numero d'onda si riferiscono sempre al reciproco della lunghezza d'onda della radiazione equivalente nel vuoto. Il simbolo c nella definizione E/hc si riferisce alla velocità della luce nel vuoto. Dato che “numero d'onda” non è un numero, ISO suggerisce l'uso di “ripetenza” invece di usare numero d'onda [5,6]. L'uso del termine “numero d'onda” al posto dell'unità di misura cm^{-1} dev'essere evitato. (Nota: in italiano, il termine “ripetenza” non esiste)

(2) I valori di termine e le costanti rotazionali sono definite talora in unità di numeri d'onda (ad esempio $T = E/hc$) e talora in unità di frequenza (ad esempio $T = E/h$). Quando il simbolo usato è lo stesso, è opportuno distinguere le grandezze in numero d'onda con un accento circonflesso (e.g. $\tilde{\nu}, \tilde{T}, \tilde{A}, \tilde{B}, \tilde{C}$ per grandezze definite in unità di numeri d'onda), ma questa pratica non è universale.

(3) $\hat{\mathbf{L}}$ e $\hat{\mathbf{S}}$ sono rispettivamente operatori di orbitale e di spin elettronico.

(4) Sono anche in uso i parametri di asimmetria di Wang: per uno sferoide quasi prolato $b_p = (C - B)/(2A - B - C)$ e per uno quasi oblato $b_o = (A - B)/(2C - A - B)$.

(5) S e A stanno rispettivamente per le riduzioni simmetriche e asimmetriche dell'hamiltoniana rotazionale; vedi [44] per dettagli sulle rappresentazioni delle costanti di distorsione centrifuga.

(6) Per una molecola diatomica: $G(v) = \omega_e(v + \frac{1}{2}) - \omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 + \dots$. Per una molecola poliatomiche i $3N - 6$ modi vibrazionali ($3N - 5$ se lineare) sono indicati dagli indici r, s, t, \dots , oppure i, j, k, \dots . L'indice r è di norma assegnato in modo da aumentare col diminuire del numero d'onda, per ciascuna specie di simmetria iniziando dalle specie totalmente simmetriche.

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
numeri quantici vibrazionali	$v_r; l_t$		1	6
numero d'onda vibrazionale fondamentale	$\tilde{\nu}_r, \tilde{\nu}_r^0, \nu_r$	$\tilde{\nu}_r = T(v_r = 1) - T(v_r = 0)$	m^{-1}	6
costante ζ di Coriolis	ζ_{rs}^α		1	7
numeri quantici del momento angolare	vedi Sez. 2.6.1, p. 30			
grado di degenerazione, peso statistico	g, d, β		1	8
momento di dipolo elettrico di una molecola	$\mathbf{p}, \boldsymbol{\mu}$	$E_p = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}$	C m	9
momento dipolare di transizione di una molecola	\mathbf{M}, \mathbf{R}	$\mathbf{M} = \int \psi^{*'} \mathbf{p} \psi'' d\tau$	C m	9, 10

(6) (continua) L'indice t è riservato ai modi degeneri. La formula per il termine vibrazionale è

$$G(v) = \sum_r \omega_r (v_r + d_r/2) + \sum_{r \leq s} x_{rs} (v_r + d_r/2) (v_s + d_s/2) + \sum_{t \leq t'} g_{tt'} l_t l_{t'} + \dots$$

Un'altra formula comune per tale termine è definita rispetto allo stato base vibrazionale

$$T(v) = \sum_i v_i \tilde{\nu}_i' + \sum_{r \leq s} x_{rs}' v_r v_s + \sum_{t \leq t'} g_{tt}' l_t l_{t'} + \dots$$

Ciò è comunemente usato per gli elementi diagonali delle hamiltoniane vibrazionali effettive.

(7) Di frequente le costanti di accoppiamento di Coriolis $\xi_\alpha^{v'v}$ sono usate con unità cm^{-1} come costanti hamiltoniane effettive ($\alpha = x, y, z$). Per due vibrazioni fondamentali con numeri d'onda armonici ω_r e ω_s esse sono in relazione con ζ_{rs}^α tramite l'equazione ($v_r = 1$ e $v_s = 1$)

$$\xi_\alpha^{v'v} = \tilde{B}_\alpha \zeta_{rs}^\alpha \left[\sqrt{\omega_s/\omega_r} + \sqrt{\omega_r/\omega_s} \right]$$

dove \tilde{B}_α è la costante rotazionale α . Un'equazione simile vale per B_α se $\xi_\alpha^{v'v}$ è definito come una grandezza espressa in unità di frequenza.

(8) d è normalmente usato per la degenerazione vibrazionale e β per quella di spin nucleare.

(9) E_p è l'energia potenziale di un dipolo con momento elettrico \mathbf{p} in un campo elettrico di intensità \mathbf{E} . I momenti dipolari molecolari sono comunemente espressi nella unità di misura non-SI debye, dove $1 \text{ D} \approx 3.33564 \times 10^{-30} \text{ C m}$. L'unità SI C m non è conveniente per esprimere i momenti dipolari molecolari, ciò che produce il proseguimento dell'uso dell'unità debye (D) pur non ammesso. Un'alternativa migliore è di usare l'unità atomica ea_0 . Un altro modo di esprimere i momenti dipolari è di usare le lunghezze di dipolo elettrico $l_p = p/e$, analogamente al modo in cui sono usate le aree di quadrupolo nucleare (vedi Sez. 2.5, note 14 e 15, p. 23, 24 e Sez. 6.3, p. 121). Ciò fornisce la distanza tra due cariche elementari del dipolo equivalente ed una chiara illustrazione delle dimensioni molecolari (vedi anche Sez. 2.3, nota 8, p. 17).

Esempi	Momento dipolare			Lunghezza di dipolo
	SI		u.a.	
	$p/\text{C m}$	p/D	p/ea_0	l_p/pm
HCl	3.60×10^{-30}	1.08	0.425	22.5
H ₂ O	6.23×10^{-30}	1.87	0.736	38.9
NaCl	3.00×10^{-29}	9.00	3.54	187

(10) Per grandezze che descrivono intensità di linee e di banda si veda Sez. 2.7, p. 34–41.

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
distanze interatomiche,				11, 12
di equilibrio	r_e		m	
base media	r_z		m	
allo stato fondamentale	r_0		m	
dalla struttura	r_s		m	
di sostituzione	r_s		m	
coordinate vibrazionali,				11
interne	$R_i, r_i, \theta_j \dots$		(varie)	
di simmetria	S_j		(varie)	
normali				
aggiustate per la massa	Q_r		$\text{kg}^{1/2} \text{ m}$	
adimensionate	q_r		1	
costanti di forza vibrazionale,				
diatomiche	$f, (k)$	$f = \partial^2 V / \partial r^2$	$\text{J m}^{-2},$ N m^{-1}	11, 13
poliatomiche,				
coordinate interne	f_{ij}	$f_{ij} = \partial^2 V / \partial r_i \partial r_j$	(varie)	
coordinate di simmetria	F_{ij}	$F_{ij} = \partial^2 V / \partial S_i \partial S_j$	(varie)	
coordinate normali	$\phi_{rst\dots}, k_{rst\dots},$		m^{-1}	14
adimensionate	$C_{rst\dots}$			

risonanza di spin elettronico (RSE), risonanza paramagnetica elettronica (PRE):

rapporto giromagnetico	γ	$\gamma = \mu / \hbar \sqrt{S(S+1)}$	$\text{s}^{-1} \text{ T}^{-1}$	15
fattore g	g	$h\nu = g\mu_B B$	1	16
costante di accoppiamento				
iperfino				
nei liquidi	a, A	$\hat{H}_{\text{hfs}}/h = a \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{I}}$	Hz	17
nei solidi	\mathbf{T}	$\hat{H}_{\text{hfs}}/h = \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{T} \cdot \hat{\mathbf{I}}$	Hz	17

(11) Le distanze interatomiche (internucleari) e gli spostamenti vibrazionali sono comunemente espressi nell'unità non-SI ångström, da non usare, dove $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m} = 0.1 \text{ nm} = 100 \text{ pm}$. (12) L'uso di vari modi leggermente diversi per rappresentare le distanze interatomiche, indicati mediante pedici, derivano dal considerare contributi diversi ai valori medi vibrazionali; essi sono discussi in [45], dove sono riportate le strutture geometriche di molte molecole libere. Solo la distanza di equilibrio r_e è con buona approssimazione isotopicamente invariante. Il parametro di distanza effettiva r_0 è stimato tramite le costanti rotazionali per lo stato vibrazionale fondamentale ed ha un significato fisico più complicato per le molecole poliatomiche.

(13) Le costanti di forza sono comunemente espresse in $\text{mdyn \AA}^{-1} = \text{aJ \AA}^{-2}$ per coordinate di allungamento, $\text{mdyn \AA} = \text{aJ}$ per coordinate di flessione e $\text{mdyn} = \text{aJ \AA}^{-1}$ per interazioni del tipo allungamento-flessione. \AA non deve essere usato (vedi nota 11). Si veda [46] per ulteriori dettagli riguardo alle definizioni e notazioni sulle costanti di forza.

(14) Le costanti di forza, in coordinate normali adimensionate sono normalmente definite in unità di numeri d'onda dall'equazione $V/hc = \sum \phi_{rst\dots} q_r q_s q_t \dots$, dove la somma rispetto agli indici r, s, t, \dots delle coordinate normali non è limitata.

(15) L'ampiezza di γ è ottenuta dalle ampiezze dei momenti di dipolo magnetico μ e dal momento angolare (in ESR: spin elettronico \mathbf{S} per uno stato Σ , $L = 0$; in NMR: spin nucleare \mathbf{I}).

(16) Ciò fornisce un fattore g effettivo per un singolo spin ($S = 1/2$) in un campo esterno statico (vedi Sez. 2.5, nota 10, p. 23).

(17) \hat{H}_{hfs} è l'hamiltoniana di accoppiamento iperfino. $\hat{\mathbf{S}}$ è l'operatore di spin elettronico con numero quantico S (vedi Sez. 2.6.1, p. 30). Le costanti di accoppiamento iperfino sono date di solito in unità a , ma altre volte sono date in unità di induzione magnetica (G o T) ottenute dividendo per il fattore di conversione $g\mu_B/h$ che corrisponde all'unità SI Hz/T; $g_e\mu_B/h \approx 28.025 \text{ GHz T}^{-1} (= 2.8025 \text{ MHz G}^{-1})$, dove g_e è il fattore g per un elettrone libero.

Nome	Simbolo	Definizione	unità SI	Note
risonanza magnetica nucleare:				
densità di flusso magnetico statico di uno spettrometro RMN	\mathbf{B}_0		T	18
densità di flusso magnetico a radiofrequenza	$\mathbf{B}_1, \mathbf{B}_2$		T	18
tensore di interazione spin-rotazione	\mathbf{C}		Hz	19
accoppiamento spin-rotazione costante del nucleo A	C_A		Hz	19
tensore di interazione dipolare	\mathbf{D}		Hz	19
costante di accoppiamento dipolare tra nuclei A, B	D_{AB}	$D_{AB} = \frac{\mu_0 \hbar \gamma_A \gamma_B}{8\pi^2 r_{AB}^3}$	Hz	19
variabili in frequenza di uno spettro bidimensionale	$F_1, F_2;$ f_1, f_2		Hz	
operatore di spin nucleare per il nucleo A	$\hat{\mathbf{I}}_A, \hat{\mathbf{S}}_A$		1	20
numero quantico associato con $\hat{\mathbf{I}}_A$	I_A		1	
tensore di accoppiamento indiretto di spin	\mathbf{J}		Hz	
accoppiamento spin-spin nucleare mediante n legami	${}^n J$		Hz	21
costante di accoppiamento ridotta di spin-spin nucleare	K_{AB}	$K_{AB} = \frac{J_{AB}}{h} \frac{2\pi}{\gamma_A} \frac{2\pi}{\gamma_B}$	$T^2 J^{-1}, N A^{-2} m^{-3}$	20
autovalore di $\hat{\mathbf{I}}_{Az}$	m_A		1	22
magnetizzazione volumica macroscopica di equilibrio	\mathbf{M}_0		$J T^{-1} m^{-3}$	23
momento quadrupolare nucleare	eQ		$C m^2$	24

(17) (continua) Quando nei liquidi l'accoppiamento iperfine è isotropo, la costante di accoppiamento è uno scalare a . Nei solidi l'accoppiamento è anisotropo e la costante di accoppiamento è un tensore 3×3 \mathbf{T} . Un commento simile vale per il fattore g e per gli analoghi parametri RMN. Una convenzione per il fattore g è stata proposta, nella quale il segno di g è positivo quando il momento del dipolo è parallelo al suo momento angolare e negativo quando è antiparallelo. Una tale scelta fa sì che i fattori g per l'orbitale elettronico e per i momenti angolari di spin siano negativi [25] (vedi Sez. 2.5, nota 10, p. 23).

(18) Le densità di flusso a radiofrequenza di osservazione (\mathbf{B}_1) e di irraggiamento (\mathbf{B}_2) sono associate con frequenze ν_1, ν_2 e con frequenze angolari di nutazione Ω_1, Ω_2 (intorno a $\mathbf{B}_1, \mathbf{B}_2$, rispettivamente). Esse sono definite come $\Omega_1 = -\gamma \mathbf{B}_1$ e $\Omega_2 = -\gamma \mathbf{B}_2$ (vedi Sez. 2.3, note 8 e 9, p. 17).

(19) L'unità di misura delle intensità di interazione è l'hertz. In un contesto di rilassamento, l'intensità di interazione deve essere convertita in unità di frequenza angolare (rad s^{-1} , ma normalmente indicata in s^{-1} , vedi nota 25).

(20) $\hat{\mathbf{I}}_A$ e $\hat{\mathbf{S}}_A$ hanno componenti rispettivamente $\hat{I}_{Ax}, \hat{I}_{Ay}, \hat{I}_{Az}$ o $\hat{S}_{Ax}, \hat{S}_{Ay}, \hat{S}_{Az}$. Per un altro modo di definire operatori di momento angolare con unità di misura J s (vedi Sez. 2.6.1, p. 30).

(21) Parentesi possono essere usate per indicare le specie di nuclei accoppiati, ad esempio $J(^{13}\text{C}, ^1\text{H})$ o, inoltre, il percorso di accoppiamento, ad esempio $J(\text{POCF})$. Ove non sorga ambiguità, gli elementi interessati possono, in alternativa, essere indicati come pedici, ad esempio J_{CH} . Il nucleo di massa maggiore deve essere indicato per primo. Ciò vale anche per le costanti ridotte di accoppiamento.

(22) L'uso di M piuttosto che di m è frequentemente raccomandato, ma la maggior parte degli utilizzatori della RMN usano m per evitare confusione con la magnetizzazione.

(23) Ciò vale per un sistema di spin in presenza di una densità di flusso magnetico \mathbf{B}_0 .

(24) Si veda Sez. 2.5, note 14 e 15, p. 23 e 24.

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>unità SI</i>	<i>Note</i>
gradiente di campo elettrico	\mathbf{q}	$q_{\alpha\beta} = -\partial^2 V / \partial\alpha\partial\beta$	V m^{-2}	25
costante di accoppiamento quadrupolare nucleare	χ	$\chi = eq_{zz}Q/h$	Hz	19
dimensioni temporali per la RMN bidimensionale	t_1, t_2		s	
tempo di rilassamento spin-reticolo (longitudinale) del nucleo A	T_1^A		s	26, 27
tempo di rilassamento spin-spin (trasversale) del nucleo A	T_2^A		s	26
funzione d'onda di spin	$\alpha; \beta$			28
rapporto giromagnetico	γ	$\gamma = \mu/\hbar\sqrt{I(I+1)}$	$\text{s}^{-1} \text{T}^{-1}$	15, 29
spostamento (shift) chimico del nucleo A	δ_A	$\delta_A = (\nu_A - \nu_{\text{rif}})/\nu_{\text{rif}}$	1	30
incremento nucleare di Overhauser	η		1	31
magnetone nucleare	μ_N	$\mu_N = (m_e/m_p)\mu_B$	J T^{-1}	32
frequenza di risonanza di una molecola di riferimento	ν		Hz	18
del campo rf di osservazione	ν_1			
del campo di irraggiamento	ν_2			
frequenza di risonanza standardizzata del nucleo A	Ξ_A		Hz	33
tensore di schermo	σ		1	34
costante di schermo	σ_A	$B_A = (1 - \sigma_A)B_0$	1	34
tempo di correlazione	τ_c		s	26

(25) Il simbolo \mathbf{q} è raccomandato da IUPAC per il tensore gradiente di campo elettrico, in V m^{-2} (vedi Sez. 2.5, p. 24). Con \mathbf{q} definito in questo modo, la costante di accoppiamento quadrupolare è $\chi = eq_{zz}Q/h$. Comunque in RMN si indica il tensore gradiente di campo con $e\mathbf{q}$ e la costante di accoppiamento quadrupolare con $\chi = e^2q_{zz}Q/h$. \mathbf{q} ha componenti principali q_{XX}, q_{YY}, q_{ZZ} .

(26) I tempi di rilassamento ed i tempi di correlazione sono normalmente dati in unità di misura s. In senso stretto, ci si riferisce a rad^{-1} .

(27) Il tempo di rilassamento spin-reticolo del nucleo A in un sistema di riferimento che ruota con \mathbf{B}_1 è indicato con $T_{1\rho}^A$.

(28) Si veda Sez. 2.4, nota 9, p. 19.

(29) μ è la grandezza del momento magnetico nucleare.

(30) Lo spostamento (shift) chimico (della risonanza) del nucleo dell'elemento A (positivo quando il campione risuona con la frequenza elevata del riferimento); per le relative convenzioni si veda [47]. Ulteriori informazioni riguardo al solvente, ai riferimenti, o al nucleo di interesse possono essere fornite come apici o pedici, o in parentesi.

(31) L'effetto nucleare di Overhauser, $1 + \eta$, è definito come il rapporto tra l'intensità del segnale dello spin nucleare I , ottenuto in condizioni di saturazione dello spin nucleare S , e l'intensità del segnale di equilibrio dello spin nucleare I .

(32) m_e e m_p sono rispettivamente le masse elettroniche e protoniche. μ_B è il magnetone di Bohr (vedi Sez. 2.5, note 1 e 2, p. 22 e Cap. 5, p. 111).

(33) La frequenza di risonanza del nucleo dell'elemento A in un campo magnetico, come quella dei protoni nel tetrametilsilano (TMS) risuona esattamente a 100 MHz.

(34) I σ_A (ed i relativi termini del tensore di schermo e dei suoi componenti) devono riferirsi allo schermaggio in una scala assoluta (nei lavori teorici). Per lo schermaggio relativo ad un riferimento, devono essere usati quali $\sigma_A - \sigma_{\text{ref}}$. B_A è la corrispondente densità effettiva di flusso magnetico (vedi Sez. 2.3, nota 9, p. 17).

2.6.1 Per operatori e numeri quantici di momento angolare

Nella tabella seguente tutti i di operatore sono rapporti adimensionati, *angolare momento* diviso per \hbar . Sebbene questa sia la pratica universale per i numeri quantici, alcuni autori usano i di operatore per indicare *momento angolare*, nel qual caso gli operatori avrebbero unità di misura SI J s. La colonna intitolata “*asse Z*” indica la componente riferita allo spazio mentre la colonna intitolata “*asse z*” indica la componente riferita alla molecola lungo l’asse di simmetria (per molecole lineari o con superficie simmetrica), o lungo l’asse di quantizzazione.

<i>Momento angolare</i> ¹	<i>Simbolo del operatore</i>	<i>Simbolo del numero quantico</i>			<i>Note</i>
		<i>Totale</i>	<i>asse Z</i>	<i>asse z</i>	
orbitale elettronico	$\widehat{\mathbf{L}}$	L	M_L	Λ	2
di un solo elettrone	$\widehat{\mathbf{l}}$	l	m_l	λ	2
spin elettronico	$\widehat{\mathbf{S}}$	S	M_S	Σ	
di un solo elettrone	$\widehat{\mathbf{s}}$	s	m_s	σ	
orbitale elettronico più spin	$\widehat{\mathbf{L}} + \widehat{\mathbf{S}}$			$\Omega = \Lambda + \Sigma$	2
orbitale nucleare (rotazionale)	$\widehat{\mathbf{R}}$	R		K_R, k_R	
spin nucleare	$\widehat{\mathbf{I}}$	I	M_I		
vibrazionale interno					
superficie sferica	$\widehat{\mathbf{l}}$	$l(l\zeta)$		K_l	3
altre forme	$\widehat{\mathbf{j}}, \widehat{\boldsymbol{\pi}}$			$l(l\zeta)$	2, 3
somma di $R + L (+j)$	$\widehat{\mathbf{N}}$	N		K, k	2
somma di $N + S$	$\widehat{\mathbf{J}}$	J	M_J	K, k	2, 4
somm di $J + I$	$\widehat{\mathbf{F}}$	F	M_F		

(1) In ogni caso, l’operatore vettore e le sue componenti sono in relazione coi numeri quantici mediante equazioni di autovalore del tipo:

$$\widehat{\mathbf{J}}^2 \psi = J(J+1)\psi, \quad \widehat{J}_Z \psi = M_J \psi, \quad \text{e} \quad \widehat{J}_z \psi = K \psi,$$

dove le componenti M_J e K dei numeri quantici assumono valori interi o semi-dispari nel campo $-J \leq M_J \leq +J, -J \leq K \leq +J$. (Se i di operatore sono considerati rappresentare il *momento angolare*, invece del *momento angolare* diviso per \hbar , le equazioni di autovalore si scrivono $\widehat{\mathbf{J}}^2 \psi = J(J+1)\hbar^2 \psi, \widehat{J}_Z \psi = M_J \hbar \psi, \text{e} \widehat{J}_z \psi = K \hbar \psi$). l è frequentemente chiamato numero quantico azimutale e m_l numero quantico magnetico.

(2) Alcuni autori, specialmente Herzberg [29–31], considerano che le componenti dei numeri quantici Λ, Ω, l e K assumano solo valori positivi o nulli, cosicché ciascun valore diverso da zero di un numero quantico identifica due funzioni d’onda di segno opposto per la componente appropriata del momento angolare. Quando questa convenzione è usata, il simbolo minuscolo k viene normalmente considerato come un numero quantico dotato di segno, legato a K dalla relazione $K = |k|$. Tuttavia, negli studi teorici tutte le componenti dei numeri quantici sono in genere trattate come dotate di segno, potendo quindi assumere valori sia positivi che negativi.

(3) Non c’è una convenzione comune per indicare i momenti angolari vibrazionali interni; i j, π, p e G sono tutti usati. Per molecole con superficie simmetrica o lineare il componente di j sull’asse di simmetria è sempre indicato dal numero quantico l , dove l prende valori di 2 in 2 nel campo $-v \leq l \leq +v$. La corrispondente componente del momento angolare è dunque $l\zeta\hbar$, invece che $l\hbar$, dove ζ è la costante ζ di Coriolis (vedi nota 7, p. 26).

(4) Gli stati rotazionali con superficie asimmetrica sono indicati dal valore di J (o N se $S \neq 0$), con pedici K_a, K_c , dove il secondo è correlato al numero quantico $K = |k|$ rispettivamente in relazione agli assi a e c per forme simmetriche prolate e oblate.

Esempio $J_{K_a, K_c} = 5_{2,3}$ per un particolare livello rotazionale.

2.6.2 Per operatori di simmetria e indici per tipi di simmetria

(i) Operatori di simmetria in coordinate riferite allo spazio [41, 48]

identità	E
permutazione	P, p
inversione fissa nello spazio	$E^*, (P)$
permutazione-inversione	$P^* (= PE^*), p^*$

L'operazione di permutazione P permuta gli indici di nuclei identici.

Esempio nella molecola NH_3 , se i nuclei di idrogeno sono denominati 1, 2 e 3, allora $P = (123)$ zza la permutazione dove 1 è rimpiazzato da 2, 2 da 3, e 3 da 1.

L'operazione di inversione E^* inverte il segno di tutte le coordinate delle particelle rispetto all'origine fissa nello spazio, o rispetto al centro di massa fisso rispetto alla molecola se la traslazione è stata separata. Essa è anche chiamata operatore di parità e quindi è spesso indicato con P , sebbene ciò non possa accadere insieme all'uso di P per indicare una permutazione, la quale deve allora essere indicata con la lettera minuscola p . In uno spazio senza campo ed in assenza di violazione di parità [26], le vere autofunzioni della hamiltoniana sono o di parità positiva + (segno immutato) o di parità negativa - (segno mutato) in E^* . L'indice può essere usato per distinguere le due componenti prossime degeneri formate dallo sdoppiamento Λ (in uno stato elettronico degenere) o dallo sdoppiamento l (in uno stato vibrazionale degenere) in molecole lineari, o dallo sdoppiamento K (sdoppiamento di asimmetria) con superfici leggermente asimmetriche. Per molecole lineari, componenti sdoppiate Λ o l possono anche essere distinte dagli indici e o f [49]; per stati di singoletto esse corrispondono rispettivamente a parità + o - per J pari e vice versa per J dispari (ma vedi [49]). Per molecole lineari in stati elettronici degeneri i livelli sdoppiati Λ possono essere alternativamente indicati come $\Pi(A')$ o $\Pi(A'')$ (o $\Delta(A')$, $\Delta(A'')$ ecc.) [50]. Qui gli indici A' o A'' descrivono la simmetria della funzione d'onda elettronica per alti valori di J rispetto alla riflessione nel piano di rotazione (ma vedi [50] per ulteriori dettagli). Gli indici A' o A'' sono particolarmente utili nella correlazione di stati delle molecole coinvolte nelle reazioni o fotodissociazioni.

In relazione al tipo di simmetria, permutazione-inversione l'apice + o - può essere usato per indicare la parità, mentre una lettera è usata per indicare la simmetria rispetto al gruppo di permutazione. Si può anche usare la notazione sistematica derivata dalla teoria del gruppo simmetrico (gruppo di permutazione) S_n [51], nel qual caso il gruppo di inversione della permutazione è indicato da S_n^* , se si considera l'intero gruppo di permutazione. I tipi sono allora dati dalla partizione $P(S_n)$ [52-54]. Gli esempi danno i tipi per S_4^* , dove la partizione è convenzionalmente indicata in parentesi quadre []. Le convenzioni riguardanti questi non sono ancora consolidate ([2.b] e [39-41, 51-54]).

Esempi A_1^+ tipo totalmente simmetrico rispetto alla permutazione, parità positiva, $[4]^+$
 A_1^- tipo totalmente simmetrico rispetto alla permutazione, parità negativa, $[4]^-$
 E^+ tipo doppiamente degenere rispetto alla permutazione, parità positiva, $[2^2]^+$
 E^- tipo doppiamente degenere rispetto alla permutazione, parità negativa, $[2^2]^-$
 F_1^+ tipo triplamente degenere rispetto alla permutazione, parità positiva, $[2,1^2]^+$
 F_1^- tipo triplamente degenere rispetto alla permutazione, parità negativa, $[2,1^2]^-$

I simboli di Hermann-Mauguin delle operazioni di simmetria usati per i cristalli sono riportati nella Sez. 2.8.1 (ii), p. 44.

(ii) Operatori di simmetria in coordinate per molecola fissa (simboli di Schönflies)
[29–31]

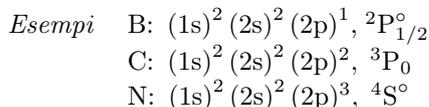
identità	E
rotazione di $2\pi/n$	C_n
riflessione	$\sigma, \sigma_v, \sigma_d, \sigma_h$
inversione	i
rotazione-riflessione	$S_n (= C_n\sigma_h)$

Se C_n è l'asse primario di simmetria, alle funzioni d'onda che non cambiano o cambiano segno applicando l'operatore C_n vengono dati indici di tipo rispettivamente A o B, mentre alle funzioni d'onda che sono moltiplicate per $\exp(\pm 2\pi i s/n)$ vengono dati indici di tipo E_s . Le funzioni d'onda che rimangono invariate o che cambiano segno applicando l'operatore i sono indicate rispettivamente con g (gerade) od u (ungerade). Le funzioni d'onda che rimangono invariate o che cambiano segno applicando l'operatore σ_h sono indicate con un indice di tipo che porta rispettivamente l'apice ' o ". Per maggiori dettagli, si veda [28–31].

2.6.3 Altri simboli e convenzioni usati in spettroscopia ottica

(i) Simboli per i termini degli stati atomici

Gli stati elettronici degli atomi sono indicati mediante il valore del numero quantico dello stato L . Il valore di L è indicato con una lettera maiuscola: S, P, D, F, G, H, I, mentre K, \dots , sono usate rispettivamente per $L = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$. Le corrispondenti lettere minuscole sono usate per i momenti angolari di orbitale di un singolo elettrone. Per atomi con più elettroni, la molteplicità di spin elettronico $(2S + 1)$ può essere indicata come un apice a sinistra della lettera e il valore del momento angolare totale J come un pedice a destra. Se L o S sono nulli, solo un valore di J è possibile e quindi il pedice non è normalmente indicato. Infine, la configurazione elettronica di un atomo è indicata fornendo l'occupazione di ciascun orbitale di un elettrone, come negli esempi qui sotto riportati.



Un apice destro $^{\circ}$ può essere usato per indicare una parità dispari (parità negativa $-$). L'omissione dell'apice $^{\circ}$ deve quindi essere interpretata come una parità pari (parità positiva $+$). Per evitare ambiguità può essere utile indicare sempre la parità con $+$ o $-$ mediante l'apice destro (cioè ${}^4S_{3/2}^-$ per N e ${}^3P_0^+$ per C).

(ii) Simboli per i termini degli stati molecolari

Gli stati atomici molecolari sono indicati dagli indici dei tipi di simmetria della funzione d'onda nel gruppo molecolare puntuale. Essi sono lettere maiuscole latine o greche. Così come per gli atomi, la molteplicità di spin $(2S + 1)$ può essere indicata con un apice a sinistra. Per molecole lineari il valore di $\Omega (= \Lambda + \Sigma)$ può essere indicato con un apice a destra (come J per gli atomi). Se il valore di Ω non è specificato, il simbolo del termine è usato per indicare tutti gli stati delle componenti e un pedice a destra r od i può essere aggiunto per indicare, rispettivamente, che le componenti sono regolari (cioè l'energia cresce con Ω) o invertite (l'energia decresce con Ω).

Gli stati elettronici delle molecole sono anche indicati con singole lettere secondo quanto segue. Lo stato base elettronico è indicato con X, stati eccitati con la stessa molteplicità sono indicati con A, B, C, \dots , in ordine ascendente di energia e stati eccitati di molteplicità differente sono indicati con lettere minuscole a, b, c, \dots . Nelle molecole poliatomiche (ma non in quelle diatomiche), si aggiunge generalmente un accento circonflesso (per esempio \tilde{X}) a questi indici empirici per prevenire possibili confusioni con gli indici di tipo di simmetria.

Infine, gli orbitali di singolo elettrone sono indicati con la lettera minuscola corrispondente e la configurazione elettronica è indicata in modo analogo a quella per gli atomi.

Esempi Lo stato base di CH è $(1\sigma)^2(2\sigma)^2(3\sigma)^2(1\pi)^1$, $X^2\Pi_r$, in cui la componente $^2\Pi_{1/2}$ sta al disotto della componente $^2\Pi_{3/2}$, come indicato dal pedice r che sta per 'regolare'.

Lo stato base di OH è $(1\sigma)^2(2\sigma)^2(3\sigma)^2(1\pi)^3$, $X^2\Pi_i$, in cui la componente $^2\Pi_{3/2}$ sta al disotto della componente $^2\Pi_{1/2}$, come indicato dal pedice i che sta per invertita.

I due stati elettronici inferiori di CH₂ sono $\cdots(2a_1)^2(1b_2)^2(3a_1)^2, \tilde{a}^1A_1,$
 $\cdots(2a_1)^2(1b_2)^2(3a_1)^1(1b_1)^1, \tilde{X}^3B_1.$

Lo stato base di C₆H₆ (benzene) è $\cdots(a_{2u})^2(e_{1g})^4, \tilde{X}^1A_{1g}.$

Gli stati vibrazionali delle molecole sono normalmente indicati mediante i numeri quantici vibrazionali di ciascun modo normale.

Esempi Per una molecola triatomica
 $(0,0,0)$ indica lo stato base,
 $(1,0,0)$ indica lo stato ν_1 , cioè $v_1 = 1$, e
 $(1,2,0)$ indica lo stato $\nu_1 + 2\nu_2$, cioè $v_1 = 1, v_2 = 2$, ecc.

(iii) Notazioni per le transizioni spettroscopiche

I livelli alto e basso di una transizione spettroscopica sono indicati rispettivamente da un apice ' e da un doppio apice ''.

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

Le transizioni sono normalmente indicate fornendo l'indice dello stato eccitato, seguito dall'indice dello stato base, separati da una lineetta, o da una freccia per indicare la direzione della transizione (emissione verso destra, assorbimento verso sinistra).

Esempi B—A indica una transizione tra uno stato di energia maggiore B ed uno stato di energia minore A;
B→A indica emissione da B a A;
B←A indica assorbimento da A a B;
A→B indica più in generale una transizione dallo stato iniziale A allo stato finale B in cinetica (vedi Sez. 2.12, p. 63);
 $(0,2,1) \leftarrow (0,0,1)$ indica la banda calda $2\nu_2 + \nu_3 - \nu_3$ in una molecola triatomica non lineare.

Una notazione più compatta [55] può essere usata nelle transizioni vibroniche o vibrazionali in molecole poliatomiche con molti modi normali, in cui ciascun indice r di vibrazione è indicato con un apice v'_r e un apice v''_r che indicano i valori dello stato elettronico superiore e di quello inferiore del numero quantico vibrazionale. Quando $v'_r = v''_r = 0$ l'indice corrispondente è omissso.

Esempi 1_0^1 indica la transizione $(1,0,0)-(0,0,0)$;
 $2_0^2 3_1^1$ indica la transizione $(0,2,1)-(0,0,1)$.

Per transizioni nello stesso stato elettronico si può usare la notazione matriciale o una freccia.

Esempio 2_{20} o $2_{2\leftarrow 0}$ indica una transizione vibrazionale nello stato elettronico base da $v_2 = 0$ a $v_2 = 2$.

Per transizioni rotazionali, il valore di $\Delta J = J' - J''$ è indicato usando lettere per le righe di una banda rotazionale: $\Delta J = -2, -1, 0, 1$ e 2 sono indicati rispettivamente come la riga O, riga P, riga Q, riga R e riga S. La variazione di altri numeri quantici (come K per una molecola top simmetrica, o K_a e K_c per una superficie asimmetrica) può essere indicata con l'aggiunta di lettere minuscole come apice sinistro, con la stessa regola.

Esempio PQ indica una "riga Q tipo p" in una molecola con superficie simmetrica, cioè $\Delta K = -1$, $\Delta J = 0$.

Il valore di K nel livello inferiore è indicato da un pedice a destra, ad esempio $^PQ_{K''}$ o $^PQ_2(5)$ che indica una transizione da $K'' = 2$ a $K' = 1$, essendo il valore di J'' aggiunto tra parentesi.

2.7 RADIAZIONE ELETTROMAGNETICA

Le grandezze ed i simboli qui riportati sono stati selezionati sulla base delle raccomandazioni di IUPAP [4], ISO [5.f], e IUPAC [56–59] e tenendo conto della pratica nel campo della fisica dei laser. Sono anche stati considerati termini usati in fotochimica [60], ma queste definizioni non sono ancora consolidate. I termini usati per le radiazioni elettromagnetiche ionizzanti ad alta energia, la chimica delle radiazioni, la radiochimica e la chimica nucleare non sono inclusi né discussi.

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>unità SI</i>	<i>Note</i>
lunghezza d'onda	λ		m	
velocità della luce				
nel vuoto	c_0	$c_0 = 299\,792\,458\text{ m s}^{-1}$	m s^{-1}	1
in un mezzo	c	$c = c_0/n$	m s^{-1}	1
numero d'onda nel vuoto	$\tilde{\nu}$	$\tilde{\nu} = \nu/c_0 = 1/\lambda$	m^{-1}	2
numero d'onda (in un mezzo)	σ	$\sigma = 1/\lambda$	m^{-1}	
frequenza	ν	$\nu = c/\lambda$	Hz	
frequenza angolare, pulsazione	ω	$\omega = 2\pi\nu$	s^{-1} , rad s^{-1}	
indice di rifrazione	n	$n = c_0/c$	1	
costante di Planck	h		J s	
costante di Planck divisa per 2π	\hbar	$\hbar = h/2\pi$	J s	
energia radiante	Q, W		J	3
densità di energia radiante	ρ, w	$\rho = dQ/dV$	J m^{-3}	3
densità spettrale di energia radiante				3
in termini di frequenza	ρ_ν, w_ν	$\rho_\nu = d\rho/d\nu$	$\text{J m}^{-3}\text{ Hz}^{-1}$	
in termini di numero d'onda	$\rho_{\tilde{\nu}}, w_{\tilde{\nu}}$	$\rho_{\tilde{\nu}} = d\rho/d\tilde{\nu}$	J m^{-2}	
in termini di lunghezza d'onda	ρ_λ, w_λ	$\rho_\lambda = d\rho/d\lambda$	J m^{-4}	
potenza radiante (potenza radiante per unità di tempo)	P, Φ	$P = dQ/dt$	W	3 3
intensità radiante	I_e	$I_e = dP/d\Omega$	W sr^{-1}	3, 4
eccitanza radiante	M	$M = dP/dA_{\text{sorgente}}$	W m^{-2}	3, 4

(1) Quando non c'è pericolo di ambiguità il pedice indicante la condizione in vuoto è spesso omissso. n indica l'indice di rifrazione nel mezzo.

(2) L'unità cm^{-1} è ampiamente usata per la grandezza numero d'onda nel vuoto.

(3) I simboli per grandezze come *energia radiante* e *intensità radiante* sono anche usati per le corrispondenti grandezze che riguardano la radiazione visibile, cioè grandezze luminose e fotoniche. Il pedice e relativo all'energia, v per visibile e f per fotonico possono essere aggiunti per evitare possibili confusioni. Le unità delle grandezze luminose sono derivate dall'unità base candela (cd) (vedi Sez. 3.3, p. 87).

<i>Esempi</i>	intensità radiante	$I_e, I_e = dP/d\Omega,$	unità SI: W sr^{-1}
	intensità luminosa	$I_v,$	unità SI: cd
	intensità fotonica	$I_f,$	unità SI: $\text{s}^{-1}\text{ sr}^{-1}$

L'intensità radiante I_e dev'essere distinta dalla semplice intensità o irradianza I (vedi nota 5). Pedici addizionali possono essere aggiunti per distinguere le grandezze assorbite (ass), trasmesse (tr) o riflesse (rfl), quando necessario.

(4) L'intensità radiante è la potenza radiante per unità di angolo solido nella direzione del punto dal quale la sorgente di radiazione è osservata. L'eccitanza radiante è la potenza radiante totale emessa per unità d'area A_{sorgente} della sorgente di radiazione, per l'intero spettro delle lunghezze d'onda. La radianza è l'intensità radiante per unità d'area della sorgente di radiazione; Θ è l'angolo tra la normale all'elemento di area e la direzione di osservazione quale vista dalla sorgente.

Nome	Simbolo	Definizione	unità SI	Note
radianza	L	$I_e = \int L \cos \Theta dA_{\text{sorgente}}$	$\text{W sr}^{-1} \text{m}^{-2}$	3, 4
intensità, irradianza	I, E	$I = dP/dA$	W m^{-2}	3, 5
intensità spettrale, irradianza spettrale	$I_{\tilde{\nu}}, E_{\tilde{\nu}}$	$I_{\tilde{\nu}} = dI/d\tilde{\nu}$	W m^{-1}	6
fluenza	$F, (H)$	$F = \int I dt = \int (dP/dA) dt$	J m^{-2}	7
coefficiente di Einstein, emissione spontanea	A_{ij}	$dN_j/dt = - \sum_i A_{ij} N_j$	s^{-1}	8, 9
emissione stimolata o indotta	B_{ij}	$dN_j/dt = - \sum_i \rho_{\tilde{\nu}}(\tilde{\nu}_{ij}) B_{ij} N_j$	s kg^{-1}	
assorbimento	B_{ji}	$dN_i/dt = - \sum_j \rho_{\tilde{\nu}}(\tilde{\nu}_{ij}) B_{ji} N_i$	s kg^{-1}	
emissività	ε	$\varepsilon = M/M_{\text{bb}}$	1	10
costante di Stefan-Boltzmann	σ	$M_{\text{bb}} = \sigma T^4$	$\text{W m}^{-2} \text{K}^{-4}$	10
estensione ottica, capacità di raccolta della luce	$E, (e)$	$E = A\Omega = P/L$	$\text{m}^2 \text{sr}$	11

(5) L'intensità o irradianza è la potenza di radiazione per unità d'area che è ricevuta da una superficie. L'intensità, simbolo I , è normalmente usata in discussioni riguardanti raggi collimati di luce, come nelle applicazioni della legge di Beer-Lambert nelle analisi spettrometriche. L'intensità di radiazione elettromagnetica può anche essere definita come il modulo del vettore di Poynting (vedi Sez. 2.3, p. 17 e Sez. 7.4, p. 149). In fotochimica il termine intensità è talora usato col significato di intensità della radiazione e non deve essere confuso con l'irradianza, per cui il simbolo E è preferito [60].

(6) Le grandezze spettrali possono essere definite rispetto alla frequenza ν , alla lunghezza d'onda λ , o al numero d'onda $\tilde{\nu}$; si veda qui il termine densità spettrale di energia della radiazione.

(7) La fluenza è usata in fotochimica per specificare l'energia per unità d'area fornita in un dato intervallo di tempo (per esempio da un impulso laser); la fluenza è l'integrale nel tempo del rate(?) di fluenza. Talora una distinzione va fatta tra irradianza e velocità di fluenza [60]; la velocità di fluenza si riduce all'irradianza per un raggio di luce incidente da una singola direzione perpendicolare alla superficie. L'integrale nel tempo dell'irradianza è chiamato esposizione della radiazione.

(8) I pedici i e j si riferiscono a stati individuali; $E_j > E_i$, $E_j - E_i = hc\tilde{\nu}_{ij}$, e $B_{ji} = B_{ij}$ nelle equazioni di definizione. I coefficienti B sono definiti qui come densità di energia $\rho_{\tilde{\nu}}$ in termini di numero d'onda; in alternativa essi possono essere definiti usando la densità di energia in termini di frequenza ρ_{ν} , nel qual caso B ha l'unità SI m kg^{-1} , e $B_{\nu} = c_0 B_{\tilde{\nu}}$, dove B_{ν} è definito usando la frequenza e $B_{\tilde{\nu}}$ usando il numero d'onda. Le equazioni di definizione si riferiscono ai contributi *parziali* della velocità di variazione.

(9) La relazione tra i coefficienti di Einstein A e $B_{\tilde{\nu}}$ è $A = 8\pi hc_0 \tilde{\nu}^3 B_{\tilde{\nu}}$. Il coefficiente B di assorbimento o emissione stimolata di Einstein può anche essere messo in relazione col momento di transizione tra gli stati i ed j ; per una transizione di dipolo elettrico la relazione è

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

in cui la somma su ρ si estende ai tre assi cartesiani riferiti allo spazio, e μ_{ρ} è la componente riferita allo spazio dell'operatore di momento dipolare. Anche queste equazioni usano una definizione basata sul numero d'onda del coefficiente di Einstein B (cioè $B_{\tilde{\nu}}$ invece che B_{ν}).

(10) L'emissività di un campione è il rapporto della eccitanza radiante emessa dal campione e l'eccitanza radiante emessa da un corpo nero alla stessa temperatura; M_{bb} è quest'ultima grandezza. Si veda il Cap. 5, p. 112 per il valore della costante di Stefan-Boltzmann.

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>unità SI</i>	<i>Note</i>
risoluzione	$\delta\tilde{\nu}$		m^{-1}	2, 12, 13
potere risolvente	R	$R = \tilde{\nu}/\delta\tilde{\nu}$	1	13
campo spettrale libero	$\Delta\tilde{\nu}$	$\Delta\tilde{\nu} = 1/2l$	m^{-1}	2, 14
finezza	f	$f = \Delta\tilde{\nu}/\delta\tilde{\nu}$	1	14
fattore di qualità	Q	$Q = 2\pi\nu \frac{W}{-dW/dt}$	1	14, 15
prima costante di radiazione	c_1	$c_1 = 2\pi hc_0^2$	W m^2	
seconda costante di radiazione	c_2	$c_2 = hc_0/k_B$	K m	16
trasmittanza, fattore di trasmissione	τ, T	$\tau = P_{\text{tr}}/P_0$	1	17, 18
assorbanza, fattore di assorbimento	α	$\alpha = P_{\text{ass}}/P_0$	1	17, 18
riflettanza, fattore di riflessione	ρ, R	$\rho = P_{\text{rifl}}/P_0$	1	17, 18
assorbanza (decadica)	A_{10}, A	$A_{10} = -\lg(1 - \alpha_i)$	1	17–20
assorbanza neperiana	A_e, B	$A_e = -\ln(1 - \alpha_i)$	1	17–20
coefficiente di assorbimento, (lineare) decadico	a, K	$a = A_{10}/l$	m^{-1}	18, 21
(lineare) neperiano	α	$\alpha = A_e/l$	m^{-1}	18, 21
molare decadico	ε	$\varepsilon = a/c = A_{10}/cl$	$\text{m}^2 \text{mol}^{-1}$	18, 21, 22
molare neperiano	κ	$\kappa = \alpha/c = A_e/cl$	$\text{m}^2 \text{mol}^{-1}$	18, 21, 22

(11) L'estensione ottica è una caratteristica di uno strumento ottico. Essa è una misura della capacità di raccolta della luce, cioè della potenza trasmessa rispetto alla radianza dalla sorgente. A è l'area della sorgente (o del diaframma del ricettore); Ω è l'angolo solido sotteso dal diaframma del ricettore visto dalla sorgente.

(12) La definizione precisa di risoluzione dipende dalla forma della linea, ma normalmente considera l'intera larghezza della riga presa a metà altezza dell'intensità (FWHM) su una scala di numero d'onda, $\delta\tilde{\nu}$, o di frequenza, $\delta\nu$. Frequentemente è preferibile l'uso del potere risolvente, con dimensione 1.

(13) Questa grandezza caratterizza le prestazioni di uno spettrometro o il grado di monocromaticità di una linea spettrale (o di un raggio laser). Può essere definito usando la frequenza ν , o la lunghezza d'onda λ .

(14) Queste grandezze caratterizzano una cavità di Fabry-Perot, o una cavità laser. l è la lunghezza della cavità, e $2l$ è la lunghezza del cammino di andata e ritorno. Il campo spettrale libero è l'intervallo di numeri d'onda tra successivi modi longitudinali della cavità.

(15) W è l'energia immagazzinata nella cavità e $-dW/dt$ è la velocità di decadimento dell'energia immagazzinata. Q è anche riferita alla larghezza di riga di un singolo modo di cavità. Quindi alto Q significa cavità con linee strette.

(16) k_B è la costante di Boltzmann (vedi Sez. 2.9, p. 45 e Cap. 5, p. 111).

(17) Se la diffusione e la luminescenza possono essere trascurati, $\tau + \alpha + \rho = 1$. In spettroscopia ottica le proprietà interne (indicate dal pedice i) sono definite in modo da escludere effetti di superficie ed effetti della cuvette quali le perdite per riflessione, cosicché $\tau_i + \alpha_i = 1$ se la diffusione e la luminescenza possono essere trascurati. Ciò porta alla forma usuale della legge di Beer-Lambert, $P_{\text{tr}}/P_0 = I_{\text{tr}}/I_0 = \tau_i = 1 - \alpha_i = \exp(-\kappa cl)$. Quindi $A_e = -\ln(\tau_i)$, $A_{10} = -\lg(\tau_i)$.

(18) In spettroscopia tutte queste grandezze sono comunemente considerate come definite in termini di intensità spettrale, $I_{\tilde{\nu}}(\tilde{\nu})$, perciò esse sono considerate come funzioni del numero d'onda $\tilde{\nu}$ (o di frequenza ν) nello spettro. Quindi, per esempio, il coefficiente di assorbimento $\alpha(\tilde{\nu})$ come funzione del numero d'onda $\tilde{\nu}$ definisce lo spettro di assorbimento del campione; analogamente $T(\tilde{\nu})$ definisce lo spettro di trasmittanza. Gli spettroscopisti usano $I(\tilde{\nu})$ invece di $I_{\tilde{\nu}}(\tilde{\nu})$.

Nome	Simbolo	Definizione	unità SI	Note
sezione d'urto d'assorbimento netto	σ_{netto}	$\sigma_{\text{netto}} = \kappa/N_A$	m^2	23
coefficiente di assorbimento integrato su $\tilde{\nu}$	A, \bar{A}	$A = \int \kappa(\tilde{\nu}) d\tilde{\nu}$	m mol^{-1}	23, 24
	S	$S = A/N_A$	m	23, 24
	\bar{S}	$\bar{S} = (1/pl) \int \ln(I_0/I) d\tilde{\nu}$	$\text{Pa}^{-1} \text{m}^{-2}$	23–25
	Γ	$\Gamma = \int \kappa(\tilde{\nu})\tilde{\nu}^{-1} d\tilde{\nu}$	$\text{m}^2 \text{mol}^{-1}$	23, 24
sezione d'urto integrata di assorbimento netto	G_{netta}	$G_{\text{netta}} = \int \sigma_{\text{netta}}(\tilde{\nu})\tilde{\nu}^{-1} d\tilde{\nu}$	m^2	23, 24
indice di assorbimento, indice di rifrazione immaginario	k	$k = \alpha/4\pi\tilde{\nu}$	1	26
indice di rifrazione complesso	\hat{n}	$\hat{n} = n + ik$	1	
refrazione molare, rifrattività molare	R	$R = \left(\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \right) V_m$	$\text{m}^3 \text{mol}^{-1}$	
angolo di rotazione ottica	α		1, rad	27
potere rotatorio ottico specifico	$[\alpha]_{\lambda}^{\theta}$	$[\alpha]_{\lambda}^{\theta} = \alpha/\gamma l$	$\text{rad m}^2 \text{kg}^{-1}$	27
potere rotatorio ottico molare	α_m	$\alpha_m = \alpha/cl$	$\text{rad m}^2 \text{mol}^{-1}$	27

(19) Le definizioni qui riportate mettono in relazione l'assorbanza A_{10} o A_e con l'assorbanza *interna* α_i (vedi nota 17). Tuttavia, il pedice i è spesso omesso per l'assorbanza α . I dati sperimentali devono includere correzioni per le riflessioni, la diffusione e la luminescenza, se l'assorbanza deve avere un significato assoluto. In pratica, l'assorbanza è misurata come il logaritmo del rapporto tra luce trasmessa attraverso la cella di riferimento (contenente il solo solvente) e quella trasmessa attraverso la cella contenente il campione.

(20) In [57] il simbolo A è usato per indicare l'assorbanza decadica e B per quella neperiana.

(21) l è la lunghezza del cammino di assorbimento, e c è la concentrazione in quantità di sostanza.

(22) Il coefficiente di assorbimento molare decadico ε è talvolta chiamato nella letteratura “coefficiente di estinzione”. Sfortunatamente, i valori numerici del “coefficiente di estinzione” sono spesso riportati senza indicare l'unità di misura; in assenza di tale indicazione, si deve ritenere in genere che l'unità di misura sia $\text{mol}^{-1} \text{dm}^3 \text{cm}^{-1}$ (si veda anche [61]). La parola “estinzione” dovrebbe più correttamente essere riservata alla somma degli effetti di assorbimento, diffusione e luminescenza.

(23) Si noti che queste grandezze danno il coefficiente di assorbimento netto κ , la sezione d'urto di assorbimento netto σ_{net} , ed i valori netti di A, S, \bar{S}, Γ e G_{net} , nel senso che essi sono la somma di effetti dovuti a assorbimento ed emissione indotta (si veda la discussione nella Sez. 2.7.1, p. 38).

(24) Gli integrali che definiscono queste grandezze possono essere specificati indicando i limiti di integrazione tra parentesi, ad esempio $G(\tilde{\nu}_1, \tilde{\nu}_2)$. In generale, l'integrazione è intesa estesa ad una linea di assorbimento o alla banda di assorbimento. A, \bar{S} e Γ sono misure dell'intensità della banda in termini di concentrazione in quantità di sostanza; $G_{\text{netta}} = \Gamma/N_A$ e $S = A/N_A$ sono le corrispondenti grandezze molari. Per singole linee spettrali la relazione tra queste grandezze e le probabilità di transizione di Einstein è discussa in Sez. 2.7.1, p. 38. Il simbolo \bar{A} può essere usato per il coefficiente di assorbimento integrato A quando vi è possibilità di confusione con il coefficiente di emissione spontanea di Einstein A_{ij} .

Il coefficiente di assorbimento integrato di una transizione elettronica è spesso espresso in termini di intensità dell'oscillatore o “valore f ”, che è adimensionato, o in termini di probabilità di transizione di Einstein A_{ij} tra gli stati in questione, con unità SI s^{-1} . Mentre A_{ij} ha un significato semplice ed universalmente accettato (vedi nota 9, p. 35), ci sono usi differenti di f . Comunemente la conversione è in pratica data dalla equazione

$$f_{ij} = [(4\pi\varepsilon_0) m_e c_0 / 8\pi^2 e^2] \lambda^2 A_{ij} \quad \text{o} \quad f_{ij} \approx (1.4992 \times 10^{-14}) (A_{ij}/\text{s}^{-1}) (\lambda/\text{nm})^2$$

dove λ è la lunghezza d'onda della transizione e i ed j si riferiscono ai singoli stati. Per transizioni elettroniche fortemente ammesse f è dell'ordine dell'unità.

2.7.1 Grandezze e simboli che riguardano la misura dell'intensità di assorbimento

Nella maggior parte degli esperimenti per la misura dell'intensità spettrale di assorbimento, la misura dà l'assorbimento netto dovuto agli effetti dell'assorbimento dal livello di energia inferiore m a quello superiore n , meno l'emissione indotta da n a m . Poiché le popolazioni dipendono dalla temperatura, anche l'assorbimento netto misurato ne dipende. Ciò vale per tutte le grandezze definite nella tabella riguardanti la misura dell'intensità di assorbimento, sebbene per le transizioni dove $hc_0\tilde{\nu} \gg kT$ la dipendenza dalla temperatura sia piccola e per $\tilde{\nu} > 1000 \text{ cm}^{-1}$ alle temperature ordinarie l'emissione indotta possa in genere essere trascurata.

In un approccio più di base, si definisce la sezione d'urto $\sigma_{ji}(\tilde{\nu})$ per una transizione radiativa indotta dallo stato i allo stato j (in entrambi i casi di assorbimento o emissione). Per un esperimento ideale di assorbimento con soltanto lo stato inferiore i popolato, la sezione d'urto integrata di assorbimento per la transizione $j \leftarrow i$ è data da

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

Se i livelli di energia superiore ed inferiore sono entrambi degeneri, l'intensità della linea osservata è data dalla somma estesa alle transizioni di tutti gli stati i del livello di energia inferiore m e di tutti gli stati j del livello di energia superiore n , moltiplicando ogni termine per la frazione di popolazione p_i dello stato iniziale corrispondente. Trascurando l'emissione indotta, ciò conduce a

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

Se l'emissione indotta è significativa, allora la sezione d'urto integrata netta diventa

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

Qui p_i e p_j indicano le frazioni di popolazione degli stati i e j ($p_i = \exp\{-E_i/kT\}/q$ in equilibrio termico, dove q è la funzione di partizione); p_m e p_n indicano le frazioni corrispondenti delle popolazioni dei livelli di energia, mentre d_m e d_n indicano le degenerazioni ($p_i = p_m/d_m$, ecc.).

(Note, continua)

(25) La grandezza \bar{S} è usata solo per i gas; è definita in modo simile ad A , eccetto che la pressione parziale p del gas rimpiazza la concentrazione c . Alle basse pressioni, $p_i \approx c_i RT$, cosicché \bar{S} ed A sono legate dall'equazione $\bar{S} \approx A/RT$. Quindi, se \bar{S} è usato per indicare intensità di linea o di banda, la temperatura deve essere specificata. I_0 è l'intensità incidente, I quella trasmessa, quindi $\ln(I_0/I) = -\ln(I/I_0) = -\ln(1 - P_{\text{abs}}/P_0) = A_e$ (vedi anche le note 17 e 19, p. 36).

(26) α nella definizione è il coefficiente neperiano di assorbimento.

(27) La convenzione di segno per l'angolo di rotazione ottica è la seguente: α è positivo se il piano di polarizzazione è ruotato in senso orario come visto guardando verso la sorgente di luce. Se la rotazione è in senso antiorario, α è negativo. La rotazione ottica dovuta ad un soluto in soluzione può essere specificata da una indicazione del tipo

$$\alpha(589.3 \text{ nm}, 20^\circ\text{C}, \text{saccarosio}, 10 \text{ g dm}^{-3} \text{ in H}_2\text{O}, \text{spessore } 10 \text{ cm}) = +0.6647^\circ$$

La stessa informazione può essere data indicando, o il potere rotatorio specifico $\alpha/\gamma l$, o il potere rotatorio molare α/cl , dove γ è la concentrazione in massa, c è la concentrazione in quantità di sostanza, ed l lo spessore. La maggior parte delle tabelle danno il potere rotatorio specifico, indicato con $[\alpha]_\lambda^\theta$. La lunghezza d'onda della luce utilizzata λ (sovente la linea D del sodio) e la temperatura in gradi Celsius θ sono scritte convenzionalmente come un pedice ed apice al simbolo di potere rotatorio specifico $[\alpha]$. Per fasi liquide e solide pure $[\alpha]_\lambda^\theta$ è definito analogamente come $[\alpha]_\lambda^\theta = \alpha/\rho l$, dove ρ è la densità in massa.

I poteri rotatori specifici sono automaticamente chiamati di norma *rotazioni specifiche*, e purtroppo sono indicati senza unità di misura. L'assenza dell'unità significa normalmente che l'unità è $^\circ \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1} \text{ dm}^{-1}$ per liquidi puri e soluzioni, o $^\circ \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1} \text{ mm}^{-1}$ per solidi, dove $^\circ$ è usato per indicare i gradi di angolo piano.

L'intensità di assorbimento G_{ji} , ed i coefficienti di Einstein A_{ij} e B_{ji} rappresentano misure fondamentali dell'intensità di linea tra i singoli stati i e j ; la relazione tra di essi è data dalle equazioni generali

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

Infine, per una transizione di dipolo elettrico queste grandezze sono in relazione con il quadrato del momento di transizione secondo l'equazione

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

dove il momento di transizione M_{ji} è dato da

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

Qui la somma è rispetto alle componenti dei tre assi cartesiani riferiti allo spazio e μ_{ρ} è la componente riferita allo spazio del momento di dipolo elettrico. Se si inseriscono i valori numerici delle costanti, la relazione tra G_{ji} e M_{ji} può essere espressa praticamente come

$$(G_{ji}/\text{pm}^2) \approx 41.6238 |M_{ji}/\text{D}|^2$$

dove $1 \text{ D} \approx 3.335\,641 \times 10^{-30} \text{ C m}$ (D è il simbolo di debye) [62].

Le intensità di banda di assorbimento integrato netto sono normalmente caratterizzate da una delle grandezze A, S, \bar{S}, Γ , o G_{netta} quali definite nella tabella. La relazione tra di esse è data (approssimativamente) dalle equazioni

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

Tuttavia, solo la prima uguaglianza è esatta. Le relazioni riguardanti A, \bar{S} e S comportano dividere il numero d'onda centrale $\tilde{\nu}_0$ della banda, per correggere il fatto che A, \bar{S} e S sono ottenute per integrazione rispetto al numero d'onda invece che rispetto al logaritmo del numero d'onda usato per G_{netta} e Γ . Questa correzione è solo approssimativa per una banda (sebbene l'errore sia trascurabile per intensità di singola linea nei gas). La relazione con \bar{S} comporta l'ipotesi che il gas sia ideale (che è circa esatto a basse pressioni) e richiede anche di tener conto della temperatura. Quindi, le grandezze Γ e G_{netta} sono molto semplicemente legate a grandezze fondamentali quali le probabilità di transizione di Einstein ed il momento di transizione e sono le grandezze da preferirsi per indicare le intensità di linea integrate o di banda.

La situazione è ulteriormente complicata da certi autori che usano il simbolo S per una qualunque delle grandezze di cui sopra, in particolare per una qualunque delle grandezze suindicate A, S e \bar{S} . Pertanto è particolarmente importante definire le grandezze ed i simboli usati quando si riportano intensità integrate.

Per transizioni tra stati individuali può essere usata una qualunque delle grandezze fondamentali $G_{ji}, B_{\tilde{\nu},ji}, A_{ij}$, o $|M_{ji}|$; le relazioni sono date qui sopra e sono esatte. Il coefficiente di assorbimento integrato A non deve essere confuso con il coefficiente di Einstein A_{ij} (e nemmeno con l'assorbanza, per la quale pure si usa il simbolo A). Quando si potrebbe fare confusione, si raccomanda di scrivere \bar{A} per l'intensità di banda espressa come coefficiente di assorbimento integrato rispetto al numero d'onda.

Le unità SI ed altre unità di uso comune per A, S, \bar{S}, Γ e G sono indicate nella tavola seguente. In essa sono anche dati i coefficienti numerici di conversione per le unità comunemente usate, da A, S, \bar{S} , e Γ a G_{netta} .

<i>Grandezza</i>	<i>Unità SI</i>	<i>Unità usate comunemente</i>	<i>Coefficienti di conversione</i>
A, \bar{A}	m mol^{-1}	km mol^{-1}	$(G/\text{pm}^2) = 16.605\ 40 \frac{A/(\text{km mol}^{-1})}{\tilde{\nu}_0/\text{cm}^{-1}}$
\bar{S}	$\text{Pa}^{-1} \text{m}^{-2}$	$\text{atm}^{-1} \text{cm}^{-2}$	$(G/\text{pm}^2) = 1.362\ 603 \times 10^{-2} \frac{(\bar{S}/\text{atm}^{-1} \text{cm}^{-2})(T/\text{K})}{(\tilde{\nu}_0/\text{cm}^{-1})}$
S	m	cm	$(G/\text{pm}^2) = 10^{20} \frac{(S/\text{cm})}{\tilde{\nu}_0/\text{cm}^{-1}}$
Γ	$\text{m}^2 \text{mol}^{-1}$	$\text{cm}^2 \text{mol}^{-1}$	$(G/\text{pm}^2) = 1.660\ 540 \times 10^{-4} (\Gamma/\text{cm}^2 \text{mol}^{-1})$
G	m^2	pm^2	

Le grandezze che riguardano l'intensità di assorbimento spettrale e le relazioni tra queste grandezze sono discusse in [62–65], ed una lista di misure pubblicate per le intensità di linea e di banda per gli spettri infrarossi di fase gassosa si trova in [63–65]. Per le relazioni tra le intensità di assorbimento spettroscopico e le frequenze di transizione radiativa cinetica si veda anche [66].

2.7.2 Convenzioni per le intensità di assorbimento nelle fasi condensate

Se le misure di trasmissione sono accuratamente corrette per la riflessione ed altre perdite, l'assorbimento, il coefficiente di assorbimento ed il coefficiente di assorbimento integrato A , quali sono già stati descritti, possono essere usati per le fasi condensate. Le correzioni usate sono in genere adeguate per bande deboli e medie per liquidi e solidi semplici e per bande di soluti in soluzioni diluite. Per effettuare correzioni accurate con bande intense in liquidi e solidi semplici, è necessario determinare le parti reale ed immaginaria dell'indice di rifrazione, n e k , del campione sull'intero campo spettrale misurato. Quindi, i valori risultanti di n e k sono sufficienti a fornire una descrizione completa dell'intensità di assorbimento nella fase condensata. Per i liquidi, questa procedura richiede la conoscenza di n e k della finestra della cella. Gli spettri di riflessione sono anche usati per calcolare n e k . Per solidi non isotropi tutte le proprietà relative all'intensità devono essere definite rispetto a specifici assi del cristallo. Se gli spettri di n e k sono noti, gli spettri di ogni proprietà ottica o di grandezza misurata del campione possono essere ottenuti da essi. I fisici preferiscono usare la permittività relativa complessa (vedi Sez. 2.3, p. 16), $\hat{\epsilon}_r = \epsilon_r' + i\epsilon_r'' = \text{Re } \hat{\epsilon}_r + i\text{Im } \hat{\epsilon}_r$ invece dell'indice di rifrazione complesso \hat{n} . $\epsilon_r' = \text{Re } \hat{\epsilon}_r$ indica la parte reale e $\epsilon_r'' = \text{Im } \hat{\epsilon}_r \hat{\epsilon}_r$ quella immaginaria. La relazione tra di esse è stabilita da $\hat{\epsilon}_r = \hat{n}^2$, cosicchè $\epsilon_r' = n^2 - k^2$ e $\epsilon_r'' = 2nk$.

Gli indici di rifrazione e le permittività relative sono proprietà macroscopiche della fase. Per ottenere informazioni sulle molecole nel liquido libero da effetti dielettrici del volume, il campo locale che agisce sulle molecole, \mathbf{E}_{loc} , deve essere determinato in funzione del campo applicato \mathbf{E} . Una semplice relazione è stabilita dal campo locale di Lorentz, $\mathbf{E}_{\text{loc}} = \mathbf{E} + \mathbf{P}/3\epsilon_0$, dove \mathbf{P} è la polarizzazione dielettrica. Questo campo locale è basato sull'ipotesi che le interazioni a lungo raggio siano isotrope, cosa che è realistica solo per i liquidi ed i solidi isotropi.

L'uso del campo locale porta alla formula di Lorentz-Lorentz (questa relazione è normalmente chiamata la formula di Clausius-Mossotti quando applicata a campi statici) generalizzata per trattare materiali assorbenti per un numero d'onda qualsiasi

$$\frac{\hat{\epsilon}_r(\tilde{\nu}) - 1}{\hat{\epsilon}_r(\tilde{\nu}) + 2} = \frac{1}{3\epsilon_0 V_m} \hat{\alpha}_m(\tilde{\nu})$$

Qui V_m è il volume molare e $\hat{\alpha}_m$ la polarizzabilità molare complessa (vedi Sez. 2.3, nota 7, p. 16). La parte immaginaria α_m'' della polarizzabilità molare complessa descrive l'assorbimento da parte delle molecole nel liquido, corretto per gli effetti dielettrici isotropi di lungo raggio ma influenzato dall'ambiente anisotropo costituito dalle prime molecole più prossime. La parte reale α_m' è la polarizzabilità molare (vedi le Sez. 2.3 e 2.5) al limite di frequenza infinita.

I coefficienti di assorbimento integrato di una banda di assorbimento molecolare nella fase condensata è descritta da [67, 68] (vedi nota 1, che segue)

$$C_j = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{\text{banda } j} \tilde{\nu} \alpha_m''(\tilde{\nu}) d\tilde{\nu}$$

L'analisi teorica di solito assume che la banda misurata include la transizione $j \leftarrow i$ con numero d'onda di centro banda $\tilde{\nu}_0$ e tutte le sue transizioni di banda. Quindi

$$C_j = \frac{N_A \pi}{3hc_0(4\pi\epsilon_0)} \tilde{\nu}_0 g(|M_{ji}|^2)$$

dove $\tilde{\nu}_0 g(|M_{ji}|^2)$ è la somma pesata per popolazione rispetto a tutte le transizioni che danno un contributo del numero d'onda moltiplicato per il quadrato del momento di dipolo elettrico della transizione (g in generale è una funzione dipendente dalla temperatura che include effetti dovuti alla inomogeneità della struttura di banda). La relazione tradizionale tra i valori della fase gassosa e di quella liquida del coefficiente di assorbimento di una data banda j è l'equazione di Polo-Wilson [69]

$$A_{\text{liq}} = \frac{(\bar{n}^2 + 2)^2}{9\bar{n}} A_{\text{gas}}$$

dove \bar{n} è il valore della media stimata di n rispetto alla banda di assorbimento. Questa relazione è valida alle seguenti condizioni:

- (i) le bande sia sufficientemente deboli, cioè $2nk + k^2 \ll n^2$;
- (ii) l'approssimazione di doppia armonicità porti ad una approssimazione teoricamente soddisfacente della struttura di banda; in questo caso la funzione g è essenzialmente indipendente dalla temperatura ed i valori per le fasi gassosa e liquida di g sono uguali;
- (iii) $\tilde{\nu}_0 |M_{ji}|^2$ sono identiche nelle fasi gassosa e liquida.

Una relazione recente e più generale, che richiede solo il soddisfacimento della seconda e terza condizione è $A_{\text{gas}} = 8\pi^2 C_j$. Ne consegue che, per bande che soddisfano tutte e tre le condizioni,

$$A_{\text{liq}} = 8\pi^2 C_j \frac{(\bar{n}^2 + 2)^2}{9\bar{n}}$$

Questa relazione mostra che, mentre l'indice di rifrazione n è incorporato automaticamente nel coefficiente di assorbimento integrato C_j per un liquido, il tradizionale coefficiente di assorbimento A necessita di essere ulteriormente corretto per la permittività o la rifrazione.

(1) L'unità SI di questa grandezza è m mol^{-1} . Nel sistema Gaussiano di unità di misura la definizione di C_j come $C_j = \int_{\text{banda } j} \tilde{\nu} \alpha_m''(\tilde{\nu}) d\tilde{\nu}$ è spesso adottata, con unità di misura cm mol^{-1} .

2.8 STATO SOLIDO

Le grandezze ed i loro simboli qui riportati sono stati selezionati da liste più completa di IUPAP [4] e ISO [5.n]. Si vedano anche le *International Tables for Crystallography*, Volume A [70].

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
vettore di reticolo,				
vettore di reticolo di Bravais	\mathbf{R}, \mathbf{R}_0		m	
traslazione fondamentale	$\mathbf{a}_1; \mathbf{a}_2; \mathbf{a}_3, \mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$		m	1
vettori di base del reticolo cristallino	$\mathbf{a}; \mathbf{b}; \mathbf{c}$			
(angolare) fondamentale				
vettori di base di traslazione del reticolo reciproco	$\mathbf{b}_1; \mathbf{b}_2; \mathbf{b}_3, \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_k = 2\pi\delta_{ik}$ $\mathbf{a}^*; \mathbf{b}^*; \mathbf{c}^*$		m^{-1}	2
(angolare) vettore del reticolo reciproco	\mathbf{G}	$\mathbf{G} = h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3 =$ $h_1 \mathbf{a}^* + h_2 \mathbf{b}^* + h_3 \mathbf{c}^*$ $\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi m = 2\pi \sum_i n_i h_i$	m^{-1}	1, 3
lunghezze della cella unitaria	$a; b; c$		m	
angoli della cella unitaria	$\alpha; \beta; \gamma$		rad, 1	
lunghezze della cella unitaria reciproca	$a^*; b^*; c^*$		m^{-1}	
angoli della cella unitaria reciproca	$\alpha^*; \beta^*; \gamma^*$		rad, 1	
coordinate frazionarie	$x; y; z$	$x = X/a$	1	4
fattore di diffusione atomica	f	$f = E_a/E_e$	1	5
fattore di struttura	$F(h, k, l)$	$F = \sum_{n=1}^N f_n e^{2\pi i(hx_n + ky_n + lz_n)}$	1	6
con indici h, k, l				
distanza fra i piani reticolari	d		m	
angolo di Bragg	θ	$n\lambda = 2d \sin \theta$	rad, 1	7
ordine di riflessione	n		1	
parametri di ordine,				
a corto raggio	σ		1	
a lungo raggio	s		1	
vettore di Burgers	\mathbf{b}		m	
vettore di posizione della particella	$\mathbf{r}_j, \mathbf{R}_j$		m	8
vettore di posizione di equilibrio di un ione	\mathbf{R}_0		m	
vettore di spostamento di un ione	\mathbf{u}	$\mathbf{u} = \mathbf{R} - \mathbf{R}_0$	m	
fattore di Debye-Waller	B, D	$D = e^{-2\langle(\mathbf{q}\cdot\mathbf{u})^2\rangle}$	1	9

(1) n_1, n_2 e n_3 sono interi. a, b e c sono anche chiamati costanti reticolari.

(2) I vettori di reticolo reciproco sono talora definiti da $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_k = \delta_{ik}$.

(3) m è un intero con $m = n_1 h + n_2 k + n_3 l$.

(4) X indica la lunghezza della coordinata della dimensione.

(5) E_a e E_e indicano rispettivamente le ampiezze di diffusione degli atomi e degli elettroni isolati.

(6) N è il see atomi della cella unitaria.

(7) λ è la lunghezza d'onda della radiazione incidente.

(8) Per distinguere tra i vettori di posizione dell'elettrone e dello ione si usano rispettivamente lettere minuscole e maiuscole. Il pedice j è relativo alla particella j .

(9) $\hbar\mathbf{q}$ è il trasferimento di momento nella diffusione di neutroni, $\langle \rangle$ indica mediato per l'effetto termico.

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
numero d'onda angolare di Debye	q_D, k_D	$k_D = (C_i 6\pi^2)^{1/3}$	m^{-1}	10
frequenza angolare di Debye	ω_D	$\omega_D = k_D c_0$	s^{-1}	10
frequenza di Debye	ν_D	$\nu_D = \omega_D/2\pi$	s^{-1}	
numero d'onda di Debye	$\tilde{\nu}_D$	$\tilde{\nu}_D = \nu_D/c_0$	m^{-1}	10
temperatura di Debye	Θ_D	$\Theta_D = h\nu_D/k_B$	K	
parametro di Grüneisen	γ, Γ	$\gamma = \alpha V/\kappa C_V$	1	11
costante di Madelung	α, \mathcal{M}	$E_{\text{coul}} = \frac{\alpha N_A z_+ z_- e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0}$	1	12
densità di stati	N_E	$N_E = dN(E)/dE$	$J^{-1} m^{-3}$	13
densità (spettrale) dei modi vibrazionali	N_ω, g	$N_\omega = dN(\omega)/d\omega$	$s m^{-3}$	14
tensore resistività	$\boldsymbol{\rho}, (\rho_{ik})$	$\mathbf{E} = \boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{j}$	Ωm	15
tensore conducibilità	$\boldsymbol{\sigma}, (\sigma_{ik})$	$\mathbf{j} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E}$	$S m^{-1}$	15
resistività residua	ρ_R		Ωm	
tensore di conducibilità termica	λ_{ik}	$\mathbf{J}_q = -\boldsymbol{\lambda} \cdot \nabla T$	$W m^{-1} K^{-1}$	15
tempo di rilassamento	τ	$\tau = l/v_F$	s	16
coefficiente di Lorentz	L	$L = \lambda/\sigma T$	$V^2 K^{-2}$	17
coefficiente di Hall	A_H, R_H	$\mathbf{E} = \rho \mathbf{j} + R_H(\mathbf{B} \times \mathbf{j})$	$m^3 C^{-1}$	
forza termoelettrica	E		V	18
coefficiente di Peltier	Π	$E = \Pi \frac{\Delta T}{T}$	V	18
coefficiente di Thomson	$\mu, (\tau)$	$\mu = \Pi/T$	$V K^{-1}$	
densità di numero, concentrazione di (in) numero	C, n, p		m^{-3}	19
energia di banda proibita	E_g		J	20
energia di ionizzazione di donatore	E_d		J	20
energia di ionizzazione di accettore	E_a		J	20
energia di Fermi	E_F, ϵ_F	$\epsilon_F = \lim_{T \rightarrow 0} \mu$	J	20
funzione lavoro, funzione lavoro dell'elettrone	Φ	$\Phi = E_\infty - E_F$	J	21
vettore angolare d'onda, vettore di propagazione	\mathbf{k}, \mathbf{q}	$k = 2\pi/\lambda$	m^{-1}	22
funzione di Bloch	$u_k(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = u_k(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$	$m^{-3/2}$	23
densità di carica elettronica	ρ	$\rho(\mathbf{r}) = -e\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$	$C m^{-3}$	23, 24
massa effettiva	m^*		kg	25
mobilità	μ	$\mathbf{v}_{\text{drift}} = \mu \mathbf{E}$	$m^2 V^{-1} s^{-1}$	25
rapporto di mobilità	b	$b = \mu_n/\mu_p$	1	
coefficiente di diffusione	D	$\mathbf{j} = -D\nabla C$	$m^2 s^{-1}$	25, 26
lunghezza di diffusione	L	$L = \sqrt{D\tau}$	m	25, 26
temperatura caratteristica (Weiss)	θ, θ_W		K	
temperatura di Curie	T_C		K	
temperatura di Néel	T_N		K	

(10) C_i è la densità di ioni, c_0 è la velocità della luce nel vuoto. q_D è uguale a 2π volte l'inverso della lunghezza d'onda di taglio di Debye dell'onda di reticolo elastico.

(11) α è il coefficiente di espansione cubica, V il volume, κ la compressibilità isoterma e C_V la capacità termica a volume costante.

(12) E_{coul} è l'energia di interazione elettrostatica per mole di paia di ioni con cariche z_+e e $-z_-e$.

2.8.1 Simboli per i piani e le direzioni nei cristalli

indici di Miller di una faccia di cristallo, o di un singolo piano reticolare	(hkl) o $(h_1h_2h_3)$
indici di riflessione di Bragg dal gruppo di piani paralleli (hkl)	hkl o $h_1h_2h_3$
indici di un gruppo di tutte le facce del cristallo simmetricamente equivalenti, o di piani reticolari	$\{hkl\}$ o $\{h_1h_2h_3\}$
indici di una direzione del reticolo (asse di zona)	$[uvw]$
indici di un gruppo di direzioni simmetricamente equivalenti del reticolo	$\langle uvw \rangle$

In ciascuno di questi casi, quando i simboli letterali sono rimpiazzati da numeri è normale omettere le virgole. Per un singolo piano, o per una faccia del cristallo, o per una specifica direzione, un numero negativo è indicato da un trattino sopra il numero.

Esempio ($\bar{1}10$) indica i piani paralleli $h = -1, k = 1, l = 0$.

(i) Simboli per i reticoli cristallini

primitivo	P
a facce-centrate	F
a corpo centrato	I
a base centrata	A;B;C
romboedrico	R

(ii) Simboli di Hermann-Mauguin per le operazioni di simmetria

Operazione	Simbolo	Esempi
rotazione di ordine n	n	1; 2; 3; 4; 6
inversione di ordine n	\bar{n}	$\bar{1}; \bar{2}; \bar{3}; \bar{4}; \bar{6}$
rototraslazione di ordine n (o elicogira)	n_k	$2_1; 3_1; 3_2; \dots$
riflessione	m	
riflessione con traslazione (o slittopiano)	$a; b; c; n; d$	

(Note, continua)

(13) $N(E)$ è il numero totale degli stati di energia elettronica minore di E , diviso per il volume.

(14) $N(\omega)$ è il numero totale di modi vibrazionali con frequenza angolare minore di ω , diviso il volume.

(15) I tensori possono essere sostituiti dalle loro corrispondenti grandezze scalari in mezzi isotropi. \mathbf{J}_q è il vettore di flusso termico o densità di corrente termica.

(16) La definizione vale per elettroni nei metalli; l è il percorso libero medio e v_F è la velocità dell'elettrone nella sfera di Fermi.

(17) λ e σ sono le conducibilità termica ed elettrica in mezzi isotropi.

(18) Le sostanze alle quali il simbolo si applica sono indicate da pedici. La forza termoelettrica è una differenza di potenziale elettrico indotta dal gradiente del potenziale chimico.

(19) Specifiche densità di numero sono indicate con pedici: per gli elettroni $n_n, n_-, (n)$; per le lacune $n_p, n_+, (p)$; per i donatori n_d ; per gli accettori n_a ; per la densità intrinseca di numero $n_i (n_i^2 = n_+ n_-)$.

(20) L'unità comunemente usata per questa grandezza è il eV. μ è il potenziale chimico per entità.

(21) E_∞ è l'energia dell'elettrone a riposo ed a distanza infinita [71].

(22) \mathbf{k} è usato per particelle, \mathbf{q} per fononi. Qui λ è la lunghezza d'onda.

(23) $\psi(\mathbf{r})$ è una funzione d'onda di elettrone singolo.

(24) La densità totale di carica è ottenuta sommando rispetto a tutti gli elettroni.

(25) I pedici n e p od $-$ e $+$ possono essere aggiunti per indicare rispettivamente elettroni o lacune.

(26) j è la densità di flusso di particelle. D è il coefficiente di diffusione e τ il tempo di vita.

2.9 TERMODINAMICA STATISTICA

I nomi e simboli qui riportati sono in accordo con le raccomandazioni di IUPAP [4] e ISO [5.h].

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>Unità SI</i>	<i>Note</i>
numero di entità	N		1	
densità di numero di entità,	C	$C = N/V$	m^{-3}	
costante di Avogadro	L, N_A	$L = N/n$	mol^{-1}	1
costante di Boltzmann	k, k_B		J K^{-1}	
costante dei gas (molare)	R	$R = Lk$	$\text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1}$	
vettore di posizione molecolare	$\mathbf{r}(x, y, z)$		m	
vettore di velocità molecolare	$\mathbf{c}(c_x, c_y, c_z),$ $\mathbf{u}(u_x, u_y, u_z),$ $\mathbf{v}(v_x, v_y, v_z)$	$\mathbf{c} = d\mathbf{r}/dt$	m s^{-1}	
vettore di momento molecolare	$\mathbf{p}(p_x, p_y, p_z)$	$\mathbf{p} = m\mathbf{c}$	kg m s^{-1}	2
funzione di distribuzione della velocità (velocity)	$f(c_x)$	$f = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{mc_x^2}{2kT}\right)$	$\text{m}^{-1} \text{s}$	2
funzione di distribuzione della velocità (speed)	$F(c)$	$F = 4\pi c^2 \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mc^2}{2kT}\right)$	$\text{m}^{-1} \text{s}$	2
velocità media	$\bar{c}, \bar{u}, \bar{v},$ $\langle c \rangle, \langle u \rangle, \langle v \rangle$	$\bar{c} = \int cF(c) dc$	ms^{-1}	
coordinate generalizzate	q		(varie)	3
momento generalizzato	p	$p = \partial L / \partial \dot{q}$	(varie)	3
volume nello spazio delle fasi	Ω	$\Omega = (1/h) \int p dq$	1	
probabilità	P, p		1	
peso statistico, degenerazione	g, d, W, ω, β		1	4
numero (cumulativo) di stati	W, N	$W(E) = \sum_i H(E - E_i)$	1	5, 6
densità di stati	$\rho(E)$	$\rho(E) = dW(E)/dE$	J^{-1}	
funzione di partizione, somma sugli stati, molecola singola	q, z	$q = \sum_i g_i \exp(-E_i/kT)$	1	6
insieme canonico, (sistema, o insieme)	Q, Z	$Q = \sum_i g_i \exp(-E_i/kT)$	1	6

(1) n è la quantità di sostanza, (enpletia). Mentre il simbolo N_A è usato in onore di Amedeo Avogadro, il simbolo L è usato in onore di Josef Loschmidt.

(2) m è la massa della particella. In inglese c_x è 'velocity' e c è 'speed'.

(3) Se q è una lunghezza allora p è un momento. Nella definizione di p , L indica il Lagrangiano.

(4) β è usato talora per il peso statistico di spin e la degenerazione è anche chiamata politropia. essa è il numero di autofunzioni di energia linearmente indipendenti per la stessa energia.

(5) $H(x)$ è la funzione di Heaviside (vedi Sez. 4.2, p. 107), W o $W(E)$ è il numero totale di stati quantici con energia minore di E .

(6) E_i indica l'energia del livello i -mo di una molecola o sistema quantico in questione e g_i indica la sua degenerazione.

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>unità SI</i>	<i>Note</i>
insieme microcanonico	Ω, z, Z	$Z = \sum_{i=1}^Z 1$	1	
funzione di partizione, somma sugli stati, insieme gran canonico	Ξ		1	
numero di simmetria	σ, s		1	
parametro reciproco dell'energia	β	$\beta = 1/kT$	J^{-1}	
temperatura caratteristica	Θ, θ		K	7
attività assoluta	λ	$\lambda_B = \exp(\mu_B/RT)$	1	8
operatore densità	$\hat{\rho}, \hat{\sigma}$	$\hat{\rho} = \sum_k p_k \Psi_k\rangle\langle\Psi_k $	1	9
elemento di matrice di densità	$\mathbf{P}, \boldsymbol{\rho}$ P_{mn}, ρ_{mn}	$\mathbf{P} = \{P_{mn}\}$ $P_{mn} = \langle\phi_m \hat{\rho} \phi_n\rangle$	1	10
entropia statistica	S	$S = -k \sum_i p_i \ln p_i$	J K^{-1}	11

(7) Temperature caratteristiche particolari sono indicate da pedici, per esempio rotazionale $\Theta_r = hc\tilde{B}/k$, vibrazionale $\Theta_v = hc\tilde{\nu}/k$, di Debye $\Theta_D = hc\tilde{\nu}_D/k$, di Einstein $\Theta_E = hc\tilde{\nu}_E/k$. Θ deve essere preferito a θ per evitare confusione con la temperatura Celsius.

(8) La definizione si applica alle entità B . μ_B è il potenziale chimico (vedi Sez. 2.11, p. 57).

(9) $|\Psi_k\rangle$ si riferisce allo stato quantico k del sistema e p_k alla probabilità dello stato in un insieme. Se $p_k = 1$ per un dato stato k significa che si sta considerando uno stato puro, oppure una miscela.

(10) La matrice di densità \mathbf{P} è definita dai suoi elementi di matrice P_{mn} in un insieme di stati base ϕ_m . In alternativa, si può scrivere $P_{mn} = \sum_k p_k c_m^{(k)} c_n^{(k)*}$, dove $c_m^{(k)}$ è il coefficiente (complesso) di ϕ_m nell'espansione di $|\Psi_k\rangle$ sugli stati base $\{\phi_i\}$.

(11) Nell'espressione dell'entropia statistica, k è la costante di Boltzmann e p_i la popolazione media o probabilità per un livello quantico. L'entropia (massima) di equilibrio per un insieme microcanonico risulta quindi essere $S = k \ln Z$. Una varietà di altri insiemi possono essere definiti, oltre il microcanonico, canonico, o gran canonico.

2.10 CHIMICA GENERALE

I simboli dati da IUPAP [4] e da ISO [5.d,5.h] sono in accordo con le raccomandazioni qui fornite.

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>unità SI</i>	<i>Note</i>
numero di entità (esempio: molecole, atomi, ioni, unità di formula)	N		1	
quantità di sostanza	n	$n_B = N_B/L$	mol	1, 2
costante di Avogadro	L, N_A		mol ⁻¹	3
massa di un atomo, massa atomica	m_a, m		kg	
massa di una entità (molecola, unità di formula)	m, m_f		kg	4
costante di massa atomica	m_u	$m_u = m_a(^{12}\text{C})/12$	kg	5
massa molare	M	$M_B = m/n_B$	kg mol ⁻¹	2, 6, 7
costante di massa molare	M_u	$M_u = m_u N_A$	kg mol ⁻¹	7, 8
massa molecolare relativa, (massa molare relativa, peso molecolare)	M_r	$M_r = m_f/m_u$	1	8
massa atomica relativa, (peso atomico)	A_r	$A_r = m_a/m_u$	1	8
volume molare	V_m	$V_{m,B} = V/n_B$	m ³ mol ⁻¹	2, 6, 7
frazione di massa	w	$w_B = m_B / \sum_i m_i$	1	2

(1) Le parole “di sostanza” possono essere sostituite dalla specificazione dell’entità, ad esempio “quantità di atomi di ossigeno” o “quantità di molecole di ossigeno (o di diossigeno, O₂)”. Si noti che “quantità di ossigeno” può essere ambiguo e quindi dev’essere usato solo se il significato è chiaro dal contesto (si veda anche la discussione in Sez. 2.10.1 (v), p. 53).

Esempio Quando la quantità di O₂ è uguale a 3 mol, $n(\text{O}_2) = 3$ mol, la quantità di (1/2) O₂ è uguale a 6 mol, e $n((1/2) \text{O}_2) = 6$ mol. Quindi $n((1/2) \text{O}_2) = 2n(\text{O}_2)$.

In inglese talora viene anche usato “chemical amount” o, abbreviato, “amount”.

(2) La definizione si applica ad entità B che devono sempre essere indicate da un pedice o tra parentesi, ad esempio n_B o $n(\text{B})$. Con la composizione chimica si devono usare le parentesi, $n(\text{O}_2)$.

(3) Il simbolo N_A è usato in onore di Amedeo Avogadro, il simbolo L in onore di Josef Loschmidt.

(4) Si noti che la “unità di formula” non è una unità di misura (esempi nella Sez. 2.10.1 (iii), p. 50).

(5) m_u è uguale all’unità di massa atomica unificata, con simbolo u, ad esempio $m_u = 1$ Da (vedi Sez. 3.7, p. 92). Il dalton, simbolo Da, è talora usato come nome alternativo alla unità di massa atomica unificata.

(6) La definizione si applica alla sostanza pura, dove m è la massa totale e V è il volume totale. Tuttavia, grandezze corrispondenti possono anche essere usate per una miscela come m/n ed V/n , dove $n = \sum_i n_i$. Queste grandezze sono chiamate rispettivamente massa molare media e volume molare medio.

(7) Questi nomi, che includono il termine “molare”, impropriamente usano il nome di una *unità di misura* per la descrizione di una *grandezza*, cosa che andrebbe evitata.

(8) Per ragioni storiche i termini “peso molecolare” e “peso atomico” sono ancora usati. Per le molecole, M_r rappresenta la massa molecolare relativa o “peso molecolare”. Per gli atomi, M_r rappresenta la massa atomica relativa o “peso atomico”, ed il simbolo A_r viene talora usato. M_r può anche essere chiamato massa molare relativa, $M_{r,B} = M_B/M_u$, dove $M_u = 1$ g mol⁻¹. I pesi atomici standard sono riportati in Sez. 6.2, p. 117.

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>unità SI</i>	<i>Note</i>
frazione in volume	ϕ	$\phi_B = V_B / \sum V_i$	1	2, 9
frazione molare, frazione di quantità di sostanza,	x, y	$x_B = n_B / \sum_i n_i$	1	2, 10
pressione (totale)	$p, (P)$		Pa	2, 11
pressione parziale	p_B	$p_B = y_B p$	Pa	12
concentrazione in massa, (densità in massa)	γ, ρ	$\gamma_B = m_B / V$	kg m ⁻³	2, 13, 14
concentrazione di numero di entità, densità di numero di entità	C, n	$C_B = N_B / V$	m ⁻³	2, 13, 15
concentrazione di quantità, di sostanza, concentrazione	$c, [B]$	$c_B = n_B / V$	mol m ⁻³	2, 13, 16
solubilità	s	$s_B = c_B$ (di soluzione satura)	mol m ⁻³	2, 17
molalità	m, b	$m_B = n_B / m_A$	mol kg ⁻¹	2, 7, 14
concentrazione superficiale	Γ	$\Gamma_B = n_B / A$	mol m ⁻²	2, 18
numero stechiometrico	ν		1	19
avanzamento di reazione,	ξ	$\xi = (n_B - n_{B,0}) / \nu_B$	mol	19
grado di reazione	α	$\alpha = \xi / \xi_{\max}$	1	20

(9) Qui V_B e V_i sono i volumi dei componenti in questione prima della miscelazione. Siccome sono possibili altre definizioni, ad esempio in ISO 31 [5], il termine non deve essere usato se non precisando per esteso la definizione.

(10) Per le fasi condensate si usa x e per le miscele gassose si può usare y [72].

(11) Le pressioni sono spesso espresse in unità di misura non SI, quali il bar, per cui 1 bar = 10⁵ Pa. La pressione standard vale $p^\ominus = 1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$ (vedi Sez. 2.11.1 (v), p. 62, Sez. 7.2, p. 138, e le tavole di conversione a p. 239). Le pressioni sono spesso espresse anche in millibar o ettopascal, dove 1 mbar = 10⁻³ bar = 100 Pa = 1 hPa.

(12) Il simbolo e la definizione riguarda molecole B che devono essere specificate. Per gas reali (non ideali) si deve prestare attenzione nel definire le pressioni parziali.

(13) V è il volume della miscela. Grandezze che descrivono la composizione delle miscele possono essere trovate in [72].

(14) In questa definizione, il simbolo m è usato con due significati diversi: m_B indica la *molalità* del soluto B, m_A indica la *massa* del solvente A (quindi l'unità di misura è mol kg⁻¹). Questa confusione nella notazione è evitata con l'uso del simbolo b per la molalità. Una soluzione di molalità 1 mol kg⁻¹ è talora chiamata soluzione unimolare, ed indicata come soluzione 1 m; tuttavia il simbolo m non deve essere trattato come quello dell'unità di misura mol kg⁻¹ né combinato con altre unità di misura.

(15) Il termine concentrazione di numero (di entità), simbolo C , è preferito per le miscele. È necessario prestare attenzione e non usare il simbolo n quando può essere confuso con l'indicazione di quantità di sostanza.

(16) In inglese, "Concentration of quantity" è un'abbreviazione usata per "amount-of-substance concentration". (La Clinical Chemistry Division di IUPAC raccomanda di abbreviare amount-of-substance concentration in "substance concentration [14, 73].) Il termine "concentrazione" è usato normalmente senza specificazioni quando non c'è il rischio di confusione, come quando è usato congiuntamente al nome (o al simbolo) di una sostanza chimica, o invece di molalità (vedi Sez. 2.13, p. 70). Nella scienza dei polimeri, il termine "concentrazione" e il simbolo c sono normalmente usati per indicare la concentrazione in massa. Nella letteratura più vecchia questa grandezza è spesso chiamata *molarità*, un uso che dovrebbe essere evitato per il rischio di confusione con la grandezza *molalità*. Le unità di misura normalmente usate per la concentrazione di quantità di sostanza sono mol L⁻¹ (o mol dm⁻³), mmol L⁻¹, $\mu\text{mol L}^{-1}$ etc., spesso indicate con M, mM, μM etc. (che si pronunciano molare, millimolare, micromolare). Quindi M è spesso trattato come un simbolo per mol L⁻¹.

(17) La solubilità può anche essere espressa in una qualunque delle unità di misura che corrispondono alle grandezze che indicano una composizione relativa, come la frazione di massa, la frazione di quantità di sostanza, la molalità, la frazione in volume, ecc.

(18) A indica l'area superficiale.

2.10.1 Altri simboli e convenzioni in chimica

(i) I simboli degli elementi chimici

I simboli degli elementi chimici sono (in molti casi) derivati dai loro nomi latini e consistono in una o due lettere che devono essere scritte in caratteri normali. Una lista completa è fornita nella Sez. 6.2, p. 117. Il simbolo non è seguito da un punto fermo eccetto quando è posto alla fine di una frase.

Esempi I, U, Pa, C

I simboli hanno due differenti significati (che si riflettono anche nel loro uso nelle formule ed equazioni chimiche):

(a) A livello *microscopico* essi possono indicare un atomo dell'elemento. Per esempio, Cl indica l'atomo di cloro con 17 protoni e 18 o 20 neutroni (producendo un numero di massa 35 o 37), differenza che viene ignorata. La sua massa media è 35.4527 u per campioni terrestri.

(b) Ad un livello *macroscopico* essi indicano un campione dell'elemento. Per esempio, Fe indica un campione di ferro e He un campione di gas elio. Essi possono anche essere usati come abbreviazione dell'elemento: "Fe è uno degli elementi più comuni della crosta terrestre."

Il termine *nuclide* implica un atomo con specifico numero atomico (numero di protoni) e numero di massa (numero di nucleoni). Un nuclide può essere specificato aggiungendo il numero di massa come un apice a sinistra del *simbolo* dell'elemento, ad esempio ^{14}C , o aggiungendo la specificazione al *nome* dell'elemento, ad esempio carbonio-14. Nuclidi con lo stesso numero atomico ma con differente numero di massa sono chiamati nuclidi isotopici o *isotopi*, ad esempio ^{12}C , ^{14}C . Se non vi è indicazione mediante l'apice a sinistra, il simbolo viene letto come comprendente tutti gli isotopi secondo la loro abbondanza naturale: $n(\text{Cl}) = n(^{35}\text{Cl}) + n(^{37}\text{Cl})$. Nuclidi con lo stesso numero di massa ma differente numero atomico sono chiamati nuclidi isobarici o *isobari*: ^{14}C , ^{14}N . Il numero atomico può essere indicato come un pedice a sinistra: $^{14}_6\text{C}$, $^{14}_7\text{N}$.

Il numero di carica ionica è indicato da un apice a destra, dal semplice segno quando il numero di carica è uguale a più o meno uno.

<i>Esempi</i>	Na^+	un ione sodio positivo (catione)
	$^{79}\text{Br}^-$	un ione negativo di bromo-79 (anione, ione bromuro)
	Al^{3+} or Al^{+3}	ione alluminio triplo-positivo
	3S^{2-} or 3S^{-2}	tre ioni zolfo doppiamente negativi (ioni solfuro)

Al^{3+} è normalmente usato in chimica e raccomandato da [74]. Le forme Al^{+3} e S^{-2} , sebbene ampiamente usate, sono obsolete [74], come pure la vecchia notazione Al^{+++} , $\text{S}^=$, e S^{--} .

La posizione di apice destro è anche usata per fornire altre informazioni. Gli stati elettronici eccitati possono essere indicati con un asterisco.

Esempi H^* , Cl^*

I numeri di ossidazione sono indicati con numeri positivi o negativi o da uno zero (vedi anche Sez. 2.10.1 (iv), p. 52).

Esempi Mn^{VII} , manganese(VII), $\text{O}^{-\text{II}}$, Ni^0

(Note, continua)

(19) Il numero stechiometrico è definito mediante l'equazione stechiometrica. Esso è negativo per i reagenti e positivo per i prodotti. I valori dei numeri stechiometrici dipendono da come l'equazione stechiometrica è scritta (vedi Sez. 2.10.1 (iv), p. 52). $n_{\text{B},0}$ indica il valore di n_{B} al "tempo zero", quando $\xi = 0$ mol.

(20) ξ_{max} è il valore di ξ quando almeno un reagente è esaurito. Per specifiche reazioni, termini come "grado di dissociazione" e "gradi di ionizzazione" ecc. sono usati comunemente.

Le posizioni ed il significato degli indici intorno al simbolo di un elemento si possono riassumere come segue:

apice sinistro	numero di massa
pedice sinistro	numero atomico
apice destro	numero di carica, numero di ossidazione, eccitazione
pedice destro	numero di atomi per entità (vedi Sez. 2.10.1 (iii) che segue)

(ii) Simboli per particelle e reazioni nucleari

protone	p, p ⁺	positrone	e ⁺ , β ⁺	tritone	t
antiprotone	\bar{p}	muone positivo	μ ⁺	elione	h (³ He ²⁺)
neutrone	n	muone negativo	μ ⁻	particella α	α (⁴ He ²⁺)
antineutrone	\bar{n}	fotone	γ	neutrino (elettronico)	ν _e
elettrone	e, e ⁻ , β ⁻	deutrone	d	antineutrino elettronico	$\bar{\nu}_e$

I simboli per le particelle elementari sono scritti in caratteri normali (ma vedi Cap. 6, p. 113). La carica elettrica delle particelle può essere indicata con l'aggiunta di un apice +, -, o 0; per esempio, p⁺, n⁰, e⁻, ecc. Se i simboli p ed e sono usati senza l'indicazione di carica, essi si riferiscono rispettivamente al protone positivo ed all'elettrone negativo. Un sommario dei nomi raccomandati per il muonio e per gli atomi di idrogeno ed i loro ioni si trova in [75].

Il significato dell'espressione simbolica che indica una reazione nucleare è di norma la seguente:

$$\begin{array}{ccc} \text{nuclide} & \left(\begin{array}{cc} \text{particelle entranti} & , & \text{particelle uscenti} \\ \text{iniziale} & \text{o quanti} & & \text{o quanti} & \text{finale} \end{array} \right) & \text{nuclide} \end{array}$$

Esempi $^{14}\text{N}(\alpha, p)^{17}\text{O}$, $^{59}\text{Co}(n, \gamma)^{60}\text{Co}$
 $^{23}\text{Na}(\gamma, 3n)^{20}\text{Na}$, $^{31}\text{P}(\gamma, pn)^{29}\text{Si}$

Si può anche usare la notazione standard della cinetica (vedi Sez. 2.12, p. 63).

Esempi $^{14}_7\text{N} + \alpha \rightarrow ^{17}_8\text{O} + p$
 $n \rightarrow p + e + \bar{\nu}_e$

(iii) Formule chimiche

Come nel caso dei simboli chimici per gli elementi, le formule chimiche possono avere due significati diversi:

(a) A livello *microscopico* esse indicano un atomo, una molecola, un ione, un radicale, ecc. Il numero di atomi in una entità (sempre intero) è indicato da un pedice destro, il numero 1 essendo sempre omissso. Gruppi di atomi possono essere racchiusi tra parentesi. I numeri di carica degli ioni ed i simboli di eccitazione sono aggiunti alla formula come apici destri. La natura di radicale di una entità può essere espressa con l'aggiunta di un punto al simbolo. La nomenclatura per i radicali, ioni, ioni radicali, e le relative specie, sono descritte in [76, 77].

Esempi Xe, N₂, C₆H₆, Na⁺, SO₄²⁻
 (CH₃)₃COH (una molecola di 2-metil-2-propanolo)
 NO₂^{*} (una molecola di diossido di azoto eccitata)
 NO (una molecola di ossido di azoto)
 NO[•] (una molecola di ossido di azoto, con carattere di radicale libero)

Nello scrivere la formula di un ione complesso, può essere aggiunto uno spazio prima del numero di carica, oppure esso è posto tra parentesi: SO₄²⁻, (SO₄)²⁻. La prima formulazione è oggi preferita [74].

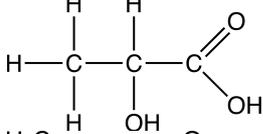
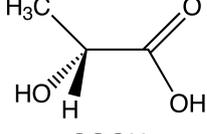
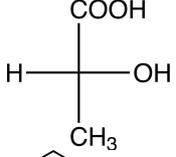
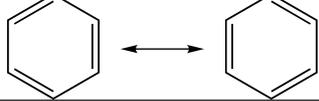
Specifici stati elettronici di entità (atomi, molecole, ioni) possono essere indicati fornendo il simbolo di termine elettronico tra parentesi (vedi Sez. 2.6.3, p. 32). Gli stati vibrazionali e rotazionali possono essere specificati fornendo i numeri quantici corrispondenti (vedi Sez. 2.6, p. 25 e 33).

<i>Esempi</i>	Hg(3P_1)	un atomo di mercurio nello stato di tripletto P-uno
	HF($v = 2, J = 6$)	una molecola di fluoruro di idrogeno nello stato vibrazionale $v = 2$ e nello stato rotazionale $J = 6$
	H ₂ O ⁺ (2A_1)	un ione di molecola d'acqua nello stato di doppietto A-uno

(b) A livello *macroscopico* una formula indica un campione di sostanza chimica (non necessariamente stabile, o capace di esistere in forma isolata). La composizione chimica è indicata da pedici destri (non necessariamente interi; il pedice 1 è omesso). Una "unità di formula" (che *non* è una unità di misura di una grandezza) è una entità specificata come un gruppo di atomi (vedi (iv) e (v) qui sotto).

Esempi Na, Na⁺, NaCl, Fe_{0.91}S, XePtF₆, NaCl

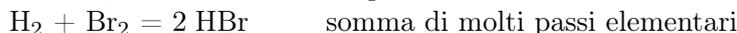
La formula può essere usata in espressioni quali $\rho(\text{H}_2\text{SO}_4)$, densità in massa dell'acido solforico. Quando si specifica la quantità di sostanza, la formula è spesso moltiplicata per un fattore, normalmente un piccolo numero intero od una frazione, si vedano esempi in (iv) e (v). In modo meno formale, la formula è spesso usata come abbreviazione ("reagente con H₂SO₄"). Le formule chimiche possono essere scritte in modi diversi a seconda dell'informazione che si vuole fornire [15, 74, 78, 79]:

<i>Formula</i>	<i>Informazione fornita</i>	<i>Esempio</i>	<i>Note</i>
empirica	solo proporzione stechiometrica	CH ₂ O	1
molecolare	secondo la massa molecolare	C ₃ H ₆ O ₃	
strutturale	disposizione strutturale degli atomi	CH ₃ CH(OH)COOH	1
di connessione	connessione		2
stereochimica	configurazione stereochimica		2
	proiezione di Fischer		3
struttura di risonanza	configurazione elettronica		2, 4

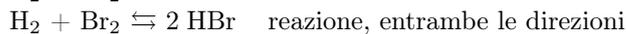
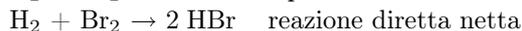
(1) Molecole che differiscono solo per la composizione isotopica sono chiamati isotopomeri o isotopologi. Per esempio, CH₂O, CHDO, CD₂O e CH₂¹⁷O sono tutti gli isotopomeri od isotopologi della molecola di formaldeide. Si è suggerito [16] di riservare il termine isotopomero alle molecole con la stessa composizione isotopica ma differente struttura, come in CD₃CH(OH)COOH e CH₃CD(OD)COOD, casi nei quali si usa anche l'espressione isomero di isotopo.

(iv) Equazioni per le reazioni chimiche

(a) A livello *microscopico* l'equazione di reazione rappresenta una reazione elementare (un evento che riguarda singoli atomi, molecole e radicali), o la somma di un gruppo di tali reazioni. I numeri stechiometrici sono ± 1 (talora ± 2). Una singola freccia è usata per connettere i reagenti ai prodotti di reazione elementare. Un segno di uguale è usato per la reazione "netta", cioè per il risultato di un gruppo di reazioni elementari (vedi Sez. 2.12.1, p. 68).



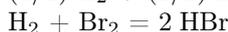
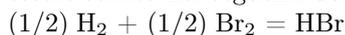
(b) A livello *macroscopico*, simboli differenti sono usati per connettere i reagenti ed i prodotti nella equazione di reazione, aventi i seguenti significati:



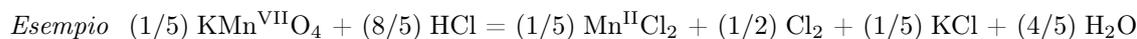
La freccia bidirezionale \leftrightarrow non deve essere usata per le reazioni per evitare confusioni con le strutture di risonanza (vedi Sez. 2.10.1 (iii), p. 50).

I numeri stechiometrici non sono unici. La stessa reazione può essere espressa in diversi modi (senza che cambi di significato).

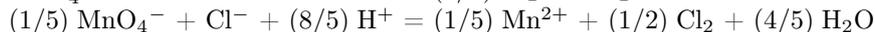
Esempio La formazione di bromuro di idrogeno dagli elementi costituenti può ugualmente essere scritta nei seguenti due modi



Ioni che non prendano parte alla reazione ("ioni spettatori") sono spesso rimossi dall'equazione. Equazioni redox sono spesso scritte in modo che il valore del numero stechiometrico per gli elettroni trasferiti (che sono normalmente omissi dall'equazione complessiva) è uguale a ± 1 .



L'ossidazione del cloruro da parte del permanganato in soluzione acida può essere rappresentata in molti modi, tutti corretti.



Analogamente, una reazione in una cella elettrochimica può essere scritta in modo che il numero elettronico della reazione nella cella elettrochimica, z , (vedi Sez. 2.13, p. 71) sia uguale ad uno:



dove i simboli tra parentesi indicano lo stato di aggregazione (vedi Sez. 2.10.1 (vi), p. 54).

(Note, continua)

(2) Le linee nelle formule di connettività, stereochimiche, o di strutture di risonanza rappresentano legami semplici, doppi o tripli. Essi sono anche usati per indicare coppie di elettroni.

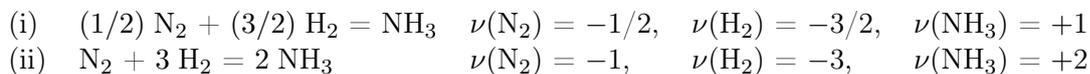
(3) Nella proiezione di Fischer i costituenti orizzontali sono interpretati come al disopra del piano del foglio mentre quelli verticali come al disotto il piano del foglio.

(4) La freccia bidirezionale rappresenta la disposizione degli elettroni di valenza nelle strutture di risonanza, come il benzene C_6H_6 e non significa equazione di reazione (vedi Sez. 2.10.1 (iv), in questa pagina).

Notazione Simbolica: Un'equazione chimica generica può essere scritta come

$$0 = \sum_j \nu_j B_j$$

dove B_j indica una specie nella reazione e ν_j il corrispondente numero stechiometrico (negativo per i reagenti e positivo per i prodotti). La sintesi dell'ammoniaca è ugualmente ben descritta nei seguenti due modi:



I cambiamenti $\Delta n_j = n_j - n_{j,0}$ nelle quantità di qualunque reagente o prodotto j nel corso della reazione sono governati da un parametro, l'indice di reazione ξ , tramite l'equazione

$$n_j = n_{j,0} + \nu_j \xi$$

L'indice di reazione dipende da come la reazione è scritta, ma è indipendente da quale entità nella equazione è usata per la definizione. Perciò, per la reazione (i), se $\xi = 2$ mol, allora $\Delta n(\text{N}_2) = -1$ mol, $\Delta n(\text{H}_2) = -3$ mol e $\Delta n(\text{NH}_3) = +2$ mol. Per la reazione (ii), se $\Delta n(\text{N}_2) = -1$ mol allora $\xi = 1$ mol.

Notazione Matriciale: Per sistemi multireazione è conveniente scrivere le equazioni chimiche in forma matriciale

$$\mathbf{A} \boldsymbol{\nu} = \mathbf{0}$$

dove \mathbf{A} è la matrice di conservazione (o di formula) con elementi A_{ij} che rappresentano il numero di atomi dell'elemento i -mo della j -ma specie di reazione (entità reagente o prodotto) e $\boldsymbol{\nu}$ è la matrice dei numeri stechiometrici con elementi ν_{jk} che sono i numeri stechiometrici della j -ma specie reagente nella k -ma reazione. Quando ci sono N_s specie reagenti in un che consiste di N_e elementi, \mathbf{A} diventa una matrice $N_e \times N_s$. La sua traccia, $N(\mathbf{A}) = N_s - \text{rango}(\mathbf{A})$, dà il numero di reazioni chimiche indipendenti, N_r , e $N_s \times N_r$ la matrice dei numeri stechiometrici, $\boldsymbol{\nu}$, può essere determinata come lo spazio nullo di \mathbf{A} . $\mathbf{0}$ è una matrice nulla $N_e \times N_r$ [80].

(v) Quantità di sostanza e specificazione delle entità

La grandezza "quantità di sostanza" (indicata anche come "chemical amount" in inglese; "Stoffmenge" in tedesco, "quantité de matière" in francese) è stata usata dai chimici per lungo tempo senza un termine appropriato. Si riferiva semplicemente ad un "numero di moli". Questa pratica deve essere evitata: il nome di una grandezza fisica non deve usare il nome di una unità di misura (chi userebbe "numero di metri" come sinonimo di "lunghezza" ?).

La quantità di sostanza è proporzionale al numero di entità elementari specificate in quella sostanza; la costante di proporzionalità è la stessa per tutte le sostanze ed è il reciproco della costante di Avogadro. Le entità elementari possono essere scelte in modo conveniente, nemmeno essendo necessariamente particelle fisiche reali. Negli esempi che seguono, $(1/2) \text{Cl}_2$, $(1/5) \text{KMnO}_4$, ecc. sono artificiali nel senso che non esistono tali entità elementari. Poiché la quantità di sostanza e tutte le grandezze fisiche che da esse derivano dipendono da questa scelta, è essenziale specificarle correttamente per evitare ambiguità.

<i>Esempi</i>	$n_{\text{Cl}}, n(\text{Cl})$	quantità di Cl, quantità di atomi di cloro
	$n(\text{Cl}_2)$	quantità di Cl_2 , quantità di molecole di cloro
	$n(\text{H}_2\text{SO}_4)$	quantità di (entità) H_2SO_4
	$n((1/5) \text{KMnO}_4)$	quantità di (entità) $(1/5) \text{KMnO}_4$
	$M(\text{P}_4)$	massa molare di fosforo tetravalente P_4
	$c_{\text{Cl}^-}, c(\text{Cl}^-), [\text{Cl}^-]$	concentrazione di quantità di Cl^-
	$\rho(\text{H}_2\text{SO}_4)$	densità in massa di acido solforico
	$\Lambda(\text{MgSO}_4)$	conducibilità molare di (entità) MgSO_4
	$\Lambda((1/2) \text{MgSO}_4)$	conducibilità molare di (entità) $(1/2) \text{MgSO}_4$
	$\lambda(\text{Mg}^{2+})$	conducibilità ionica di (entità) Mg^{2+}
	$\lambda((1/2) \text{Mg}^{2+})$	conducibilità ionica di (entità) $(1/2) \text{Mg}^{2+}$

Usando le definizioni delle varie grandezze, si possono derivare equazioni come le seguenti

$$n((1/5) \text{KMnO}_4) = 5n(\text{KMnO}_4)$$

$$\lambda((1/2) \text{Mg}^{2+}) = (1/2)\lambda(\text{Mg}^{2+})$$

$$[(1/2) \text{H}_2\text{SO}_4] = 2 [\text{H}_2\text{SO}_4]$$

(vedi anche gli esempi in Sez. 3.3, p. 88.)

Si noti che “quantità di zolfo” può essere un’espressione ambigua perchè potrebbe implicare $n(\text{S})$, $n(\text{S}_8)$, o $n(\text{S}_2)$, ecc. In altri casi la stessa espressione non è ambigua. In genere per i composti l’entità implicata è normalmente la molecola oppure l’entità di formula comune, per metalli solidi è l’atomo.

<i>Esempi</i>	“2 mol di acqua” implica $n(\text{H}_2\text{O}) = 2 \text{ mol}$
	“0.5 mol di cloruro di sodio” implica $n(\text{NaCl}) = 0.5 \text{ mol}$
	“3 mmol di ferro” implica $n(\text{Fe}) = 3 \text{ mmol}$

Queste espressioni devono essere evitate se possono essere ambigue.

Nell’equazione $pV = nRT$ ed in equazioni che riguardano proprietà colligative, l’entità implicata nella definizione di n è un particella che trasla senza interagire con le altre (un’intera molecola per un gas), la cui natura è irrilevante. Grandezze che descrivono la composizione di miscele si possono trovare in [72].

(vi) Stati di aggregazione

I seguenti simboli costituiti da una, due o tre lettere sono usati per indicare gli stati di aggregazione delle specie chimiche [1.j]. Le lettere sono aggiunte tra parentesi al simbolo di formula, in caratteri normali e non sono seguiti da alcun punto.

a, ads	specie adsorbite su una superficie	g	gas o vapore
am	solido amorfo	l	liquido
aq	soluzione acquosa	cl	cristallo liquido
aq, ∞	soluzione acquosa a diluizione infinita	mon	forma monomerica
cd	fase condensata (esempio, solida o liquida)	n	fase nematica
cr	cristallina	pol	forma polimerica
f	fase fluida (esempio, gas o liquida)	s	solido
		sln	soluzione
		vit	sostanza vitrea

<i>Esempi</i>	$\text{HCl}(\text{g})$	cloruro di idrogeno nello stato gassoso
	$C_V(\text{f})$	capacità termica di un fluido a volume costante
	$V_m(\text{cl})$	volume molare di un cristallo liquido
	$U(\text{cr})$	energia interna di un solido cristallino
	$\text{MnO}_2(\text{am})$	diossido di manganese come solido amorfo
	$\text{MnO}_2(\text{cr}, \text{I})$	diossido di manganese in forma di cristallo I
	$\text{NaOH}(\text{aq})$	soluzione acquosa di idrossido di sodio
	$\text{NaOH}(\text{aq}, \infty)$	soluzione acquosa di idrossido di sodio a diluizione infinita
	$\Delta_f H^\ominus(\text{H}_2\text{O}, \text{l})$	entalpia di formazione standard dell’acqua liquida

I simboli g, l, ecc. per indicare la fase gassosa, fase liquida, ecc., sono talora usati come apice destro, ed i simboli in lettere dell'alfabeto greco α , β , ecc. possono anche essere usati per indicare la fase α , fase β , ecc. come notazione generica.

Esempi V_m^l, V_m^s volume molare della fase liquida, ... della fase solida
 S_m^α, S_m^β entropia molare della fase α , ... della fase β

2.11 TERMODINAMICA CHIMICA

Le denominazioni ed i simboli delle grandezze più comunemente usate qui riportati sono anche raccomandati anche da IUPAP [4] e da ISO [5.d,5.h]. Altre informazioni si possono trovare in [1.d,1.j] e [81].

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
calore	Q, q		J	1
lavoro	W, w		J	1
energia interna	U	$dU = dQ + dW$	J	1
entalpia	H	$H = U + pV$	J	
temperatura termodinamica	$T, (\Theta)$		K	
temperatura internazionale	T_{90}		K	2
temperatura Celsius	θ, t	$\theta/^{\circ}\text{C} = T/\text{K} - 273.15$	$^{\circ}\text{C}$	3
entropia	S	$dS = dQ_{\text{rev}}/T$	J K^{-1}	
energia di Helmholtz, (funzione di Helmholtz)	A, F	$A = U - TS$	J	4
energia di Gibbs, (funzione di Gibbs)	G	$G = H - TS$	J	
funzione di Massieu	J	$J = -A/T$	J K^{-1}	
funzione di Planck	Y	$Y = -G/T$	J K^{-1}	
tensione superficiale	γ, σ	$\gamma = (\partial G / \partial A_s)_{T,p,n_i}$	$\text{J m}^{-2}, \text{N m}^{-1}$	
grandezza molare X	$X_m, (\bar{X})$	$X_m = X/n$	$[X]/\text{mol}$	5, 6
grandezza specifica X	x	$x = X/m$	$[X]/\text{kg}$	5, 6
coefficiente di pressione	β	$\beta = (\partial p / \partial T)_V$	Pa K^{-1}	
coefficiente di pressione relativo	α_p	$\alpha_p = (1/p)(\partial p / \partial T)_V$	K^{-1}	
compressibilità, isoterma	κ_T	$\kappa_T = -(1/V)(\partial V / \partial p)_T$	Pa^{-1}	
isoentropica	κ_S	$\kappa_S = -(1/V)(\partial V / \partial p)_S$	Pa^{-1}	
coefficiente di espansione lineare	α_l	$\alpha_l = (1/l)(\partial l / \partial T)$	K^{-1}	
coefficiente di espansione cubica cubica	α, α_V, γ	$\alpha = (1/V)(\partial V / \partial T)_p$	K^{-1}	7
capacità termica, a pressione costante	C_p	$C_p = (\partial H / \partial T)_p$	J K^{-1}	
a volume costante	C_V	$C_V = (\partial U / \partial T)_V$	J K^{-1}	

(1) Nella forma differenziale, d indica un differenziale inesatto. L'equazione in forma integrata è $\Delta U = Q + W$. $Q > 0$ e $W > 0$ indicano un aumento di energia del .

(2) Questa temperatura è definita dalla "Scala Internazionale di Temperatura del 1990" (ITS-90) alla quale corrispondono specifiche definizioni [82–84]. Il CIPM, nella sua 94^{ma} Riunione del Ottobre 2005 ha approvato una Raccomandazione T3 (2005) del Comitato Consultivo di Termometria, nella quale la ITS-90 diventa una delle molte possibili "mises en pratique" della definizione del kelvin. L'Allegato Tecnico (2005) relativo è disponibile come Doc. CCT/05-33 [85]. Esso riguarda la definizione della composizione isotopica di riferimento per l'idrogeno e l'acqua quando queste sostanze sono usate per la realizzazione dei punti fissi della ITS-90.

(3) Questa grandezza è spesso indicata col nome errato di "temperatura centigrada".

(4) Il simbolo F è usato talora come un simbolo alternativo per l'energia di Helmholtz.

(5) La definizione si applica alla sostanza pura. Tuttavia, il concetto di grandezza molare e specifica (vedi Sez. 1.4, p. 6) si può applicare anche alle miscele.

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
rapporto delle capacità termiche	$\gamma, (\kappa)$	$\gamma = C_p/C_V$	1	
coefficiente di Joule-Thomson	μ, μ_{JT}	$\mu = (\partial T/\partial p)_H$	K Pa ⁻¹	
potenza termica	Φ, P	$\Phi = dQ/dt$	W	
coefficiente del viriale, secondo	B	$pV_m = RT(1 + B/V_m +$	m ³ mol ⁻¹	8
terzo	C	$C/V_m^2 + \dots)$	m ⁶ mol ⁻²	8
coefficienti di van der Waals	a b	$(p + a/V_m^2)(V_m - b) = RT$	J m ³ mol ⁻² m ³ mol ⁻¹	9 9
fattore di compressione, (fattore di compressibilità)	Z	$Z = pV_m/RT$	1	
grandezza parziale molare X	$X_B, (\bar{X}_B)$	$X_B = (\partial X/\partial n_B)_{T,p,n_j \neq B}$	[X]/mol	10
potenziale chimico, (energia parziale molare di Gibbs)	μ	$\mu_B = (\partial G/\partial n_B)_{T,p,n_j \neq B}$	J mol ⁻¹	11
potenziale chimico standard	μ^\ominus, μ°		J mol ⁻¹	12
attività assoluta	λ	$\lambda_B = \exp(\mu_B/RT)$	1	11
attività (relativa)	a	$a_B = \exp\left(\frac{\mu_B - \mu_B^\ominus}{RT}\right)$	1	11, 13
entalpia molare parziale standard	H_B^\ominus	$H_B^\ominus = \mu_B^\ominus + TS_B^\ominus$	J mol ⁻¹	11, 12
entropia molare parziale standard	S_B^\ominus	$S_B^\ominus = -(\partial \mu_B^\ominus/\partial T)_p$	J mol ⁻¹ K ⁻¹	11, 12

(Note, continua)

(5) (continua) n è la quantità di sostanza (vedi Sez. 2.10, note 1 e 2, p. 47).

(6) X è una grandezza estensiva, la cui unità di misura SI è [X]. Nel caso di grandezze molari, le entità devono essere specificate.

Esempio $V_{m,B} = V_m(B) = V/n_B$ indica il volume molare di B

(7) Questa grandezza è anche chiamata coefficiente di espansione termica, o coefficiente di espansività.

(8) Altri “coefficienti del viriale della pressione” possono essere definiti dall’espressione

$$pV_m = RT(1 + B_p p + C_p p^2 + \dots)$$

(9) Per un gas che soddisfa l’equazione di stato di van der Waals data nella definizione, il secondo coefficiente del viriale è legato ai parametri a e b dell’equazione di van der Waals dalla relazione

$$B = b - a/RT$$

(10) Il simbolo si applica a entità B che devono essere specificate. La barra può essere usata per distinguere, quando necessario, X parziale molare da X .

Esempio Il volume parziale molare di Na₂SO₄ in soluzione acquosa può essere indicato come $\bar{V}(\text{Na}_2\text{SO}_4, \text{aq})$, per distinguerlo dal volume della soluzione $V(\text{Na}_2\text{SO}_4, \text{aq})$.

(11) La definizione si applica a entità B che devono essere specificate. Il potenziale chimico può essere definito in modo equivalente mediante le derivate parziali corrispondenti relative ad altre funzioni termodinamiche (U, H, A).

(12) Il simbolo $^\ominus$ oppure $^\circ$ è usato per indicare lo stato standard. Essi sono ugualmente accettati. Definizioni di stato standard sono discusse nella Sez. 2.11.1 (iv), p. 61. Ogniqualvolta è usato un potenziale chimico standard μ^\ominus o una costante di equilibrio standard K^\ominus o un’altra grandezza standard, lo stato standard deve essere specificato.

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
energia di reazione standard di Gibbs	$\Delta_r G^\ominus$	$\Delta_r G^\ominus = \sum_B \nu_B \mu_B^\ominus$	J mol ⁻¹	12, 14 15, 16
affinità di reazione	A, \mathcal{A}	$A = -(\partial G/\partial \xi)_{p,T}$ $= -\sum_B \nu_B \mu_B$	J mol ⁻¹	15
entalpia di reazione standard	$\Delta_r H^\ominus$	$\Delta_r H^\ominus = \sum_B \nu_B H_B^\ominus$	J mol ⁻¹	12, 14 15, 16
entalpia di reazione standard	$\Delta_r S^\ominus$	$\Delta_r S^\ominus = \sum_B \nu_B S_B^\ominus$	J mol ⁻¹ K ⁻¹	12, 14, 15
quoziente di reazione	Q	$Q = \prod_B a_B^{\nu_B}$	1	17
costante di equilibrio	K^\ominus, K	$K^\ominus = \exp(-\Delta_r G^\ominus / RT)$	1	12, 15, 18
costante di equilibrio, in termini di pressione	K_p	$K_p = \prod_B p_B^{\nu_B}$	Pa ^{$\sum \nu_B$}	15, 19
in termini di concentrazione	K_c	$K_c = \prod_B c_B^{\nu_B}$	(mol m ⁻³) ^{$\sum \nu_B$}	15, 19
in termini di molalità	K_m	$K_m = \prod_B m_B^{\nu_B}$	(mol kg ⁻¹) ^{$\sum \nu_B$}	15, 19
fugacità	f, \tilde{p}	$f_B = \lambda_B \lim_{p \rightarrow 0} (p_B / \lambda_B)_T$	Pa	11
coefficiente di fugacità	ϕ	$\phi_B = f_B / p_B$	1	
costante della legge di Henry	k_H	$k_{H,B} = \lim_{x_B \rightarrow 0} (f_B / x_B)$ $= (\partial f_B / \partial x_B)_{x_B=0}$	Pa	11, 20

(Note, continua)

(13) Nell'equazione di definizione indicata, la dipendenza dell'attività dalla pressione è stata trascurata, come accade spesso per le fasi condensate a pressione atmosferica.

Una definizione equivalente è $a_B = \lambda_B / \lambda_B^\ominus$, dove $\lambda_B^\ominus = \exp(\mu_B^\ominus / RT)$. La definizione di μ^\ominus dipende dalla scelta dello stato standard (vedi Sez. 2.11.1 (iv), p. 61).

(14) Il simbolo r indica una reazione in generale. In casi particolari r può essere sostituito da un altro pedice appropriato, ad esempio $\Delta_f H^\ominus$ indica l'entalpia molare standard di formazione; vedi Sez. 2.11.1 (i), p. 59 per una lista di pedici. Δ_r può essere interpretato come simbolo di operatore $\Delta_r \stackrel{\text{def}}{=} \partial / \partial \xi$.

(15) La reazione a cui questa grandezza si applica deve essere specificata.

(16) Le entalpie di reazione (e le energie di reazione in generale) sono normalmente misurate in kJ mol⁻¹. Nella letteratura più antica l'uso di kcal mol⁻¹ è comune, ma esistono varie definizioni di caloria. Per la caloria termochimica, 1 kcal = 4.184 kJ (vedi Sez. 7.2, p. 137).

(17) Questa grandezza si applica in generale ad un sistema non in equilibrio.

(18) Questa grandezza è uguale a Q in equilibrio, quando l'affinità è zero. Essa è adimensionata ed il suo valore dipende dalla scelta dello stato standard, che deve essere specificato. ISO [5.h] e la Commissione Termodinamica di IUPAC [81] raccomandano il simbolo K^\ominus ed il nome "costante di equilibrio standard". Molti chimici preferiscono il simbolo K ed il nome "costante di equilibrio termodinamico".

(19) Queste grandezze sono generalmente non adimensionate. Si può definire in modo analogo una costante di equilibrio in termini di fugacità K_f , ecc. A bassa pressione K_p è legata approssimativamente a K^\ominus dall'equazione $K^\ominus \approx K_p / (p^\ominus)^{\sum \nu_B}$, e analogamente nelle soluzioni diluite K_c è legata approssimativamente a K^\ominus da $K^\ominus \approx K_c / (c^\ominus)^{\sum \nu_B}$; tuttavia, le relazioni esatte coinvolgono i coefficienti di fugacità od i coefficienti di attività [81].

La costante di equilibrio di dissoluzione di un elettrolita (che descrive l'equilibrio tra la fase solida in eccesso e gli ioni solvatati) è spesso chiamata prodotto di solubilità, ed indicata con K_{sol} o K_s (o K_{sol}^\ominus o K_s^\ominus se appropriato). Analogamente la costante di equilibrio per la dissociazione di un acido è spesso scritta come K_a , K_b per l'idrolisi di una base, e K_w per la dissociazione dell'acqua.

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>Unità SI</i>	<i>Note</i>
coefficiente di attività				
riferito alla legge di Raoult	f	$f_B = a_B/x_B$	1	11, 21
riferito alla legge di Henry				
in termini di molalità	γ_m	$a_{m,B} = \gamma_{m,B}m_B/m^\ominus$	1	11, 22
in termini di concentrazione	γ_c	$a_{c,B} = \gamma_{c,B}c_B/c^\ominus$	1	11, 22
in termini di frazione molare	γ_x	$a_{x,B} = \gamma_{x,B}x_B$	1	10, 21
forza ionica,				
in termini di molalità	I_m, I	$I_m = (1/2) \sum_i m_i z_i^2$	mol kg ⁻¹	
in termini di concentrazione	I_c, I	$I_m = (1/2) \sum_i c_i z_i^2$	mol m ⁻³	
coefficiente osmotico,				
in termini di molalità	ϕ_m	$\phi_m = \frac{\mu_A^* - \mu_A}{RTM_A \sum_B m_B}$	1	23, 24
in termini di frazione molare	ϕ_x	$\phi_x = -\frac{\mu_B^* - \mu_B}{RT \ln x_B}$	1	22, 23
pressione osmotica	Π	$\Pi = -(RT/V_A) \ln a_A$	Pa	23, 25

(Note, continua)

(20) La legge di Henry è talora espressa in termini di molalità o di concentrazione e quindi le corrispondenti unità di misura della costante della legge di Henry sono rispettivamente Pa kg mol⁻¹ o Pa m³ mol⁻¹.

(21) Questa grandezza riguarda fasi pure, sostanze in miscele, o solventi.

(22) Questa grandezza riguarda i soluti.

(23) A è il solvente, B si riferisce a uno o più soluti.

(24) Le entità B sono molecole indipendenti di soluto, ioni, ecc... indipendentemente dalla loro natura. La loro quantità è talora espressa in osmoli (che significa una mole di entità osmoticamente attive), ma questo uso è da scoraggiare.

(25) Questa definizione di pressione osmotica è valida per fluidi incompressibili.

2.11.1 Altri simboli e convenzioni in termodinamica chimica

Una trattazione più ampia si trova in [81].

(i) Simboli usati come pedici per indicare un processo chimico-fisico o una reazione

Questi simboli vanno scritti in caratteri normali, non seguiti dal punto.

adsorbimento	ads
atomizzazione	at
reazione di combustione	c
diluizione (di una soluzione)	dil
spostamento	sp

reazione di formazione	f
immersione	imm
fusione (solido \rightarrow liquido)	fus
miscelazione di fluidi	mix
reazione in generale	r
soluzione (di un soluto in un solvente)	sol
sublimazione (solido \rightarrow gas)	sub
transizione (tra due fasi)	trs
punto triplo	tp
vaporizzazione, evaporazione (liquido \rightarrow gas)	vap

(ii) Apici raccomandati

complesso attivato, stato di transizione	‡, ≠
apparente	app
quantità in eccesso	E
ideale	id
diluizione infinita	∞
sostanza pura	*
standard	⊕, ○

(iii) Esempi di uso del simbolo Δ

Il simbolo Δ indica un cambiamento in una grandezza termodinamica estensiva di un processo. L'aggiunta di un pedice a Δ indica un cambiamento di proprietà.

Esempi $\Delta_{\text{vap}}H = \Delta_{\text{l}}^{\text{g}}H = H(\text{g}) - H(\text{l})$ per l'entalpia molare di vaporizzazione.
 $\Delta_{\text{vap}}H = 40.7 \text{ kJ mol}^{-1}$ per l'acqua a $100 \text{ }^{\circ}\text{C}$ in presenza della sua tensione di vapore.
 Può anche essere scritto ΔH_{vap} , ma questo uso non è raccomandato.

Il pedice r è usato per indicare cambiamenti associati con una *reazione chimica*. Simboli come $\Delta_{\text{r}}H$ sono definiti dall'equazione

$$\Delta_{\text{r}}H = \sum_{\text{B}} \nu_{\text{B}}H_{\text{B}} = (\partial H/\partial \xi)_{T,p}$$

Pertanto è necessario specificare l'equazione stechiometrica di reazione quando si forniscono i valori numerici per queste grandezze, in modo da definire il grado di reazione ξ ed il valore dei numeri stechiometrici ν_{B} .

Esempio $\text{N}_2(\text{g}) + 3 \text{H}_2(\text{g}) = 2 \text{NH}_3(\text{g})$, $\Delta_{\text{r}}H^{\ominus}(298.15 \text{ K}) = -92.4 \text{ kJ mol}^{-1}$
 $\Delta_{\text{r}}S^{\ominus}(298.15 \text{ K}) = -199 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$

L'indicazione mol^{-1} nelle unità di misura indica che le grandezze in questo esempio sono variazioni per grado di reazione. Esse possono essere chiamate entalpia molare di reazione ed entropia molare di reazione, ed un pedice m può essere aggiunto al simbolo per enfatizzare ciò, se lo si desidera.

Le *grandezze di reazione standard* sono particolarmente importanti. Esse sono definite dalle equazioni

$$\begin{aligned} \Delta_{\text{r}}H^{\ominus} &= \sum_{\text{B}} \nu_{\text{B}}H_{\text{B}}^{\ominus} \\ \Delta_{\text{r}}S^{\ominus} &= \sum_{\text{B}} \nu_{\text{B}}S_{\text{B}}^{\ominus} \\ \Delta_{\text{r}}G^{\ominus} &= \sum_{\text{B}} \nu_{\text{B}}\mu_{\text{B}}^{\ominus} \end{aligned}$$

Per questi simboli è importante che la notazione sia chiaramente specificata. La relazione con l'affinità della reazione è

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

e la relazione con la costante di equilibrio standard è $\Delta_r G^\ominus = -RT \ln K^\ominus$. Il prodotto dell'attività è il quoziente di reazione Q , vedi p. 58.

Il termine *combustione* ed il simbolo c indicano la completa ossidazione della sostanza. Per la definizione di ossidazione completa delle sostanze contenenti elementi diversi da C, H ed O si veda [86]. La corrispondente equazione di reazione è scritta in modo che il numero stechiometrico ν della sostanza sia -1 .

Esempio L'entalpia standard di combustione del metano gassoso è
 $\Delta_c H^\ominus(\text{CH}_4, \text{g}, 298.15 \text{ K}) = -890.3 \text{ kJ mol}^{-1}$, il che implica la reazione
 $\text{CH}_4(\text{g}) + 2 \text{ O}_2(\text{g}) = \text{CO}_2(\text{g}) + 2 \text{ H}_2\text{O}(\text{l})$.

Il termine *formazione* ed il simbolo f indicano la formazione della sostanza da elementi nel loro stato di riferimento (in genere il più stabile per ciascun elemento alla temperatura scelta e corrispondente pressione standard). La corrispondente equazione di reazione è scritta in modo che il numero stechiometrico della sostanza sia $+1$.

Esempio L'entropia standard di formazione del cloruro di mercurio (II) cristallino è
 $\Delta_f S^\ominus(\text{HgCl}_2, \text{cr}, 298.15 \text{ K}) = -154.3 \text{ J mol}^{-1}\text{K}^{-1}$, il che implica la reazione
 $\text{Hg}(\text{l}) + \text{Cl}_2(\text{g}) = \text{HgCl}_2(\text{cr})$.

Il termine *atomizzazione*, simbolo at, indica un processo in cui una sostanza è suddivisa nei suoi atomi costituenti, nel loro stato base nella fase gassosa. La corrispondente equazione di reazione è scritta in modo che il numero stechiometrico ν della sostanza sia -1 .

Esempio L'energia (interna) standard di atomizzazione dell'acqua liquida è
 $\Delta_{\text{at}} U^\ominus(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) = 625 \text{ kJ mol}^{-1}$, il che implica la reazione
 $\text{H}_2\text{O}(\text{l}) = 2 \text{ H}(\text{g}) + \text{O}(\text{g})$.

(iv) Stati standard [1.j] e [81]

Il potenziale chimico standard della sostanza B alla temperatura T , $\mu_B^\ominus(T)$, è il valore del potenziale chimico in condizioni standard, specificate come segue. Ci sono tre riconosciute definizioni di stati standard.

Per una fase gassosa. Lo stato standard per una sostanza gassosa, sia allo stato puro che in miscela gassosa, è lo stato (ipotetico) della sostanza pura B in stato gassoso alla pressione standard $p = p^\ominus$ che si comporta come un gas ideale. Il potenziale chimico standard è definito come

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

Per una sostanza pura, o una miscela, o un solvente nello stato liquido o solido. Lo stato standard per una sostanza liquida o solida, sia pura che in miscela, o per un solvente, è lo stato di una sostanza pura B nella fase liquida o solida alla pressione standard $p = p^\ominus$. Il potenziale chimico standard è definito come

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

Per un soluto in soluzione. Per un soluto in una soluzione liquida o solida lo stato standard è riferito al comportamento di diluizione ideale del soluto. Esso è lo stato (ipotetico) del soluto B alla

molalità standard m^\ominus , e pressione standard p^\ominus , e che si comporta come una soluzione a diluizione infinita. Il potenziale chimico standard è definito come

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

Il potenziale chimico del soluto B in funzione della molalità m_B a pressione costante $p = p^\ominus$ è quindi dato dall'espressione

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

Talora la concentrazione (di quantità di sostanza) c è usata come variabile invece della molalità m ; entrambe le precedenti equazioni hanno ovunque in questo caso c invece di m . Occasionalmente la frazione molare x è usata invece di m ; in questo caso entrambe le precedenti equazioni hanno ovunque x invece di m ed $x^\ominus = 1$. Sebbene lo stato standard di un soluto è sempre riferito al comportamento ideale del diluito, la definizione di stato standard ed i valori del potenziale chimico standard μ^\ominus sono differenti a seconda che sia usata come variabile la molalità m , la concentrazione c , o la frazione molare x .

(v) Pressione standard, molalità e concentrazione

In linea di principio si può scegliere un valore qualunque per la pressione standard p^\ominus , la molalità standard m^\ominus e la concentrazione standard c^\ominus , ma la scelta dev'essere specificata. Per esempio, nel tabulare dati in chimica adatti alle alte pressioni può essere conveniente scegliere un valore di $p^\ominus = 100 \text{ MPa}$ (= 1 kbar).

Tuttavia, in pratica la scelta più comune è

$$\begin{aligned} p^\ominus &= 0.1 \text{ MPa} = 100 \text{ kPa} (= 1 \text{ bar}) \\ m^\ominus &= 1 \text{ mol kg}^{-1} \\ c^\ominus &= 1 \text{ mol dm}^{-3} \end{aligned}$$

Questi valori di m^\ominus e di c^\ominus sono universalmente accettati. Il valore di $p^\ominus = 100 \text{ kPa}$, è raccomandato da IUPAC sin dal 1982 [1.j], ed è raccomandato per tabulare dati termodinamici. Prima del 1982 la pressione standard era di solito presa uguale a $p^\ominus = 101\,325 \text{ Pa}$ (= 1 atm, chiamata la *atmosfera standard*). In ogni caso, il valore di p^\ominus dev'essere specificato.

La conversione di valori corrispondenti a differenti scelte di p^\ominus è descritta in [87–89]. L'attuale valore di p^\ominus , 100 kPa è talora chiamato *pressione di stato standard*.

(vi) Stati standard in biochimica

Speciali stati standard che sono vicini a condizioni fisiologiche sono spesso usati. Lo stato standard in biochimica è spesso scelto come $[\text{H}^+] = 10^{-7} \text{ mol dm}^{-3}$. Le concentrazioni dei soluti possono essere raggruppate insieme, ad esempio la concentrazione totale dei fosfati invece della concentrazione di ogni componente separatamente, (H_3PO_4 , H_2PO_4^- , HPO_4^{2-} , PO_4^{3-}). Stati standard ed altri stati di riferimento devono essere specificati accuratamente [90, 91].

(vii) Proprietà termodinamiche

I valori di molte grandezze termodinamiche rappresentano proprietà chimiche di base e servono nei calcoli. Esistono ampie tabulazioni, ad esempio [92–96]. Molta attenzione è necessaria nel riportare i dati e le loro incertezze [97, 98].

(viii) Stato di riferimento (di un elemento)

Stato in cui un elemento è stabile alla pressione standard scelta e ad una data temperatura [16].

2.12 CINETICA CHIMICA E FOTOCHIMICA

Le raccomandazioni che seguono sono basate su raccomandazioni IUPAC precedenti [1.c,1.k] e [17], con cui non sono totalmente in accordo. Raccomandazioni per la fotochimica si trovano anche in [60] e, per raccomandazioni nel riportare dati di cinetica chimica, si veda anche [99]. Un glossario di termini usati in cinetica chimica è stato fornito in [100].

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
velocità di cambiamento di X	\dot{X}	$\dot{X} = dX/dt$	(varie)	1
velocità di conversione	$\dot{\xi}$	$\dot{\xi} = d\xi/dt$	mol s ⁻¹	2
velocità di variazione della concentrazione (dovuta alla reazione chimica)	r_B, v_B	$r_B = dc_B/dt$	mol m ⁻³ s ⁻¹	3, 4
velocità di reazione (basata sulla concentrazione di quantità di sostanza)	v, v_c	$v = \nu_B^{-1} dc_B/dt$ $= \dot{\xi} / V$	mol m ⁻³ s ⁻¹	2, 4
velocità di reazione (basata sulla concentrazione di numero), (velocità di reazione)	v, v_C	$v_C = \nu_B^{-1} dC_B/dt$	m ⁻³ s ⁻¹	
ordine parziale di reazione	m_B, n_B	$v = k \prod_B c_B^{m_B}$	1	5
ordine complessivo di reazione	m, n	$m = \sum_B m_B$	1	
costante di velocità di variazione, coefficiente di velocità di variazione	$k, k(T)$	$v = k \prod_B c_B^{m_B}$	(m ³ mol ⁻¹) ^{m-1} s ⁻¹	6

(1) Ad esempio, velocità di variazione della pressione $\dot{p} = dp/dt$, la cui unità di misura SI è Pa s⁻¹, velocità di variazione dell'entropia dS/dt la cui unità di misura SI è J K⁻¹ s⁻¹.

(2) La reazione relativa a questa grandezza deve essere specificata, fornendo l'equazione stechiometrica.

(3) Il simbolo e la definizione si applicano alle entità B.

(4) Si noti che r_B e v possono anche essere definite relativamente alla pressione parziale, alla concentrazione di numero, alla concentrazione superficiale, ecc., con definizioni analoghe. Se necessario, velocità di reazione definite in modo diverso possono essere distinte da un pedice, ad esempio $v_p = \nu_B^{-1} dp_B/dt$, ecc.. Si noti che la velocità di reazione può essere definita solo per una reazione di stechiometria nota ed indipendente dal tempo, in termini di una specifica equazione di reazione; inoltre la seconda equazione della velocità di reazione deriva dalla prima solo se il volume V è costante e c_B rimane uniforme (più in generale, la definizione si applica a concentrazioni locali). Le derivate devono essere quelle dovute alla reazione chimica in questione; in sistemi aperti, come nei sistemi a flusso, effetti dovuti a processi di ingresso-uscita devono essere tenuti in considerazione separatamente, come pure processi di trasporto, mediante l'equazione generale

$$(dc_B/dt)_{\text{total}} = (dc_B/dt)_{\text{reazione}} + (dc_B/dt)_{\text{trasporto}}$$

(5) Il simbolo si applica al reagente B. Il simbolo m è usato per evitare confusione con n per la quantità di sostanza. L'ordine di reazione è definito solo se vale la particolare legge per la velocità di variazione. m è un numero reale.

(6) Costante di velocità di variazione k e fattori pre-esponenziali A sono normalmente misurati in (dm³ mol⁻¹)^{m-1} s⁻¹ o, su scala molecolare, in (cm³)^{m-1} s⁻¹ o (cm³ molecole⁻¹)^{m-1} s⁻¹. Si noti che "molecola" non è un'unità di misura, ma è spesso inclusa per chiarezza, sebbene ciò non sia conforme all'uso corretto. $k(T)$ è scritto per sottolineare la dipendenza dalla temperatura. Le costanti di velocità di reazione sono spesso misurate in logaritmi in base 10.

Esempio reazione di secondo ordine $k = 10^{8.2} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ o $\lg(k/\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}) = 8.2$
o in alternativa $k = 10^{-12.6} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ o $\lg(k/\text{cm}^3 \text{ s}^{-1}) = -12.6$

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
costante di velocità di variazione di reazione unimolecolare	$k_{\text{uni}}, k_{\text{uni}}(T, c_M)$	$v = k_{\text{uni}}c_B$	s^{-1}	7
ad alta pressione	k_{∞}	$k_{\text{uni}}(c_M \rightarrow \infty)$	s^{-1}	7
a bassa pressione	k_0	$v = k_0 c_M c_B$	$\text{m}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}$	7
costante di Boltzmann	k, k_B		J K^{-1}	
semivita	$t_{1/2}$	$c(t_{1/2}) = c(0)/2$	s	
tempo di rilassamento, durata di vita, vita media	τ	$\Delta c(\tau) = \Delta c(0)/e$	s	8
energia di attivazione (Arrhenius)	E_A, E_a	$E_A = RT^2 d(\ln k)/dT$	J mol^{-1}	9
fattore pre-esponenziale,	A	$A = k \exp(E_A/RT)$	$(\text{m}^3 \text{mol}^{-1})^{m-1} \text{s}^{-1}$	9, 10
fattore di frequenza				
raggio della sfera rigida	r		m	
diametro di collisione	d_{AB}	$d_{AB} = r_A + r_B$	m	
sezione d'urto di collisione	σ	$\sigma = \pi d_{AB}^2$	m^2	11
velocità relativa media tra A e B	\bar{c}_{AB}	$\bar{c}_{AB} = (8kT/\pi\mu)^{1/2}$	m s^{-1}	12
frequenza di collisione				
di A con A	$z_A(A)$	$z_A(A) = \sqrt{2} C_A \sigma \bar{c}$	s^{-1}	11
di A con B	$z_A(B)$	$z_A(B) = C_B \sigma \bar{c}_{AB}$	s^{-1}	11

(7) Le velocità delle reazioni unimolecolari mostrano una dipendenza dalla concentrazione c_M di un membro M di collisione. Si scrive $k_{\text{uni}}(T, c_M)$ per sottolineare la dipendenza dalla temperatura e dalla “pressione”. Ad alti valori di $c_M (\rightarrow \infty)$ la dipendenza svanisce. A bassi valori di $c_M (\rightarrow 0)$ produce un ordine 1 di reazione parziale rispetto a c_M . In questo caso, si definisce la costante di velocità di secondo ordine k_0 .

(8) τ è definito come l'intervallo di tempo in cui una perturbazione della concentrazione Δc raggiunge il valore $1/e$ del valore iniziale $\Delta c(0)$. Se una concentrazione iniziale di una sostanza decade a zero per $t \rightarrow \infty$, come decadimento radioattivo, il tempo di rilassamento è il tempo di vita medio di quella sostanza (radioisotopo). Questo tempo di vita o tempo di decadimento dev'essere distinto rispetto al tempo di semivita.

(9) Si può usare come equazione di definizione

$$E_A = -Rd(\ln k)/d(1/T)$$

Il termine energia di attivazione di Arrhenius dev'essere usato solo per la grandezza empirica definita in tabella. Altre equazioni empiriche con differenti “energie di attivazione”, come

$$k(T) = A' T^n \exp(-E_a'/RT)$$

sono anche usate. In queste espressioni A' , n e E_a' sono parametri indipendenti dalla temperatura.

Il termine energia di attivazione è anche usato per una soglia di energia che compaia nel potenziale elettronico (altezza della barriera di energia elettronica). Per questa “energia di attivazione” si preferisce il simbolo E_0 ed il termine energia di soglia, ma E_a è anche spesso usato. Inoltre, E_0 può includere o no una correzione per le energie di punto-zero dei reagenti e dello stato di transizione.

Pertanto si raccomanda che in ogni contesto si specifichi esattamente a quale energia di attivazione ci si riferisce e di riservare la denominazione energia di attivazione (di Arrhenius) solo limitatamente alla grandezza definita nella tabella. E_A dipende dalla temperatura e può essere scritta come $E_A(T)$.

(10) A dipende dalla temperatura e può essere scritta come $A(T)$.

(11) La sezione d'urto di collisione σ è una costante nel modello di collisione con sfera rigida, ma in generale dipende dall'energia. Si può additionally definire una sezione d'urto media di collisione dipendente dalla temperatura (vedi nota 16). C indica la concentrazione di numero.

(12) μ è la massa ridotta, $\mu = m_A m_B / (m_A + m_B)$.

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
densità di collisioni, numero di collisioni				
di A con A	Z_{AA}	$Z_{AA} = C_A z_A(A)$	$s^{-1} m^{-3}$	13
di A con B	Z_{AB}	$Z_{AB} = C_A z_A(B)$	$s^{-1} m^{-3}$	13
fattore di frequenza di collisione	z_{AB}	$z_{AB} = Z_{AB}/L c_A c_B$	$m^3 mol^{-1} s^{-1}$	13
libero cammino medio	λ	$\lambda = \bar{c}/z_A$	m	
parametro di impatto	b		m	14
angolo di diffusione	θ		1, rad	15
sezione d'urto differenziale	I_{ji}	$I_{ji} = d\sigma_{ji}/d\Omega$	$m^2 sr^{-1}$	16
sezione d'urto totale	σ_{ji}	$\sigma_{ji} = \int I_{ji} d\Omega$	m^2	16
matrice di diffusione	\mathbf{S}		1	17
probabilità di transizione	P_{ji}	$P_{ji} = S_{ji} ^2$	1	16, 17
entalpia standard di attivazione	$\Delta^\ddagger H^\ominus, \Delta H^\ddagger$	$k(T) = \frac{kT}{h} \exp\left(\frac{\Delta^\ddagger S^\ominus}{R}\right) \exp\left(\frac{-\Delta^\ddagger H^\ominus}{RT}\right)$	$J mol^{-1}$	18
volume di attivazione	$\Delta^\ddagger V^\ominus, \Delta V^\ddagger$	$\Delta^\ddagger V^\ominus = -RT(\partial(\ln k)/\partial p)_T$	$m^3 mol^{-1}$	
energia interna standard di attivazione	$\Delta^\ddagger U^\ominus, \Delta U^\ddagger$		$J mol^{-1}$	18
entropia standard di attivazione	$\Delta^\ddagger S^\ominus, \Delta S^\ddagger$		$J mol^{-1} K^{-1}$	18

(13) Z_{AA} e Z_{AB} sono il numero totale di collisioni AA o AB per unità di tempo e di volume in un sistema contenente rispettivamente solo molecole A, o molecole dei due tipi, A e B. Le collisioni di tre corpi possono essere trattate in modo analogo.

(14) Il parametro di impatto b caratterizza una collisione singola tra due particelle; è definito come la minima distanza che risulterebbe se le traiettorie delle particelle risultassero non deviate dalla collisione.

(15) $\theta = 0$ implica nessuna deviazione.

(16) In tutte queste grandezze matriciali il primo indice si riferisce al canale finale ed il secondo a quello iniziale. i ed j indicano rispettivamente i canali dei reagenti e dei prodotti, e Ω indica l'angolo solido; $d\sigma_{ji}/d\Omega$ è uguale alla (corrente di particella deviata per angolo solido) diviso per (corrente di particella incidente per unità d'area). Una diffusione elastica implica $i = j$. Entrambi I_{ji} ed σ_{ji} dipendono dall'energia totale del moto relativo, e possono essere scritti come $I_{ji}(E)$ e $\sigma_{ji}(E)$. La teoria generale di collisione porta ad un'espressione del coefficiente di velocità di variazione in termini di sezione d'urto totale della reazione dipendente dall'energia

$$k_{ji}(T) = \left(\frac{8k_B T}{\pi\mu}\right)^{1/2} \int_0^\infty \left(\frac{E}{k_B T}\right) \sigma_{ji}(E) \exp(-E/k_B T) \left(\frac{dE}{k_B T}\right)$$

dove E è l'energia traslazionale di collisione e μ è la massa ridotta (nota 12). L'integrale può essere interpretato come la sezione d'urto di collisione mediata termicamente $\langle\sigma_{ji}\rangle$, che deve essere usata nel calcolo della frequenza di collisione in determinate condizioni termiche (nota 11).

(17) La matrice di diffusione \mathbf{S} è usata nella teoria quantistica della diffusione [101]. \mathbf{S} è la matrice unità $\mathbf{S}\mathbf{S}^\dagger = \mathbf{1}$. $P_{ji} = |S_{ji}|^2$ è la probabilità che partecipanti alla collisione incidenti sul canale i emergano nel canale j .

(18) Le grandezze $\Delta^\ddagger H^\ominus$, $\Delta^\ddagger U^\ominus$, $\Delta^\ddagger S^\ominus$ e $\Delta^\ddagger G^\ominus$ sono usate nella teoria dello stato di transizione delle reazioni chimiche. Possono essere usate in modo appropriato solo in relazione a reazioni elementari. La relazione tra k e queste grandezze è, più in generale,

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

dove k ha le dimensioni di una costante del primo ordine di velocità di variazione. Una costante di variazione del primo ordine per una reazione di ordine n è ottenuta mediante moltiplicazione per $(c^\ominus)^{1-n}$. Per una reazione bimolecolare di un gas ideale, si moltiplica per $V^\ominus = (c^\ominus)^{-1} = (kT/p^\ominus)$.

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>Unità SI</i>	<i>Note</i>
energia di attivazione standard di Gibbs	$\Delta^\ddagger G^\ominus, \Delta G^\ddagger$	$\Delta^\ddagger G^\ominus = \Delta^\ddagger H^\ominus - T\Delta^\ddagger S^\ominus$	J mol ⁻¹	18
funzione per lo stato di transizione della partizione molecolare	$q^\ddagger, q^\ddagger(T)$	$k_\infty = \kappa \frac{k_B T}{h} \frac{q^\ddagger}{q_A} \exp(-E_0/k_B T)$	1	18
coefficiente di trasmissione	κ, γ	$\kappa = \frac{k_\infty h}{k_B T} \frac{q_A}{q^\ddagger} \exp(E_0/k_B T)$	1	18
funzione di partizione molecolare per unità di volume	\tilde{q}	$\tilde{q} = q/V$	m ⁻³	18
costante specifica di velocità di variazione di reazione unimolecolare a costante E, J	$k_{\text{uni}}(E, J)$	$k_{\text{uni}}(E, J) = -\frac{d(\ln c_A(E, J))}{dt}$	s ⁻¹	19
velocità specifica di reazione bimolecolare a energia di collisione E_t	$k_{\text{bi}}(E_t)$	$k_{\text{bi}}(E_t) = \sigma(E_t) \sqrt{2E_t/\mu}$	m ³ s ⁻¹	11
densità di stati	$\rho(E, J, \dots)$	$\rho(E, J, \dots) = dN(E, J, \dots)/dE$	J ⁻¹	19
numero (somma) di stati	$N(E), W(E)$	$N(E) = \int_0^E \rho(E') dE'$	1	19
densità di stati di uno stato di transizione	$\rho^\ddagger(E)$	$\rho^\ddagger(E) = dN^\ddagger(E)/dE$	J ⁻¹	19
numero di stati di uno stato di transizione	$N^\ddagger(E), W^\ddagger(E)$	$N^\ddagger(E) = \int_{E_0}^E \rho^\ddagger(E') dE'$	1	19
numero di canali aperti di reazione adiabatica	$W(E)$	$W(E) = \sum_a H(E - V_a^{\text{max}})$	1	19
costante di Michaelis	K_M	$v = \frac{V [S]}{K_M + [S]}$	mol m ⁻³	20
matrice di velocità di variazione (coefficiente)	\mathbf{K}, K_{fi}	$-\frac{dc}{dt} = \mathbf{K} \mathbf{c}$	s ⁻¹	21
resa quantica, resa fotochimica	Φ, ϕ		1	22
costante di variazione della fluorescenza	k_f	$\frac{d[h\nu]_f}{dt} = k_f c^*$	s ⁻¹	23, 24
durata naturale di vita	τ_0	$\tau_0 = 1/k_f$	s	23
larghezza naturale di riga	Γ, Γ_f	$\Gamma = \hbar k_f$	J	23
larghezza di riga in predissociazione	$\Gamma_p, \Gamma_{\text{diss}}$	$\Gamma_p = \hbar k_p$	J	23

(18) (continua) κ è un coefficiente di trasmissione e $\Delta^\ddagger G^\ominus = \Delta^\ddagger H^\ominus - T \Delta^\ddagger S^\ominus$. Il simbolo di stato standard $^\ominus$ è talora omissso e queste grandezze sono frequentemente scritte $\Delta^\ddagger H, \Delta^\ddagger U, \Delta^\ddagger S$ e $\Delta^\ddagger G$. Tuttavia, l'ommissione della specificazione dello stato standard comporta un'ambiguità nei valori di queste grandezze. La scelta di p^\ominus e c^\ominus in genere influisce sui valori di $\Delta^\ddagger H^\ominus, \Delta^\ddagger S^\ominus$ e $\Delta^\ddagger G^\ominus$.

La formulazione in meccanica statistica della teoria degli stati di transizione porta all'equazione con k_∞ indicato come nella tabella per una reazione unimolecolare al limite per le alte pressioni e per reazioni bimolecolari, si ha (spesso assumendo $\kappa = 1$)

$$k_{\text{bi}} = \kappa \frac{k_B T}{h} \frac{\tilde{q}^\ddagger}{\tilde{q}_A \tilde{q}_B} \exp(-E_0/k_B T)$$

(Note, continua)

(18) (continua) dove q^\ddagger è la funzione di partizione dello stato di transizione e $\tilde{q}^\ddagger, \tilde{q}_A, \tilde{q}_B$ sono funzioni di partizione per unità di volume dello stato di transizione e dei partecipanti A e B alla reazione. E_0 è l'energia di soglia della reazione, al disotto della quale la reazione è ritenuta non poter avvenire. Nella teoria degli stati di transizione, è la differenza del livello di base dello stato di transizione ed il livello di base dei reagenti.

(19) Nella teoria delle reazioni unimolecolari, è importante considerare costanti di velocità di variazione per un insieme di molecole ad una ben definita energia E (e, se il caso, altri numeri quantici adatti, quali il momento angolare J , ecc.) per una concentrazione $c_A(E, J, \dots)$. Espressioni equivalenti a quella della teoria degli stati di transizione derivano dall'ambito della teoria di quasi-equilibrio e dalla teoria di Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus (RRKM) del modello statistico del canale adiabatico (MSCA). La costante di velocità di variazione unimolecolare è allora data, nella teoria RRKM, dall'espressione

$$k(E) = \frac{N^\ddagger(E)}{h\rho(E)}$$

$\rho(E)$ è la densità di stati della molecola, $N(E)$ è il numero totale di stati della molecola con energia minore di E ,

$$N(E) = \sum_i H(E - E_i) = \int_0^E \rho(E') dE'$$

e $N^\ddagger(E)$ è il corrispondente numero di stati dello stato di transizione. Nell'ambito del modello statistico del canale adiabatico (MSCA) si ha

$$k(E, J) = \kappa \frac{W(E, J)}{h\rho(E, J)}$$

V_a^{\max} è il massimo del potenziale del canale adiabatico a , $H(x)$ è la funzione di Heaviside (vedi Sez. 4.2, p. 107) e J è il numero quantico del momento angolare [102]. Possono apparire qui oltre a J ulteriori costanti di moto.

(20) La costante di Michaelis origina dal trattamento di un meccanismo di catalisi enzimatica



dove E è l'enzima, S il substrato, ES il complesso enzima-substrato e P il prodotto. V è chiamata velocità massima di variazione [100].

(21) In cinetica generalizzata del primo ordine, l'equazione di velocità di variazione può essere scritta come un'equazione matriciale, con il vettore concentrazione $c = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T$ ed i coefficienti del primo ordine della velocità di variazione K_{fi} come elementi di matrice.

(22) La resa quantica ϕ è definita in generale dal *numero di eventi definiti* diviso per il *numero di fotoni assorbiti* [60]. Per una reazione fotochimica può essere definita come

$$\phi = \left| \frac{d\xi/dt}{dn_\gamma/dt} \right|$$

che è la *velocità di conversione* divisa per la *velocità di assorbimento dei fotoni*.

(23) Per decadimento esponenziale di emissione spontanea (fluorescenza) si ha, per il decadimento della concentrazione dello stato eccitato, c^*

$$\frac{d[h\nu]}{dt} = -\frac{dc^*}{dt} = k_f c^*$$

L'intera ampiezza a metà altezza Γ di una riga di assorbimento lorentziana è legata alla costante di velocità di variazione della fluorescenza. Per una predissociazione, Γ_p è legato alla costante di velocità di variazione della predissociazione k_p . Tuttavia, le larghezze di riga possono anche dipendere in pratica da altri contributi.

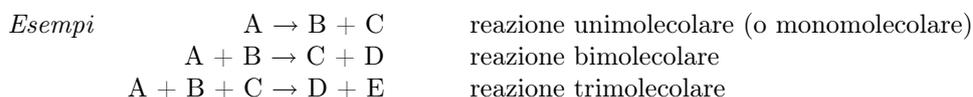
(24) L'einstein è talora usato come unità di misura per la quantità di sostanza di entità fotoni, ove un einstein corrisponde ad 1 mol di fotoni, o come unità di misura dell'energia, dove un einstein corrisponde ad una energia $Lh\nu$ di 1 mol di fotoni monocromatici di frequenza ν .

2.12.1 Altri simboli, termini e convenzioni usate in chimica cinetica

Descrizioni aggiuntive si trovano in [100].

(i) Reazioni elementari

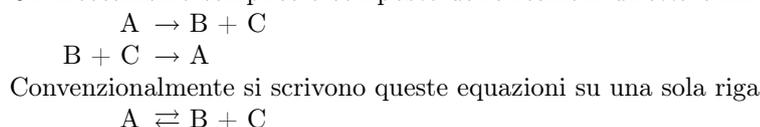
Reazioni che avvengono al livello molecolare in un passo vengono chiamate *reazioni elementari*. Si definiscono convenzionalmente come unidirezionali, scritte con una freccia semplice, sempre da sinistra a destra. Il numero di particelle reagenti coinvolte a sinistra è chiamato la *molecolarità* della reazione elementare.



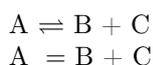
(ii) Meccanismi composti

Una reazione che comporta più di una reazione elementare è detta con meccanismo composto. I termini meccanismo complesso, indiretto, e multipasso sono anche comunemente usati. Tipi speciali di meccanismo includono meccanismi di reazione a catena, meccanismi di reazione catalitica, ecc.

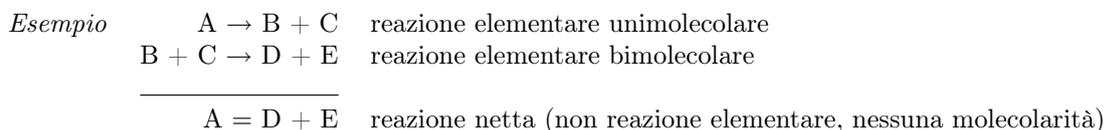
Esempi Un meccanismo semplice è composto dalle reazioni diretta e inversa



Tuttavia, è utile in cinetica distinguere questa da una reazione netta, che è scritta sia con una freccia doppia che col segno di “uguale”



Quando si combina un meccanismo composto per ottenere una reazione netta, non si deve usare la freccia semplice nell'equazione risultante.

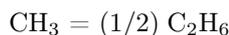


Inoltre, è utile distinguere l'equazione stechiometrica che definisce la velocità di reazione e la costante di velocità di variazione dalla equazione che definisce la reazione elementare e la legge di velocità di variazione.

Esempio Ricombinazione di radicali metilici al limite di alta pressione
La reazione elementare è $\text{CH}_3 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$
Essa ha una legge di velocità del secondo ordine. Se si usa l'equazione stechiometrica
 $2 \text{CH}_3 = \text{C}_2\text{H}_6$
la definizione della velocità di reazione dà

$$v_C = -\frac{1}{2} \frac{dC_{\text{CH}_3}}{dt} = k C_{\text{CH}_3}^2$$

Se si usa l'equazione stechiometrica



la definizione di velocità di reazione è

$$v_C = -\frac{dC_{\text{CH}_3}}{dt} = k' C_{\text{CH}_3}^2$$

Quindi $k' = 2k$.

Analogamente alle entalpie di reazione, i coefficienti di velocità di variazione sono definiti solo per una specifica equazione stechiometrica. Si raccomanda, per evitare ambiguità, di indicare sempre esplicitamente l'equazione stechiometrica e l'equazione differenziale per la velocità di reazione. In mancanza di specificazioni, i coefficienti stechiometrici dovrebbero essere gli stessi che nell'equazione di reazione (per la reazione elementare)). Tuttavia non è sempre possibile usare un'equazione di reazione come equazione stechiometrica.

Esempio

Reazione trimolecolare di atomi di idrogeno

La reazione elementare è $\text{H} + \text{H} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{H}$

Essa ha una legge di velocità del terzo ordine. L'equazione stechiometrica è

$2 \text{H} = \text{H}_2$

e la definizione della velocità di reazione dà

$$v_c = -\frac{1}{2} \frac{d[\text{H}]}{dt} = k [\text{H}]^3$$

La reazione bimolecolare $\text{H} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2$ con la stessa equazione stechiometrica è una reazione elementare *differente* (molto improbabile), non la stessa della reazione trimolecolare. Altri esempi includono reazioni catalizzate come $\text{X} + \text{A} \rightarrow \text{X} + \text{B}$ che dà l'equazione stechiometrica $\text{A} = \text{B}$ e la velocità di reazione $v_c = -d[\text{A}]/dt = k[\text{A}][\text{X}]$ ($\neq d[\text{X}]/dt = 0$). Nuovamente, la reazione unimolecolare $\text{A} \rightarrow \text{B}$ esiste, ma sarebbe una reazione elementare *differente* con la stessa stechiometria.

2.13 ELETTROCHIMICA

I concetti dell'elettrochimica, la terminologia ed i simboli sono descritti più in esteso in [1.i] e [103–107]. Per il campo dell'ingegneria elettrochimica si veda [108], per l'elettrochimica dei semiconduttori e per la conversione fotoelettrochimica dell'energia si veda [109], per la nomenclatura nel campo della corrosione si veda [110], per le impedenze in sistemi elettrochimici si veda [111], per i fenomeni elettrocinetici si veda [112], per i biosensori elettrochimici si veda [113] e per gli elettrodi chimicamente modificati (ECM) si veda [114].

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
carica elementare	e	carica del protone	C	
costante di Faraday	F	$F = eN_A$	C mol ⁻¹	
numero di carica di uno ione	z	$z_B = Q_B/e$	1	1
forza ionica, in termini di molalità	I_m, I	$I_m = (1/2) \sum_i m_i z_i^2$	mol kg ⁻¹	
in termini di concentrazione	I_c, I	$I_c = (1/2) \sum_i c_i z_i^2$	mol m ⁻³	2
molalità ionica media	m_{\pm}	$m_{\pm}^{(\nu_+ + \nu_-)} = m_+^{\nu_+} m_-^{\nu_-}$	mol kg ⁻¹	3
coefficiente di attività ionica media	γ_{\pm}	$\gamma_{\pm}^{(\nu_+ + \nu_-)} = \gamma_+^{\nu_+} \gamma_-^{\nu_-}$	1	3
attività ionica media	a_{\pm}	$a_{\pm} = m_{\pm} \gamma_{\pm} / m^{\ominus}$	1	3, 4, 5
attività di un elettrolita	$a(A_{\nu_+} B_{\nu_-})$	$a(A_{\nu_+} B_{\nu_-}) = a_{\pm}^{(\nu_+ + \nu_-)}$	1	3
pH	pH	pH = -lg(a_{H^+})	1	5, 6
potenziale elettrico esterno	ψ		V	7
potenziale elettrico superficiale	χ		V	8
potenziale elettrico interno	ϕ	$\phi = \chi + \psi$	V	
differenza di potenziale di Volta	$\Delta\psi$	$\Delta_{\alpha}^{\beta} \psi = \psi^{\beta} - \psi^{\alpha}$	V	9

(1) La definizione si applica ad entità B.

(2) Per evitare confusione con la corrente catodica, simbolo I_c (si noti il pedice non corsivo), il simbolo I o talora μ (quando la corrente è indicata con I) è usato per la forza ionica espressa in termini di concentrazione.

(3) ν_+ e ν_- sono i numeri di cationi ed anioni per unità di formula di un elettrolita $A_{\nu_+} B_{\nu_-}$.

Esempio Per $Al_2(SO_4)_3$, $\nu_+ = 2$ e $\nu_- = 3$.

m_+ e m_- , e γ_+ e γ_- , sono le molalità ed i coefficienti di attività cationici ed anionici. Se la molalità di $A_{\nu_+} B_{\nu_-}$ è m , allora $m_+ = \nu_+ m$ e $m_- = \nu_- m$. Una definizione simile è usata per una scala di concentrazione riguardo alla concentrazione ionica media c_{\pm} .

(4) $m^{\ominus} = 1 \text{ mol kg}^{-1}$.

(5) Per un singolo ione, né l'attività a_+ , a_- né i coefficienti di attività γ_+ , γ_- sono misurabili.

(6) La definizione di pH è discussa nella Sez. 2.13.1 (viii), p. 75. Il simbolo pH è un'eccezione alla regola generale per i simboli di grandezze fisiche (Sez. 1.3.1, p. 5) poiché è formato da due lettere ed è sempre scritto in caratteri normali.

(7) ψ^{β} è il potenziale elettrostatico della fase β dovuto alla carica elettrica Q della fase. Esso può essere calcolato mediante l'elettrostatica classica. Per esempio, per una sfera conduttrice con eccesso di carica Q e raggio r nel vuoto, $\psi = Q/4\pi\epsilon_0 r$.

(8) Il potenziale superficiale è definito come il lavoro (diviso per la carica) necessario a trasferire una carica positiva ideale (cioè priva di massa) attraverso il campo elettrico di uno strato dipolare all'interfaccia tra la fase α e la fase β . Il valore assoluto di χ non può essere determinato, solo le differenze sono misurabili.

(9) $\Delta\psi$ è la differenza di potenziale esterno, misurabile, dovuto alla carica delle fasi α e β .

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
differenza di potenziale di Galvani	$\Delta\phi$	$\Delta_{\alpha}^{\beta}\phi = \phi^{\beta} - \phi^{\alpha}$	V	10
potenziale elettrochimico	$\tilde{\mu}_{\text{B}}^{\alpha}$	$\tilde{\mu}_{\text{B}}^{\alpha} = (\partial G/\partial n_{\text{B}}^{\alpha})_{T,p,n_{j \neq \text{B}}} = \mu_{\text{B}}^{\alpha\ominus} + RT \ln a_{\text{B}} + z_{\text{B}}F\phi^{\alpha}$	J mol ⁻¹	1, 11
densità di carica superficiale	σ	$\sigma = Q_{\text{s}}/A$	C m ⁻²	12
potenziale di elettrodo	E, U		V	13
differenza di potenziale di una cella elettrochimica, potenziale di cella	$E_{\text{cell}}, U_{\text{cella}}$	$E_{\text{cella}} = E_{\text{D}} - E_{\text{S}}$	V	14
numero di elettroni di una reazione elettrochimica (numero di carica)	z, n	$z = \nu_{\text{e}} $	1	15
potenziale standard di elettrodo	E^{\ominus}	$E^{\ominus} = -\Delta_{\text{r}}G^{\ominus}/zF$	V	16, 17

(10) $\Delta\phi$ è la differenza interna di potenziale tra punti entro la massa delle fasi α e β ; è misurabile solo se le fasi sono di identica composizione.

(11) Il potenziale elettrochimico dello ione B in una fase è l'energia parziale molare di Gibbs dello ione. Il nome speciale "potenziale elettrochimico", e l'accento circonflesso sul simbolo $\tilde{\mu}_{\text{B}}$, sono usati per ricordare che per uno ione l'energia parziale molare di Gibbs dipende dal potenziale interno ϕ ma anche dalla composizione chimica. La differenza di potenziale elettrochimico dello ione B tra due fasi α e β di differente composizione e differente potenziale interno è data da

$$\tilde{\mu}_{\text{B}}^{\alpha} - \tilde{\mu}_{\text{B}}^{\beta} = \mu_{\text{B}}^{\alpha\ominus} - \mu_{\text{B}}^{\beta\ominus} + RT \ln (a_{\text{B}}^{\alpha}/a_{\text{B}}^{\beta}) + z_{\text{B}}F(\phi^{\alpha} - \phi^{\beta})$$

In genere non è possibile separare il termine che dipende dalla composizione da quello che dipende dal potenziale interno, perché non è possibile misurare l'attività relativa a_{B} dello ione né la differenza di potenziale interno tra le due fasi di differente composizione chimica. Tuttavia, il potenziale elettrochimico è sempre ben definito e, in un sistema multifase con fasi a differenti potenziali interni, l'equilibrio rispetto al trasferimento dello ione B tra le fasi è ottenuto quando il potenziale elettrochimico è lo stesso per tutte le fasi.

(12) Q_{s} è la carica da un lato dell'interfaccia, A è l'area superficiale. Nel caso di elettrodi metallici o semiconduttori, convenzionalmente la carica si riferisce al lato elettrodo.

(13) Non è possibile misurare il valore assoluto del potenziale di elettrodo, per cui E indica sempre il valore relativo al potenziale di qualche elettrodo di riferimento, per esempio quello di un elettrodo standard di idrogeno (EIS) (vedi Sez. 2.13.1 (vi), p. 74). Il concetto di un potenziale *assoluto* di elettrodo è discusso in [106].

(14) I due elettrodi di una cella elettrochimica possono essere distinti da un pedice S (sinistro) e D (destro), oppure 1 e 2. Ciò facilita la rappresentazione della cella nel cosiddetto diagramma di cella (vedi Sez 2.1.3.1 (iii), p. 73). E_{S} e E_{D} sono i potenziali di elettrodo dei due elettrodi. In ingegneria elettrochimica, la tensione di cella è indicata esclusivamente con U . Il valore limite di E_{cella} a corrente zero attraverso la cella, quando tutti i trasferimenti locali di carica e gli equilibri chimici si sono stabiliti, una volta era chiamato fem (forza elettromotrice). Il nome forza elettromotrice ed il simbolo fem non sono più raccomandati, poiché una differenza di potenziale non è una forza.

(15) z (n) è il numero di elettroni nella reazione bilanciata di elettrodo così come scritta. Esso è un intero positivo uguale a $|\nu_{\text{e}}|$, dove ν_{e} è il numero stechiometrico relativo all'elettrone nella reazione di elettrodo. n è comunemente usato quando non c'è rischio di confusione con la quantità di sostanza.

(16) I simboli \ominus e \circ sono entrambi usati per indicare lo stato standard; essi sono ugualmente accettabili.

(17) Il potenziale standard è il valore del *potenziale di equilibrio* di un elettrodo in condizioni standard. $\Delta_{\text{r}}G^{\ominus}$ è l'energia standard di Gibbs di questa reazione di elettrodo, scritta come reazione riducente, rispetto a quella dell'elettrodo standard di idrogeno (vedi anche Sez. 2.13.1 (vi), p. 74). Il potenziale di elettrodo raggiunge il suo *valore di equilibrio* quando non circola corrente nella cella e si sono stabiliti tutti gli equilibri di trasferimento di cariche locali attraverso i limiti di fase che sono rappresentati nel diagramma di cella (eccetto che alle eventuali giunzioni elettrolita-elettrolita) e agli equilibri chimici locali entro le fasi.

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
potenziale di elettrodo all'equilibrio (di una reazione elettrochimica)	E_{eq}	$E_{\text{eq}} = E^{\ominus} - (RT/zF) \sum_i \nu_i \ln a_i$	V	15–18
potenziale formale	$E^{\ominus'}$	$E_{\text{eq}} = E^{\ominus'} - (RT/zF) \sum_i \nu_i \ln(c_i/c^{\ominus})$	V	15, 19
potenziale della giunzione liquida	E_j			20
corrente elettrica	I	$I = dQ/dt$	A	21
densità di corrente elettrica	j, \mathbf{j}	$j = I/A$	A m ⁻²	22
corrente di Faraday	I_F	$I_F = I_c + I_a$	A	23
costante di velocità di riduzione	k_c	$I_c = -nFAk_c \prod_B (c_B')^{n_B}$	(varie)	1, 15, 24
costante di velocità di ossidazione	k_a	$I_a = nFAk_a \prod_B (c_B')^{n_B}$	(varie)	1, 15, 24
coefficiente di trasferimento sovrapotenziale	α, α_c	$\alpha_c = -(RT/nF)d(\ln k_c)/dE$	1	15, 25
pendenza di Tafel	η, E_η	$\eta = E - E_{\text{eq}}$	V	
coefficiente di trasferimento di massa	b	$b = (\partial E / \partial \ln I_F)_{c_i, T, p}$	V	26
	k_d	$k_{d,B} = \nu_B I_{\text{lim},B} / nFCA$	m s ⁻¹	1, 15, 27

(18) Questa è l'equazione di Nernst. $\sum \nu_i \ln a_i$ si riferisce alla reazione di elettrodo, dove a_i sono le attività delle specie che prendono parte ad essa; ν_i sono i numeri stechiometrici di queste specie nell'equazione per la reazione di elettrodo, scritta per una reazione di riduzione, ν_i è positivo per i prodotti e negativo per i reagenti. Il potenziale di equilibrio è anche chiamato *potenziale di Nernst*, o *potenziale reversibile*.

(19) $E^{\ominus'}$ è la grandezza calcolata in esperimenti di elettrochimica dove le concentrazioni delle varie specie sono note, ma non le loro attività. Il suo valore dipende dalla composizione della soluzione elettrolitica. L'argomento di \ln è adimensionato, la concentrazione c_i è normalizzata mediante divisione per la concentrazione standard c^{\ominus} , normalmente $c^{\ominus} = 1 \text{ mol dm}^{-3}$ per specie solubili.

(20) E_j è la differenza di potenziale di Galvani tra due soluzioni elettrolitiche in contatto tra loro.

(21) Q è la carica trasferita attraverso il circuito esterno alla cella.

(22) Formalmente, la densità di corrente elettrica è un vettore, $dI = \mathbf{j} \cdot \mathbf{e}_n dA$ (vedi Sez. 2.3, nota 2, p. 16).

(23) I_F è la corrente attraverso l'interfaccia elettrodo|soluzione, risultante dalla carica trasferita a causa della reazione di elettrodo che procede nella direzione reagenti + $ne^- \rightarrow$ prodotti. I_c è la corrente *catodica* parziale dovuta alla reazione di riduzione, I_a è la corrente *anodica* parziale dovuta alla reazione di ossidazione. Per definizione I_c è negativa e I_a positiva. Al potenziale di equilibrio, $I_a = -I_c = I_0$ (la corrente di scambio) e $j_a = -j_c = j_0$ (densità di corrente di scambio). I o j possono raggiungere valori limite, indicati dal pedice *lim*, in aggiunta ai pedici F, c, od a.

(24) Per una reazione del primo ordine l'unità di misura SI è m s⁻¹. Qui n (o z) è il numero di elettroni trasferiti nella reazione elettrochimica, c_B' è la concentrazione all'interfaccia tra fasi, n_B è l'ordine di reazione rispetto all'entità B. I simboli una volta usati k_{red}, k_f e \vec{k} (per k_c) e k_{ox}, k_b e \overleftarrow{k} (for k_a) non sono raccomandati.

(25) α o α_c è anche chiamato *coefficiente di trasferimento catodico*. Analogamente il *coefficiente di trasferimento anodico* è definito come $\alpha_a = (RT/nF)d(\ln k_a)/dE$. Allo stesso potenziale $\alpha_a = 1 - \alpha_c$. Il *fattore di simmetria*, β , è il coefficiente di trasferimento catodico, α_i di un passo elementare i della reazione, in cui è trasferito solo un elettrone.

(26) La pendenza di Tafel b è una grandezza sperimentale che può fornire informazioni cinetiche.

(27) Il coefficiente di trasferimento di massa è il flusso diviso per la concentrazione. Per un trasferimento di massa stazionario, $k_{d,B} = D_B/\delta_B$ dove δ_B è lo spessore dello strato di diffusione (che è modello-dipendente) e D_B è il coefficiente di diffusione della entità B. Per maggiori informazioni si veda [17].

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
potenziale elettrocinetico (potenziale ζ)	ζ		V	
conducibilità	$\kappa, (\sigma)$	$\mathbf{j} = \kappa \mathbf{E}$	S m^{-1}	22, 28
mobilità elettrica	$u, (m)$	$u_{\text{B}} = v_{\text{B}} / \mathbf{E} $	$\text{m}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	1, 29
conducibilità ionica, conducibilità molare di uno ione	λ	$\lambda_{\text{B}} = z_{\text{B}} F u_{\text{B}}$	$\text{S m}^2 \text{mol}^{-1}$	1, 30, 31
conducibilità molare	Λ	$\Lambda(A_{\nu^+} B_{\nu^-}) = \nu_+ \lambda_+ + \nu_- \lambda_-$	$\text{S m}^2 \text{mol}^{-1}$	1, 30, 31
numero di trasporto	t	$t_{\text{B}} = \lambda_{\text{B}} c_{\text{B}} / \sum_i \lambda_i c_i = j_{\text{B}} / \sum_i j_i$	1	1

(28) La conducibilità era in passato chiamata conduttanza specifica. \mathbf{E} è il vettore di intensità di campo elettrico.

(29) v_{B} è la velocità di migrazione delle entità B e $|\mathbf{E}|$ è l'intensità di campo elettrico entro la fase in questione.

(30) L'unità $\text{S cm}^2 \text{mol}^{-1}$ è spesso usata per la conducibilità molare. La conducibilità è uguale a $\kappa = \sum \lambda_i c_i$.

(31) Si deve specificare l'entità alla quale si riferisce la conducibilità molare. Come pratica standard si sceglie come entità $1/z_{\text{B}}$ di un ione di numero di carica z_{B} , per normalizzare la carica ionica, così che, per esempio, le conducibilità molari degli ioni potassio, bario e lantanio vengono indicate con $\lambda(\text{K}^+)$, $\lambda((1/2) \text{Ba}^{2+})$ o $\lambda((1/3) \text{La}^{3+})$, le cosiddette conducibilità molecolari di *entità equivalenti* (una volta chiamate *conducibilità equivalenti*) [115].

2.13.1 Convenzioni di segno e di notazione in elettrochimica ¹

(i) Celle elettrochimiche

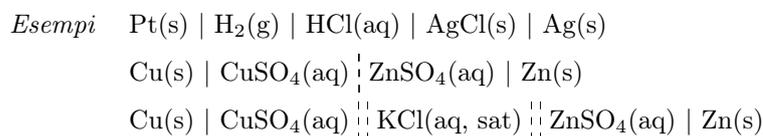
Le celle elettrochimiche consistono di almeno due conduttori elettrici (normalmente metallici) in contatto con conduttori ionici (elettroliti). Il flusso di corrente attraverso le celle elettrochimiche può essere nullo o non nullo. Celle elettrochimiche con flusso di corrente possono operare sia come *celle galvaniche*, in cui hanno luogo reazioni chimiche spontanee ed energia chimica è convertita in energia elettrica, o come *elettrolitica cella*, in cui energia elettrica è convertita in energia chimica. In entrambi i casi parte dell'energia viene convertita in calore (positivo o negativo).

(ii) Elettrodo

Attualmente il termine elettrodo è usato con due significati diversi, cioè come (i) il conduttore elettrico (normalmente metallico) connesso ai circuiti elettrici esterni, o come (ii) la semicella consistente in un conduttore elettrico ed almeno un conduttore ionico. Il secondo significato è quello normale in elettrochimica.

(iii) Rappresentazione delle celle elettrochimiche

Le celle elettrochimiche sono rappresentate da diagrammi come quelli negli esempi seguenti:



Una singola barra verticale (|) è usata per rappresentare un confine di fase, una barra verticale tratteggiata (|) per rappresentare una giunzione tra liquidi miscibili, ed una doppia barra verticale tratteggiata (|||) per rappresentare una giunzione liquida in cui il potenziale del liquido si suppone sia stato eliminato.

¹ Queste convenzioni sono in accordo con la "Convenzione di Stoccolma" del 1953 [103].

(iv) Differenza di potenziale di una cella elettrochimica

La differenza di potenziale di una cella elettrochimica è misurata tra un conduttore metallico collegato all'elettrodo di destra del diagramma di cella ed un identico conduttore metallico collegato a quello di sinistra. Una differenza di potenziale elettrico può essere misurata solo tra due pezzi di materiale della stessa composizione. In pratica, essi sono quasi sempre di rame collegati agli elettrodi della cella.

Alla giunzione | del materiale dell'elettrodo di rame c'è una differenza di potenziale; il suo valore è incorporato nella costante alla quale il potenziale di elettrodo è riferita.

A causa delle differenti velocità di diffusione degli anioni e dei cationi da una soluzione all'altra, potenziali di giunzione liquida, E_j , compaiono ogniqualevolta due soluzioni di differente composizione sono immiscibili o sono separate da un diaframma o qualche altro mezzo che impedisce la miscelazione. Se l'equilibrio non viene stabilito a queste giunzioni, le celle possono includere potenziali di giunzione sconosciuti. Ponti di sale (si veda, ad esempio, la terza cella nella precedente Sez. 2.13.1 (iii)) sono comunemente usati per minimizzare o stabilizzare i contributi alla differenza di potenziale misurata dei potenziali di giunzione (di liquido) all'interfaccia di due soluzioni di elettroliti miscibili. All'interfaccia di due soluzioni di elettroliti immiscibili, si può stabilire una distribuzione termodinamica di potenziale dovuta alla partizione di carica di equilibrio.

(v) Potenziale standard della reazione in una cella elettrochimica

Se nessuna corrente fluisce attraverso la cella e tutti i trasferimenti locali di carica ed gli equilibri chimici locali di reazione di ciascun elettrodo hanno avuto luogo, la differenza di potenziale della cella è legata all'energia di Gibbs della reazione complessiva di cella dall'equazione

$$\Delta_r G = -zFE_{\text{cell,eq}}$$

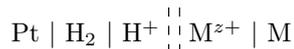
assumendo trascurabili i potenziali di giunzione. Se la reazione indicata nella cella elettrochimica ha luogo spontaneamente, $\Delta_r G$ è negativo e E_{cell} positivo. Se la cella è indicata con gli elettrodi nell'ordine inverso $\Delta_r G$ è positivo e E_{cell} è negativo. Il potenziale di equilibrio della cella, cioè quello della cella in cui non fluisce corrente, è dato da

$$E_{\text{cell,eq}} = E^{\circ}_{\text{cell,eq}} - \frac{RT}{zF} \sum_i \nu_i \ln a_i$$

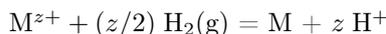
a_i sono le attività delle specie che prendono parte alla reazione di cella e ν_i sono i numeri stechiometrici di queste specie nell'equazione scritta per la reazione di cella (vedi anche note 15 e 16, p. 71).

(vi) Potenziale standard di elettrodo (di una reazione elettrochimica)

Il *potenziale standard* di una reazione elettrochimica, abbreviato in potenziale standard, è definito come il potenziale standard di un'ipotetica cella in cui l'elettrodo alla sinistra nel diagramma di cella (semicella) è l'*elettrodo standard di idrogeno* (EIS) e l'elettrodo alla destra è l'elettrodo in questione. Ciò implica che la reazione di cella comporta sempre l'ossidazione dell'idrogeno molecolare. L'elettrodo standard di idrogeno consiste in un elettrodo di platino in contatto con una soluzione di H^+ di attività unitaria e saturata di gas H_2 con una fugacità riferita alla pressione standard di 10^5 Pa (vedi Sez. 2.11.1 (v), p. 62). Per un elettrodo metallico in equilibrio con ioni solvatati il diagramma di cella è



e la reazione relativa è



Questo diagramma può essere abbreviato $E(\text{M}^{z+}/\text{M})$, ma l'ordine dei simboli non può essere invertito. Si noti che l'elettrodo standard di idrogeno quale è stato definito è limitato alle soluzioni acquose. Per maggiori informazioni sulla misura dei potenziali di elettrodo in soluzioni acquose e non acquose, si veda [103, 107].

(vii) Anodo, catodo

I termini anodo e catodo si applicano solo alle celle elettrochimiche attraverso le quali fluisce una corrente netta. In una cella in equilibrio sono anche usati i termini polo positivo e polo negativo. Un *anodo* è un elettrodo al quale la reazione elettrochimica predominante è l'ossidazione; gli elettroni sono prodotti (in una cella galvanica) o estratti (in una cella elettrolitica). Un *catodo* è un elettrodo al quale la reazione elettrochimica predominante è una riduzione che consuma gli elettroni dall'anodo e che raggiunge il catodo dal circuito esterno. Poiché il flusso di elettroni avviene dal potenziale elettrico basso a quello alto (più positivo), in una cella galvanica esso avviene dall'anodo (elettrodo negativo) al catodo (elettrodo positivo), mentre in una cella elettrolitica gli elettroni estratti dall'anodo (l'elettrodo positivo) dalla sorgente esterna fluiscono al catodo (l'elettrodo negativo).

Si noti che in batterie ricaricabili come quelle piombo-acido (accumulatori al piombo), l'elettrodo positivo è un catodo durante la scarica ed un anodo durante la carica, e che l'elettrodo negativo è un anodo durante la scarica ed un anodo durante la carica. Per evitare confusioni, è raccomandato per le batterie ricaricabili di usare solo i termini elettrodo (o placca) positivo e negativo. Per maggiori informazioni sui potenziali di elettrodo, si veda [109].

(viii) Definizione di pH [116]

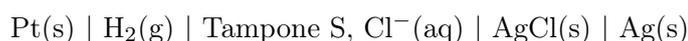
La grandezza pH è definita in termini di attività di ioni idrogeno(1+) (ioni idrogeno) in soluzione:

$$\text{pH} = \text{p}a_{\text{H}^+} = -\lg(a_{\text{H}^+}) = -\lg(m_{\text{H}^+}\gamma_{\text{m}, \text{H}^+}/m^\ominus)$$

dove a_{H^+} è l'attività dell'idrogeno(1+) (ione idrogeno) in soluzione, $\text{H}^+(\text{acq})$, e $\gamma_{\text{m}, \text{H}^+}$ è il coefficiente di attività di $\text{H}^+(\text{acq})$ in termini di molalità alla molalità m_{H^+} . Il simbolo p è interpretato come un operatore ($\text{p}x = -\lg x$) [116, 117] (vedi Sez. 4.1, p. 103) con l'eccezione specifica per il simbolo pH [117]. Il simbolo pH è anche un'eccezione alle regole di espressione dei simboli e delle grandezze (vedi Sez. 1.3.1, p. 5). La molalità standard m^\ominus è scelta in modo da essere uguale a 1 mol kg⁻¹. Poiché il pH è definito come una grandezza che non può essere misurata in modo indipendente, la precedente equazione può solo essere considerata come una definizione *empirica*.

La realizzazione di uno standard primario di pH richiede l'applicazione del concetto di "metodo primario di misura" [116], che garantisca la piena tracciabilità dei risultati di tutte le misure nei vari laboratori e la loro incertezza. Ogni limitazione teorica o di determinazione sperimentale delle variabili dev'essere inclusa nella stima del budget di incertezza del metodo.

Il metodo primario di misura del pH si basa sull'uso di una cella senza trasferenza, nota come *cella di Harned* [118]:



L'applicazione della equazione di Nernst al diagramma sopra riportato porta alla relazione

$$E = E^\ominus - \frac{RT \ln 10}{F} \lg[(m_{\text{H}^+}\gamma_{\text{H}^+}/m^\ominus)(m_{\text{Cl}^-}\gamma_{\text{Cl}^-}/m^\ominus)]$$

dove E è la differenza di potenziale della cella e E^\ominus è il potenziale standard dell'elettrodo AgCl|Ag. Questa equazione può essere riaggiustata come segue

$$-\lg(a_{\text{H}^+}\gamma_{\text{Cl}^-}) = \frac{(E - E^\ominus)}{(RT \ln 10)/F} + \lg(m_{\text{Cl}^-}/m^\ominus)$$

Si eseguono misure di E e la grandezza $-\lg(a_{\text{H}^+}\gamma_{\text{Cl}^-})$ è ottenuta per estrapolazione a $m_{\text{Cl}^-}/m^\ominus = 0$. Il valore di γ_{Cl^-} è calcolato usando la convenzione di Bates-Guggenheim [117] basata sulla teoria di Debye-Hückel. Quindi $-\lg(a_{\text{H}^+})$ è calcolato e definito come pH(PS), dove PS significa standard primario. Le incertezze nelle due stime sono tipicamente, rispettivamente, ± 0.001 in $-\lg(a_{\text{H}^+}\gamma_{\text{Cl}^-})^\ominus$, e ± 0.003 in pH.

Materiali tampone per standard primari di pH devono anche rispondere ad appropriati criteri di materiali di riferimento, inclusa la purezza e la stabilità nel tempo, e l'applicabilità della convenzione di Bates-Guggenheim per $\lg(\gamma_{\text{Cl}^-})$. Questa convenzione richiede che la forza ionica debba essere $\leq 0.1 \text{ mol kg}^{-1}$. Tamponi per standard primari devono anche garantire potenziali di giunzione liquida bassi quando sono usati in celle con giunzioni liquide. Standard secondari, pH(SS), sono pure disponibili, ma ad essi sono associate maggiori incertezze di misura.

Misure pratiche di pH usano in genere celle con giunzioni liquide nelle quali, di conseguenza, sono presenti potenziali di giunzione liquida, E_j [116]. Le misure di pH non sono di norma effettuate usando l'elettrodo Pt|H₂, ma piuttosto un elettrodo di vetro (od altro materiale selettivo per il H⁺), il cui fattore di risposta ($dE/d\text{pH}$) in genere devia dalla pendenza di Nernst. Le incertezze associate sono significativamente maggiori di quelle associate alle misure primarie che usano la cella di Harned. Tuttavia, incorporando le incertezze del metodo primario in quella di tutte le misure successive, si può ottenere per tutte le procedure incertezze riferite allo standard primario tramite una catena ininterrotta di confronti.

Esistono anche valori di riferimento di standard per D₂O e per miscele acquose-organiche di solventi [119].

2.14 CHIMICA DEI COLLOIDI E DELLE SUPERFICI

Le raccomandazioni qui fornite sono basate su raccomandazioni IUPAC, più estese, [1.e–1.h] e su [120–123]. La caratterizzazione dei catalizzatori è descritta in [124] e le grandezze relative alle macromolecole in [125].

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>Unità SI</i>	<i>Note</i>
area superficiale specifica	a_s, a, s	$a_s = A/m$	$\text{m}^2 \text{kg}^{-1}$	1
quantità superficiale di B	n_B^s		mol	2
quantità assorbita di B	n_B^a		mol	2
quantità superficiale in eccesso di B	n_B^σ		mol	3
eccesso superficiale concentrazione di B	$\Gamma_B, (\Gamma_B^\sigma)$	$\Gamma_B = n_B^\sigma/A$	mol m^{-2}	3
eccesso superficiale totale concentrazione	$\Gamma, (\Gamma^\sigma)$	$\Gamma = \sum_i \Gamma_i$	mol m^{-2}	
area per molecola	a, σ	$a_B = A/N_B^a$	m^2	4
area per molecola in un monostrato completo	a_m, σ_m	$a_{m,B} = A/N_{m,B}$	m^2	4
copertura superficiale	θ	$\theta = N_B^a/N_{m,B}$	1	4
angolo di contatto	θ		rad, 1	
spessore di film	t, h, δ		m	
spessore di strato (superficiale o di interfaccia)	τ, δ, t		m	
tensione superficiale, tensione di interfaccia	γ, σ	$\gamma = (\partial G/\partial A_s)_{T,p,n_i}$	$\text{N m}^{-1}, \text{J m}^{-2}$	
tensione del film	Σ_f	$\Sigma_f = (\partial G/\partial A_f)_{T,p,n_i}$	N m^{-1}	5
lunghezza di Debye dello strato diffuso	L_D	$L_D = \kappa^{-1}$	m	6
masse molari medie				
di numero	M_n	$M_n = \sum_i n_i M_i / \sum_i n_i$	kg mol^{-1}	
in massa	M_m, M_w	$M_m = \sum_i n_i M_i^2 / \sum_i n_i M_i$	kg mol^{-1}	
di media z	M_z	$M_z = \sum_i n_i M_i^3 / \sum_i n_i M_i^2$	kg mol^{-1}	
coefficiente di sedimentazione	s	$s = v/a$	s	7
costante di van der Waals	λ		J	
costante di van der Waals ritardata	β, B		J	
costante di van der Waals-Hamaker	A_H		J	
pressione superficiale	π	$\pi = \gamma^0 - \gamma$	N m^{-1}	8

(1) Il pedice s indica un'area superficiale dove un assorbimento o deposizione di specie può aver luogo. m indica la massa di un assorbente solido.

(2) Il valore di n_B^s dipende dallo spessore assegnato allo strato superficiale (vedi anche nota 1, p. 47).

(3) I valori di n_B^σ e Γ_B dipendono dalla convenzione usata per definire la posizione della superficie di Gibbs. Essi sono dati dalla quantità in eccesso di B o di concentrazione superficiale di B rispetto ai valori che si avrebbero se ciascuna delle due fasi fosse omogenea fino alla superficie di separazione di Gibbs.

Raccomandazioni Aggiuntive

L'apice s indica le proprietà di superficie o dello strato di interfaccia. In presenza di adsorbimento esso può essere rimpiazzato dall'apice a .

<i>Esempi</i>	energia di Helmholtz dello strato di interfaccia	A^s
	quantità di sostanza adsorbita	n^a
	quantità di O_2 adsorbito	$n^a(O_2)$ o $n(O_2, a)$
	area per molecola B in un monostrato	$a(B), a_B$

L'apice σ è usato per indicare una proprietà di eccesso superficiale relativa alla superficie di Gibbs.

<i>Esempio</i>	quantità in eccesso superficiale (o quantità superficiale di Gibbs) di B	n_B^σ
----------------	---	--------------

In generale, i valori di Γ_A e Γ_B dipendono dalla posizione scelta per la superficie di separazione di Gibbs. Tuttavia, due grandezze, $\Gamma_B^{(A)}$ e $\Gamma_B^{(n)}$ (e i corrispondenti $n_B^{\sigma(A)}$ e $n_B^{\sigma(n)}$), possono essere definiti in modo invariante rispetto a quella scelta (si veda [1.e]). $\Gamma_B^{(A)}$ è chiamata concentrazione superficiale in eccesso *relativa* di B rispetto ad A, o più semplicemente adsorbimento relativo di B; è il valore di Γ_B quando la superficie è scelta tale da rendere $\Gamma_A = 0$. $\Gamma_B^{(n)}$ è chiamata concentrazione *ridotta* dell'eccesso superficiale di B, o più semplicemente adsorbimento ridotto di B; è il valore di Γ_B quando la superficie è scelta in modo tale da rendere l'eccesso totale $\Gamma = \sum_i \Gamma_i = 0$.

Proprietà delle fasi (α, β, γ) possono essere indicate da apici corrispondenti.

<i>Esempi</i>	tensione superficiale della fase α	γ^α
	tensione interfacciale tra fasi α e β	$\gamma^{\alpha\beta}$

I simboli di grandezze termodinamiche divise per l'area superficiale sono in genere le corrispondenti lettere minuscole; in alternativa si usa un accento circonflesso.

<i>Esempio</i>	entropia interfacciale per unità di area	$s^s (= \hat{s}^s) = S^s / A$
----------------	--	-------------------------------

Le seguenti abbreviazioni sono usate in chimica dei colloidi:

ccc	concentrazione critica di coagulazione
ccm	concentrazione critica di micella
pie	punto isoelettrico
pcn	punto a carica nulla

(Note, continua)

(3) (continua) Si vedano [1.e] e le raccomandazioni aggiuntive.

(4) N_B^a è il numero di molecole adsorbite ($N_B^a = Ln_B^a$), e $N_{m,B}^a$ è il numero di molecole adsorbite in un monostrato completo. La definizione si applica ad entità B.

(5) Nell'equazione, A_f è l'area del film.

(6) La lunghezza caratteristica di Debye ([1.e] e [123]) o lunghezza di schermo di Debye [123] L_D appare nella teoria di Gouy-Chapman e nella teoria della carica spaziale nei semiconduttori.

(7) Nella definizione, v è la velocità di sedimentazione ed a è l'accelerazione di caduta libera o di centrifugazione. Il simbolo per un coefficiente di sedimentazione limite è $[s]$, per un coefficiente di sedimentazione ridotta è s° e per un coefficiente di sedimentazione ridotta limite è $[s^\circ]$; si veda [1.e] per ulteriori dettagli.

(8) Nella definizione, γ^0 è la tensione superficiale della superficie nuda e γ quella della superficie ricoperta.

2.14.1 Struttura della superficie [126]

(i) Superficie di un monocristallo e designazione di vettori

Gli indici 3D di Miller (hkl) sono usati per specificare una superficie che limita una struttura solida. Famiglie di superfici equivalenti per simmetria sono indicate con $\{hkl\}$. Le direzioni dei vettori sono indicate con $[hkl]$ e famiglie di direzioni di vettori con simmetria equivalente sono indicate con $\langle hkl \rangle$.

(ii) Notazioni per superfici a gradini (per reticoli solidi terminati idealmente)

Superfici a gradini (che spesso consistono di gradini di altezza monoatomica e di terrazze di ampiezza arbitraria) con indici di Miller generici (hkl) sono considerati composti alternativamente da faccette a basso indice di Miller ($h_s k_s l_s$) per le facce dei gradini e da ($h_t k_t l_t$) per i piani delle terrazze. La notazione per gradini indica tali superfici come

$$(hkl) = n(h_t k_t l_t) \times (h_s k_s l_s)$$

dove n indica l'ampiezza della terrazza in termini di file di atomi.

Esempio La superficie (755) di un solido fcc, con terrazze orientate (111) e facce dei gradini orientate (100) è indicata nella notazione per gradini con $6(111) \times (100)$.

La notazione per microfaccette consente l'indicazione di terminazioni più complesse di superficie, usando una decomposizione in tre indipendenti orientazioni di faccette di basso indice ($h_1 k_1 l_1$), ($h_2 k_2 l_2$) e ($h_3 k_3 l_3$):

$$(hkl) = a_\lambda^1 (h_1 k_1 l_1) + a_\mu^2 (h_2 k_2 l_2) + a_\nu^3 (h_3 k_3 l_3).$$

I fattori a^β sono semplici coefficienti di decomposizione vettoriale di (hkl) nei tre vettori dell'indice di Miller per le microfaccette, mentre i pedici λ , μ e ν indicano la grandezza relativa della faccetta di celle unitarie 2D su ciascuna faccetta.

Esempio La superficie (10,8,7) di un solido fcc solido, con terrazze orientate (111) e gradini zigzaganti con orientazioni alternate ($11\bar{1}$) and (100), è indicato nella notazione per microfaccette come $(10,8,7) = [(15/2)_{15}(111) + (1/2)_1(11\bar{1}) + 2_2(100)]$.

(iii) Notazioni per i super-reticoli superficiali

Notazione matriciale: Un super-reticolo 2D con vettori base $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ su un substrato massivo con vettori base di superficie 2D $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ soddisfa le relazioni $\mathbf{b}_1 = m_{11}\mathbf{a}_1 + m_{12}\mathbf{a}_2$ e $\mathbf{b}_2 = m_{21}\mathbf{a}_1 + m_{22}\mathbf{a}_2$, che quindi definiscono una matrice $M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}$ che specifica il super-reticolo in modo univoco. Se gli elementi di matrice sono tutti dei numeri interi, il super-reticolo è denominato commisurato al reticolo del substrato.

Notazione di Wood: in molti casi il super-reticolo può essere identificato come $i \left(\frac{b_1}{a_1} \times \frac{b_2}{a_2} \right) R\alpha^\circ$, dove i è c per super-reticoli centrati od i è p per super-reticoli primitivi (p è spesso omissa) ed α è un angolo di rotazione relativo ai vettori base del substrato (questa parte è omissa quando $\alpha = 0$).

Esempio La scacchiera bianca e nera degli scacchi è un super-reticolo rispetto all'insieme sottostante di tutti i quadrati. Questo super-reticolo può essere indicato con una matrice $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$, che è equivalente all'indice di Wood $(\sqrt{2} \times \sqrt{2}) R45^\circ$ o, con descrizione alternativa, $c(2 \times 2)$.

(iv) Simboli

$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$	vettori base del substrato, 2D
$\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*$	vettori base reciproci del substrato, 2D
$\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$	vettori base di super-reticolo, 2D
$\mathbf{b}_1^*, \mathbf{b}_2^*$	vettori base reciproci di super-reticolo, 2D
\mathbf{g}	vettore reciproco di reticolo, 2D
hk	indici di Miller, 2D
hkl	indici di Miller, 3D
M	matrice per notazione di super-reticolo
z	coordinata perpendicolare alla superficie
θ	copertura di superficie
Θ_D	temperatura di Debye
$\Delta\phi_W$	variazione di funzione lavoro
λ_e	cammino libero medio dell'elettrone
ϕ_W	funzione lavoro

2.15 PROPRIETÀ DI TRASPORTO

I nomi ed i simboli qui raccomandati sono in accordo con quelli raccomandati da IUPAP [4] e ISO [5.m]. Ulteriori informazioni sui fenomeni di trasporto in sistemi elettrochimici si possono trovare in [104].

I seguenti simboli sono usati nelle definizioni: massa (m), tempo (t), volume (V), area (A), densità (ρ), velocità (v), lunghezza (l), viscosità (η), pressione (p), accelerazione di caduta libera (g), coefficiente di espansione cubica (α), temperatura termodinamica (T), tensione superficiale (γ), velocità del suono (c), percorso libero medio (λ), frequenza (f), diffusività termica (a), coefficiente di scambio termico (h), conducibilità termica (k), capacità termica specifica a pressione costante (c_p), coefficiente di diffusione (D), frazione molare (x), coefficiente di trasferimento di massa (k_d), permeabilità (μ), conducibilità elettrica (κ), densità di flusso magnetico (B).

Nome	Simbolo	Definizione	Unità SI	Note
flusso di massa m	q_m	$q_m = dm/dt$	kg s ⁻¹	1
densità di flusso di massa m	J_m	$J_m = q_m/A$	kg m ⁻² s ⁻¹	2, 3
flusso di calore, potenza termica	Φ, P	$\Phi = dQ/dt$	W	1
densità di flusso termico	J_q	$J_q = \Phi/A$	W m ⁻²	3
conduttanza termica	G	$G = \Phi/\Delta T$	W K ⁻¹	
resistenza termica	R	$R = 1/G$	K W ⁻¹	
conducibilità termica	λ, k	$\lambda = -J_q/(dT/dl)$	W m ⁻¹ K ⁻¹	
coefficiente di scambio termico	$h, (k, K, \alpha)$	$h = J_q/\Delta T$	W m ⁻² K ⁻¹	
diffusività termica	a	$a = \lambda/\rho c_p$	m ² s ⁻¹	
coefficiente di diffusione	D	$D = -J_n/(dc/dl)$	m ² s ⁻¹	4
viscosità, viscosità di taglio	η	$\eta = -\tau_{xz}(\partial V_x/\partial z)^{-1}$	Pa s	5
viscosità di massa	κ	$\kappa = -\tau_{xx}(\nabla \cdot \mathbf{V})^{-1}$	Pa s	5
coefficiente di diffusione termica	D^T	$D^T = J_x c^{-1}(dT/dx)^{-1}$	m ² K ⁻¹ s ⁻¹	

(1) Può essere definita una grandezza vettoriale, $\mathbf{q}_m = (dm/dt) \mathbf{e}$, dove \mathbf{e} è il vettore unitario nella direzione del flusso, talora chiamata “portata” di m (in inglese “flow rate”). Simili definizioni si applicano a qualunque altra grandezza estensiva.

(2) La densità di flusso delle molecole, J_N , determina sia la velocità con la quale la superficie si copre se ogni molecola vi si ferma, sia la velocità di effusione attraverso un foro nella superficie. Nello studiare l’esposizione, $\int J_N dt$, di una superficie ad un gas, i ricercatori delle superfici trovano utile usare il prodotto della pressione e del tempo come misura dell’esposizione, poichè questo prodotto è uguale alla densità di flusso di numero, J_N , moltiplicato per il tempo $J_N t = (1/4)C\bar{u}t$, dove C è la densità del numero di molecole e \bar{u} la loro velocità media. L’unità di misura langmuir (simbolo L) corrisponde alla esposizione di una superficie a un gas alla pressione di 10⁻⁶ Torr per 1 s. Nota all’edizione italiana: l’uso dell’unità Torr non è più ammesso.

(3) Nelle precedenti edizioni, il termine “flusso” è stato usato per ciò che ora è chiamato la “densità di flusso”, in accordo con IUPAP [4]. Il termine “densità” nel nome di una grandezza fisica intensiva in genere implica “grandezza estensiva diviso volume” per grandezze scalari, ma “grandezza estensiva diviso area” per grandezze vettoriali indicanti il flusso o la portata.

(4) c è la concentrazione in quantità di sostanza.

(5) Si veda anche la Sez. 2.2, p. 15; τ è il tensore di sforzo di taglio (scorrimento).

2.15.1 Numeri caratteristici di trasporto: Grandezze adimensionate

<i>Numero di</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>Note</i>
Reynolds	Re	$Re = \rho v l / \eta$	
Eulero	Eu	$Eu = \Delta p / \rho v^2$	
Froude	Fr	$Fr = v / (lg)^{1/2}$	
Grashof	Gr	$Gr = l^3 g \alpha \Delta T \rho^2 / \eta^2$	
Weber	We	$We = \rho v^2 l / \gamma$	
Mach	Ma	$Ma = v / c$	
Knudsen	Kn	$Kn = \lambda / l$	
Strouhal	Sr	$Sr = l f / v$	
Fourier	Fo	$Fo = a t / l^2$	
Péclet	Pe	$Pe = v l / a$	
Rayleigh	Ra	$Ra = l^3 g \alpha \Delta T \rho / \eta a$	
Nusselt	Nu	$Nu = h l / k$	
Stanton	St	$St = h / \rho v c_p$	
Fourier per trasporto di massa	Fo^*	$Fo^* = D t / l^2$	1
Péclet per trasporto di massa	Pe^*	$Pe^* = v l / D$	1
Grashof per trasporto di massa	Gr^*	$Gr^* = l^3 g \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)_{T,p} \left(\frac{\Delta x \rho}{\eta^2} \right)$	1
Nusselt per trasporto di massa	Nu^*	$Nu^* = k_d l / D$	1, 2
Stanton per trasporto di massa	St^*	$St^* = k_d / v$	1
Prandtl	Pr	$Pr = \eta / \rho a$	
Schmidt	Sc	$Sc = \eta / \rho D$	
Lewis	Le	$Le = a / D$	
Reynolds (magnetico)	Rm, Re_m	$Rm = v \mu \kappa l$	
Alfvén	Al	$Al = v (\rho \mu)^{1/2} / B$	
Hartmann	Ha	$Ha = B l (\kappa / \eta)^{1/2}$	
Cowling	Co	$Co = B^2 / \mu \rho v^2$	

(1) Questa grandezza si applica al trasporto di materia in miscele binarie [72].

(2) Il nome numero di Sherwood ed il simbolo Sh sono stati usati ampiamente per questa grandezza.

3 DEFINIZIONI E SIMBOLI PER LE UNITÁ DI MISURA

3.1 IL SISTEMA INTERNAZIONALE DELLE UNITÀ DI MISURA (SI)

Il Sistema Internazionale delle Unità di Misura (SI) è stato adottato dalla 11ma Conferenza Generale dei Pesi e delle Misure (CGPM) nel 1960 [3]. Esso è un sistema coerente di unità di misura basato su sette *unità SI base*, una per ciascuna di sette grandezze base dimensionalmente indipendenti¹ (vedi Sez. 1.2, p. 4); esse sono: metro, kilogrammo, secondo, ampere, kelvin, mole e candela, rispettivamente per le grandezze base lunghezza, massa, tempo, corrente elettrica, temperatura termodinamica, quantità di sostanza e intensità luminosa. Le definizioni delle unità base SI sono riportate nella Sez. 3.3, p. 87. Le *unità SI derivate* sono espresse come prodotti di potenze positive e negative delle unità base, analogamente alle corrispondenti relazioni vigenti tra le grandezze fisiche. Quando non vengono usati fattori numerici diversi da 1 nelle equazioni di definizione delle unità derivate, queste ultime sono chiamate unità derivate coerenti *unità derivate coerenti*. Le unità SI base e le unità derivate, quando non richiedono nessun prefisso di multiplo o sottomultiplo, formano un sistema coerente di unità di misura e sono chiamate le *SI/unità coerenti*.

Nel Sistema Internazionale delle Unità di Misura vi è una sola unità di misura SI coerente per ciascuna grandezza fisica. Questa è l'appropriata unità base SI (vedi Sez. 3.2, p. 86) o l'appropriata unità SI derivata (vedi Sez. 3.4 e 3.5, p. 89 e 90). Tuttavia, uno qualsiasi dei prefissi decimali approvati, chiamati *prefissi SI*, possono essere usati per ottenere multipli o sottomultipli decimali delle unità SI (vedi Sez. 3.6, p. 91). Le unità SI ed i multipli e sottomultipli decimali ottenuti usando i prefissi SI sono chiamati l'insieme completo delle unità SI, o semplicemente le unità SI, o le unità del SI.

Si raccomanda di usare solo unità SI nella scienza e tecnologia (coi relativi prefissi quando necessario). Quando ci sono ragioni speciali per non applicare questa regola si raccomanda di definire le unità di misura usate in termini delle unità SI.

¹ Nota all'edizione italiana: però nel sistema SI attuale la definizione di cinque delle sette dipende da almeno un'altra delle grandezze base.

3.2 NOMI E SIMBOLI PER LE UNITÀ SI BASE

I simboli qui riportati sono quelli accettati internazionalmente e non devono essere mutati quando usati nelle diverse lingue o alfabeti. Si vedano le Sezioni 1.3 e 1.4, p. 5 e p. 6 riguardo alla scrittura dei simboli delle unità di misura.

<i>Grandezza base</i>	<i>Unità SI base</i>	
	<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>
lunghezza	metro	m
massa	kilogrammo	kg
tempo	secondo	s
corrente elettrica	ampere	A
temperatura termodinamica	kelvin	K
quantità di sostanza	mole	mol
intensità luminosa	candela	cd

3.3 DEFINIZIONI DELLE UNITÀ SI BASE

Le seguenti definizioni delle sette unità SI base sono state adottate dalla Conferenza Generale dei Pesi e delle Misure (CGPM) [3].

metro (simbolo: m)

Il metro è la lunghezza percorsa dalla luce nel vuoto nell'intervallo di tempo pari a 1/299 792 458 di secondo.
(17^{ma} CGPM, 1983)

kilogrammo (simbolo: kg)

Il kilogrammo è l'unità di massa; è uguale alla massa del prototipo internazionale del kilogrammo.
(3^{za} CGPM, 1901) ¹

secondo (simbolo: s)

Il secondo è la durata di 9 192 631 770 periodi della radiazione corrispondente alla transizione tra i due livelli iperfini dello stato base dell'atomo di cesio 133.
(13^{ma} CGPM, 1967)

Questa definizione si riferisce all'atomo di cesio a riposo ed alla temperatura di 0 K.
(CIPM, 1997)

In questa definizione si intende che l'atomo di cesio a $T = 0$ K è imperturbato dalla radiazione di corpo nero. La frequenza degli standard primari di frequenza deve quindi essere corretta per lo spostamento di frequenza dovuto alla radiazione ambiente, come stabilito dal Comitato Consultivo per il Tempo e la Frequenza (CCTF, 1999).

ampere (symbol: A)

L'ampere è la corrente costante che, mantenuta tra due conduttori rettilinei paralleli di lunghezza infinita, di diametro trascurabile, posti ad 1 metro di distanza tra loro nel vuoto, producono tra di essi una forza pari a 2×10^{-7} newton per metro di lunghezza.
(9^{ma} CGPM, 1948)

kelvin (simbolo: K)

Il kelvin, unità della temperatura termodinamica, è la frazione 1/273.16 della temperatura termodinamica del punto triplo dell'acqua.
(13^{ma} CGPM, 1967)

La definizione si riferisce ad acqua avente composizione isotopica definita esattamente dai seguenti rapporti di quantità di sostanza: 0.000 155 76 mole di ²H per mole di ¹H, 0.000 379 9 mole di ¹⁷O per mole di ¹⁶O, e 0.002 005 2 mole di ¹⁸O per mole di ¹⁶O.
(CIPM, 2005) ²

¹ Il kilogrammo è la sola unità base che non è definita dalla misura di un sistema basato su costanti microscopiche naturali o da un sistema sperimentale derivato da tale sistema. Si utilizza invece un oggetto di fabbricazione umana (il prototipo internazionale del kilogrammo). Definizioni alternative sono attualmente in discussione [127–129].

² Si veda anche Sez. 2.11, nota 2, p. 56.

mole (simbolo: mol)

1. La mole è la quantità di sostanza di un sistema che contiene tante entità elementari quanti sono gli atomi in 0.012 kilogrammi di carbonio 12. Il simbolo è “mol”.

2. Quando si usa la mole, le entità elementari devono essere specificate e possono essere atomi, molecole, ioni, elettroni o altre particelle o specifici gruppi di esse.

(14^{ma} CGPM, 1971)

In questa definizione è inteso che ci si riferisce ad atomi di carbonio 12 liberi, a riposo e nel loro stato base.

(CIPM, 1980)

Esempi di uso della mole

1 mol di $^1\text{H}_2$ contiene circa 6.022×10^{23} molecole di $^1\text{H}_2$ o 12.044×10^{23} atomi di ^1H

1 mol di HgCl ha una massa di 236.04 g

1 mol di Hg_2Cl_2 ha una massa di 472.09 g

1 mol di Hg_2^{2+} ha una massa di 401.18 g ed una carica di 192.97 kC

1 mol di $\text{Fe}_{0.91}\text{S}$ ha una massa di 82.88 g

1 mol di e^- ha una massa di 548.58 μg ed una carica di -96.49 kC

1 mol di fotoni di frequenza 5×10^{14} Hz

ha una energia di circa 199.5 kJ

La specificazione dell'entità non implica che le entità siano identiche: si può avere 1 mol di una miscela isotopica o una miscela di gas.

candela (simbolo: cd)

La candela è l'intensità luminosa, in una data direzione, di una sorgente che emette una radiazione monocromatica alla frequenza di 540×10^{12} hertz e che ha un'intensità radiante in quella direzione di 1/683 watt per steradiante.

(16^{ma} CGPM, 1979)

3.4 UNITÀ SI DERIVATE CON NOMI E SIMBOLI SPECIALI

Grandezza derivata	Unità SI derivata				Note
	Nome	Simbolo	espressa in termini di altre unità SI		
angolo piano	radiante	rad	m m^{-1}	$= 1$	1
angolo solido	steradiane	sr	$\text{m}^2 \text{m}^{-2}$	$= 1$	1
frequenza	hertz	Hz	s^{-1}		2
forza	newton	N	m kg s^{-2}		
pressione, sforzo	pascal	Pa	N m^{-2}	$= \text{m}^{-1} \text{kg s}^{-2}$	
energia, lavoro, calore	joule	J	N m	$= \text{m}^2 \text{kg s}^{-2}$	
potenza, di flusso radiante	watt	W	J s^{-1}	$= \text{m}^2 \text{kg s}^{-3}$	
carica elettrica	coulomb	C	A s		
potenziale elettrico, (forza elettromotrice), tensione elettrica	volt	V	J C^{-1}	$= \text{m}^2 \text{kg s}^{-3} \text{A}^{-1}$	
resistenza elettrica	ohm	Ω	V A^{-1}	$= \text{m}^2 \text{kg s}^{-3} \text{A}^{-2}$	
conduttanza elettrica	siemens	S	Ω^{-1}	$= \text{m}^{-2} \text{kg}^{-1} \text{s}^3 \text{A}^2$	
capacità elettrica	farad	F	C V^{-1}	$= \text{m}^{-2} \text{kg}^{-1} \text{s}^4 \text{A}^2$	
flusso magnetico	weber	Wb	V s	$= \text{m}^2 \text{kg s}^{-2} \text{A}^{-1}$	
densità di flusso magnetico	tesla	T	Wb m^{-2}	$= \text{kg s}^{-2} \text{A}^{-1}$	
induttanza	henry	H	$\text{V A}^{-1} \text{s}$	$= \text{m}^2 \text{kg s}^{-2} \text{A}^{-2}$	
temperatura Celsius	grado Celsius	$^{\circ}\text{C}$	K		3
flusso luminoso	lumen	lm	cd sr	$= \text{cd}$	
illuminanza	lux	lx	lm m^{-2}	$= \text{cd m}^{-2}$	
attività, (radioattività) riferita ad un radio- nuclide	becquerel	Bq	s^{-1}		4
dose assorbita, kerma	gray	Gy	J kg^{-1}	$= \text{m}^2 \text{s}^{-2}$	4
dose equivalente (indice di dose equivalente)	sievert	Sv	J kg^{-1}	$= \text{m}^2 \text{s}^{-2}$	4
attività catalitica	katal	kat	mol s^{-1}		4, 5

(1) Radiante e steradiane sono unità derivate. Poiché esse hanno dimensione 1, si possono includere o meno nelle espressioni delle unità SI derivate. In pratica ciò significa che rad e sr possono essere indicate quando opportuno o possono essere omesse quando la chiarezza non viene meno.

(2) Per la frequenza angolare e per la velocità angolare si deve usare l'unità rad s^{-1} , o semplicemente s^{-1} , ma *non* si può usare Hz. L'unità Hz si può usare per la frequenza *solo* col significato di cicli per secondo.

(3) La temperatura Celsius t è definita dall'equazione

$$t/^{\circ}\text{C} = T/\text{K} - 273.15$$

L'unità SI della temperatura Celsius è il grado Celsius, $^{\circ}\text{C}$, che è uguale al kelvin, K. $^{\circ}\text{C}$ viene trattato come un singolo simbolo, senza spazio tra il segno $^{\circ}$ ed il C. Il simbolo $^{\circ}\text{K}$, ed il simbolo $^{\circ}$ non devono più essere usati per l'unità della temperatura termodinamica.

(4) Il Becquerel è l'unità di riferimento da usare in chimica nucleare e radiochimica; le unità becquerel, gray e sievert sono ammessi per ragioni di salvaguardia della salute umana [3].

(5) Quando la quantità di catalizzatore non può essere espressa come un numero di entità elementari, cioè come una quantità di sostanza, né come una massa, una "attività catalitica" può ancora essere definita come una proprietà del catalizzatore misurata mediante una velocità di conversione catalitica in specifiche condizioni ottimali. Il katal, $1 \text{ kat} = 1 \text{ mol s}^{-1}$, deve essere usato invece della "unità enzimatica", $1 \text{ U} = \mu\text{mol min}^{-1} \approx 16.67 \text{ nkat}$ [130].

3.5 UNITÀ SI DERIVATE PER ALTRE GRANDEZZE

In questa tavola sono riportati esempi di altre unità SI derivate; la lista non è completa.

<i>Grandezza derivata</i>	<i>Unità SI derivate</i>		<i>Note</i>
	<i>Simbolo</i>	<i>espressa in termini delle unità SI base</i>	
efficienza	W W ⁻¹	= 1	
area	m ²		
volume	m ³		
velocità	m s ⁻¹		
velocità angolare	rad s ⁻¹	= s ⁻¹	
accelerazione	m s ⁻²		
momento della forza	N m	= m ² kg s ⁻²	
numero d'onda	m ⁻¹		1
densità, densità in massa	kg m ⁻³		
volume specifico	m ³ kg ⁻¹		
concentrazione di quantità di sostanza	mol m ⁻³		2
volume molare	m ³ mol ⁻¹		
capacità termica, entropia	J K ⁻¹	= m ² kg s ⁻² K ⁻¹	
capacità termica molare, entropia molare	J K ⁻¹ mol ⁻¹	= m ² kg s ⁻² K ⁻¹ mol ⁻¹	
capacità termica specifica, entropia specifica	J K ⁻¹ kg ⁻¹	= m ² s ⁻² K ⁻¹	
energia molare	J mol ⁻¹	= m ² kg s ⁻² mol ⁻¹	
energia specifica	J kg ⁻¹	= m ² s ⁻²	
densità di energia	J m ⁻³	= m ⁻¹ kg s ⁻²	
tensione superficiale	N m ⁻¹	= kg s ⁻²	
densità di flusso termico, irradianza	W m ⁻²	= kg s ⁻³	
conducibilità termica	W m ⁻¹ K ⁻¹	= m kg s ⁻³ K ⁻¹	
viscosità cinematica, coefficiente di diffusione	m ² s ⁻¹		
viscosità dinamica, viscosità al taglio	Pa s	= m ⁻¹ kg s ⁻¹	
densità di carica elettrica	C m ⁻³	= m ⁻³ s A	
densità di corrente elettrica	A m ⁻²		
conducibilità	S m ⁻¹	= m ⁻³ kg ⁻¹ s ³ A ²	
conducibilità molare	S m ² mol ⁻¹	= kg ⁻¹ s ³ A ² mol ⁻¹	
permittività	F m ⁻¹	= m ⁻³ kg ⁻¹ s ⁴ A ²	
permeabilità	H m ⁻¹	= m kg s ⁻² A ⁻²	
intensità di campo elettrico	V m ⁻¹	= m kg s ⁻³ A ⁻¹	
intensità di campo magnetico	A m ⁻¹		
esposizione (raggi X e γ)	C kg ⁻¹	= kg ⁻¹ s A	
velocità di assorbimento di dose	Gy s ⁻¹	= m ² s ⁻³	

(1) La parola “numero d’onda” indica la grandezza “lunghezza d’onda reciproca”. L’uso dell’unità di misura cm⁻¹ è da evitare.

(2) Quando non vi sia ambiguità, questa grandezza può essere chiamata brevemente “concentrazione”.

3.6 PREFISSI SI E PREFISSI PER MULTIPLI BINARI

I seguenti prefissi [3] sono usati per indicare multipli e sottomultipli decimali di unità SI.

<i>Sottomultiplo</i>	<i>Prefisso</i>		<i>Multiplo</i>	<i>Prefisso</i>	
	<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>		<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>
10^{-1}	deci	d	10^1	deca	da
10^{-2}	centi	c	10^2	hecto	h
10^{-3}	milli	m	10^3	kilo	k
10^{-6}	micro	μ	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

I simboli dei prefissi devono essere scritti in caratteri normali senza spazio tra il prefisso ed il simbolo dell'unità di misura.

Esempio kilometro, km

Quando un prefisso è usato con un simbolo di unità, la combinazione dei due deve essere considerata come un nuovo simbolo, che può essere elevato a potenza senza dover usare le parentesi.

Esempi $1 \text{ cm}^3 = (10^{-2} \text{ m})^3 = 10^{-6} \text{ m}^3$
 $1 \mu\text{s}^{-1} = (10^{-6} \text{ s})^{-1} = 10^6 \text{ s}^{-1}$
 $1 \text{ V/cm} = 1 \text{ V}/(10^{-2} \text{ m}) = 10^2 \text{ V/m}$
 $1 \text{ mmol/dm}^3 = 10^{-3} \text{ mol}/(10^{-3} \text{ m}^3) = 1 \text{ mol m}^{-3}$

Un prefisso non può mai essere usato da solo e non possono essere usati più prefissi in serie.

Esempio pm, non $\mu\mu\text{m}$

I nomi ed i simboli dei multipli e sottomultipli decimali dell'unità SI base di massa, il kilogrammo, simbolo kg, che già contiene un prefisso, sono costruiti con l'aggiunta del prefisso appropriato al nome grammo e al simbolo g.

Esempi mg, non μkg ; Mg, non kkg

La Commissione Elettrotecnica Internazionale (CEI) ha standardizzato i seguenti prefissi per i multipli binari, principalmente usati nelle tecnologie dell'informazione, da considerarsi distinti rispetto ai prefissi SI per i multipli decimali [7].

<i>Multiplo</i>	<i>Prefisso</i>		<i>Origine</i>
	<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	
$(2^{10})^1 = (1024)^1$	kibi	Ki	kilobinario
$(2^{10})^2 = (1024)^2$	mebi	Mi	megabinario
$(2^{10})^3 = (1024)^3$	gibi	Gi	gigabinario
$(2^{10})^4 = (1024)^4$	tebi	Ti	terabinario
$(2^{10})^5 = (1024)^5$	pebi	Pi	petabinario
$(2^{10})^6 = (1024)^6$	exbi	Ei	exabinario
$(2^{10})^7 = (1024)^7$	zebi	Zi	zettabinario
$(2^{10})^8 = (1024)^8$	yobi	Yi	yottabinario

3.7 UNITÀ NON SI IL CUI USO È ACCETTATO NEL SI

Le seguenti unità di misura non fanno parte del SI, ma si accetta che continuino ad essere usate nei contesti appropriati (CGPM [3]). I prefissi SI possono essere usati con alcune di queste unità, ad esempio millilitro, mL; megaelettronvolt, MeV; kilotonnellata, kt. Una lista più completa di unità non SI coi fattori di conversione alle corrispondenti unità SI è data al Capitolo 7, p. 129.

<i>Grandezza fisica</i>	<i>Unità in cui uso è accettato dal SI</i>			<i>Note</i>
	<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Valore in unità SI</i>	
tempo	minuto	min	= 60 s	
tempo	ora	h	= 3600 s	
tempo	giorno	d	= 86 400 s	
angolo piano	grado	°	= ($\pi/180$) rad	
angolo piano	minuto	'	= ($\pi/10\,800$) rad	
angolo piano	secondo	"	= ($\pi/648\,000$) rad	
volume	litro	l, L	= 1 dm ³ = 10 ⁻³ m ³	1
massa	tonnellata	t	= 1 Mg = 10 ³ kg	
livello di intensità di campo, di potenza	neper	Np	= ln e = (1/2) ln e ² = 1	2
livello di intensità di campo, di potenza	bel	B		2
energia	elettronvolt	eV (= e · 1 V)	= 1.602 176 487(40) × 10 ⁻¹⁹ J	3
massa	dalton,	Da	= 1.660 538 782(83) × 10 ⁻²⁷ kg	3, 4
	unità di massa atomica unificata	u (= $m_a(^{12}\text{C})/12$)	= 1 Da	
lunghezza	miglio nautico	M	= 1852 m	5
	unità astronomica	ua	= 1.495 978 706 91(6) × 10 ¹¹ m	6

(1) Il simbolo alternativo L è la sola eccezione alla regola generale che i simboli delle unità sono scritti in caratteri minuscoli a meno che siano derivati da un nome di persona. L'uso di L è accettato per evitare confusione tra la lettera l ed il numero 1. Tuttavia, ISO e IEC accettano solo il simbolo minuscolo.

(2) Per informazioni sulle grandezze logaritmiche di rapporto e le loro unità di misura si veda [131].

(3) I valori di queste unità in termini delle corrispondenti unità SI non sono esatti, in quanto dipendono dai valori delle costanti fisiche e (per l'elettronvolt) ed $m_a(^{12}\text{C})$ o N_A (per l'unità atomica unificata di massa) che sono determinate sperimentalmente, si veda il Capitolo 5, p. 111.

(4) Il dalton, simbolo Da, e la unità atomica unificata di massa, simbolo u, sono nomi alternativi per la stessa unità di misura. Il dalton può essere usato coi prefissi SI per esprimere masse di entità più grandi o più piccole.

(5) Non c'è un simbolo universalmente riconosciuto per il miglio nautico. La brochure SI del BIPM usa il simbolo M.

(6) L'unità astronomica è approssimativamente la lunghezza corrispondente alla distanza media Terra-Sole. Il suo valore è tale che, quando è usata per descrivere il moto di corpi nel sistema solare, il valore della costante gravitazionale eliocentrica è $(0.017\,202\,098\,95)^2 \text{ ua}^3 \text{ d}^{-2}$ (si veda anche [3]).

3.8 UNITÀ COERENTI E LA VERIFICA DELLE DIMENSIONI

Se le equazioni tra valori numerici hanno la stessa forma delle equazioni tra grandezze fisiche il sistema di unità definito mediante le unità base non richiede fattori numerici tra le unità; esso è allora detto *sistema coerente*. Per esempio, l'energia cinetica T di una particella di massa m che si muova con velocità v è definita dall'equazione

$$T = (1/2) mv^2$$

ma l'unità SI di energia cinetica è il joule, definito dall'equazione

$$J = \text{kg (m/s)}^2 = \text{kg m}^2 \text{ s}^{-2}$$

dove si noti la mancanza del fattore $(1/2)$. Infatti, il joule, simbolo J, è semplicemente un nome speciale ed il simbolo per il prodotto di unità $\text{kg m}^2 \text{ s}^{-2}$.

Il Sistema Internazionale (SI) è un sistema di unità coerenti. Il vantaggio di un sistema di unità coerenti è che, se il valore di ciascuna grandezza è sostituito al simbolo della grandezza in ogni equazione tra grandezze, le unità di misura possono essere omesse senza che muti l'equazione tra i valori numerici (inclusi tutti i fattori numerici) dell'equazione originale tra grandezze. Il controllo che le unità di cancellino in questo modo è talora chiamato controllo delle dimensioni dell'equazione.

L'uso di un sistema di unità coerenti non è indispensabile. Ad esempio, l'uso di prefissi per i multipli e sottomultipli fa venir meno la coerenza del SI, ma è spesso conveniente.

3.9 COSTANTI FISICHE FONDAMENTALI COME UNITÀ DI MISURA

Talora costanti fisiche fondamentali od altre ben definite grandezze fisiche vengono usate come se fossero delle unità di misura in certi campi specializzati della scienza. Per esempio, in astronomia può essere più conveniente esprimere la massa di una stella in termini della massa del sole e di esprimere il periodo dei pianeti nelle loro orbite in termini del periodo della terra nella sua orbita, invece che nell'unità SI. Analogamente, in fisica atomica e molecolare può essere più conveniente esprimere le masse in termini della massa dell'elettrone, m_e , o in termini dell'unità di massa atomica unificata, $1 u = m_u = m(^{12}\text{C}/12)$, e di esprimere le cariche in termini della carica elementare e , invece che nelle unità SI. Una ragione per usare le grandezze fisiche come se fossero delle unità di misura è che la natura delle misure sperimentali o dei calcoli nel campo specialistico possono essere già espressi naturalmente in tali termini; essi possono poi essere convertiti in unità SI successivamente. Quando le grandezze fisiche sono usate come unità di misura le loro relazioni con il SI sono determinate sperimentalmente, perciò sono soggette ad incertezza, ed i fattori di conversione possono cambiare allorché esperimenti più precisi vengano effettuati. Un'altra ragione per usare tali unità è che l'incertezza dei fattori di conversione al SI possono essere maggiori dell'incertezza dei risultati sperimentali espressi in termini di costanti fisiche usate come unità. Entrambe le ragioni possono rendere preferibile presentare i risultati sperimentali senza conversione alle unità SI.

Sono tre le grandezze fisiche che sono state riconosciute dal CIPM come unità di misura: l'elettronvolt (eV), il dalton (Da) o l'unità di massa atomica unificata (u) e l'unità astronomica (ua) sottoindicate [3]. L'elettronvolt è il prodotto di una costante fondamentale (la carica elementare, e) e dell'unità SI di differenza di potenziale (il volt, V). Il dalton è definito tramite la massa del nuclide carbonio 12 ed è quindi una costante fondamentale. L'unità astronomica è una costante arbitrariamente scelta dagli astronomi. Ci sono molte altre grandezze fisiche o costanti fondamentali che sono talora usate in questo modo, come unità di misura: fornire di esse un elenco esaustivo è difficile.

<i>Grandezza fisica</i>	<i>Nome unità atomica</i>	<i>Simbolo per l'unità</i>	<i>Valore in unità SI</i>	<i>Note</i>
energia	elettronvolt	eV	$1 \text{ eV} = 1.602\ 176\ 487(40) \times 10^{-19} \text{ J}$	1
massa	dalton, unità di massa atomica unificata	Da, u	$1 \text{ Da} = 1.660\ 538\ 782(83) \times 10^{-27} \text{ kg}$	2
lunghezza	unità astronomica	ua	$1 \text{ ua} = 1.495\ 978\ 706\ 91(6) \times 10^{11} \text{ m}$	3

(1) L'elettronvolt è l'energia cinetica acquistata da un elettrone passando attraverso una barriera di potenziale di 1 V nel vuoto.

(2) Il dalton e l'unità di massa atomica unificata sono nomi alternativi per la stessa unità di misura. Il dalton può essere combinato con prefissi SI per esprimere la massa di grandi molecole in kilodalton (kDa) o megadalton (MDa).

(3) Il valore della unità astronomica in unità SI è definita in modo che, quando è usata per descrivere il moto di corpi nel sistema solare, il valore della costante gravitazionale eliocentrica è $(0.017\ 202\ 098\ 95)^2 \text{ ua}^3 \text{ d}^{-2}$. Il valore è ottenuto solo sperimentalmente e quindi non è noto senza incertezza (si veda anche [3]).

3.9.1 Unità atomiche [22] (vedi anche Sez. 7.3, p. 143)

Un gruppo particolare di costanti fisiche che sono usate come se fosse unità di misura merita una menzione speciale. Esse sono le cosiddette *unità atomiche* che originano dai calcoli delle funzioni d'onda elettroniche per gli atomi e le molecole, cioè dalla chimica quantistica. Le prime cinque unità atomiche nella tavola che segue hanno nomi e simboli speciali. Solo quattro di esse sono indipendenti; tutte le altre possono essere ottenute da queste per moltiplicazione o divisione nel modo usuale e la tabella ne include un certo numero come esempi.

La relazione tra la cinque unità atomiche che hanno un nome può essere espressa da ciascuna delle seguenti equazioni

$$E_h = \hbar^2/m_e a_0^2 = e^2/4\pi\epsilon_0 a_0 = m_e e^4 / (4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2$$

La relazione tra le unità atomiche e le corrispondenti unità SI comporta l'uso dei valori di costanti fisiche fondamentali ed è quindi approssimata. I valori numerici indicati nella tabella sono tratti dalla compilazione CODATA (2006) [23] come riportati nel Cap. 5, p. 111. I risultati numerici dei calcoli in chimica teorica sono frequentemente forniti in unità atomiche, o come valori numerici ottenuti dividendo la *grandezza fisica* per l'*unità atomica*: il lettore può effettuare la riconversione in unità SI usando i valori correnti delle costanti fisiche.

<i>Grandezza fisica</i>	<i>Nome unità atomica</i>	<i>Simbolo per l'unità</i>	<i>Valore in unità SI</i>	<i>Note</i>
massa	massa del elettrone	m_e	$= 9.109\ 382\ 15(45) \times 10^{-31}$ kg	
carica	carica elementare	e	$= 1.602\ 176\ 487(40) \times 10^{-19}$ C	
azione, (momento angolare)	costante di Planck divisa per 2π	\hbar	$= 1.054\ 571\ 628(53) \times 10^{-34}$ J s	1
lunghezza	raggio di Bohr	a_0	$= 5.291\ 772\ 085\ 9(36) \times 10^{-11}$ m	1
energia	energia di Hartree	E_h	$= 4.359\ 743\ 94(22) \times 10^{-18}$ J	1
tempo		\hbar/E_h	$= 2.418\ 884\ 326\ 505(16) \times 10^{-17}$ s	
velocità		$a_0 E_h / \hbar$	$= 2.187\ 691\ 254\ 1(15) \times 10^6$ m s $^{-1}$	2
forza		E_h / a_0	$= 8.238\ 722\ 06(41) \times 10^{-8}$ N	
momento lineare		\hbar / a_0	$= 1.992\ 851\ 565(99) \times 10^{-24}$ N s	
corrente elettrica		$e E_h / \hbar$	$= 6.623\ 617\ 63(17) \times 10^{-3}$ A	
campo elettrico		$E_h / e a_0$	$= 5.142\ 206\ 32(13) \times 10^{11}$ V m $^{-1}$	
momento di dipolo elettrico		$e a_0$	$= 8.478\ 352\ 81(21) \times 10^{-30}$ C m	
momento di quadrupolo elettrico		$e a_0^2$	$= 4.486\ 551\ 07(11) \times 10^{-40}$ C m 2	
polarizzabilità elettrica		$e^2 a_0^2 / E_h$	$= 1.648\ 777\ 253\ 6(34) \times 10^{-41}$ C 2 m 2 J $^{-1}$	
1ma iper-polarizzabilità		$e^3 a_0^3 / E_h^2$	$= 3.206\ 361\ 533(81) \times 10^{-53}$ C 3 m 3 J $^{-2}$	
2da iper-polarizzabilità		$e^4 a_0^4 / E_h^3$	$= 6.235\ 380\ 95(31) \times 10^{-65}$ C 4 m 4 J $^{-3}$	
densità di flusso magnetico		$\hbar / e a_0^2$	$= 2.350\ 517\ 382(59) \times 10^5$ T	
momento di dipolo magnetico		$e \hbar / m_e$	$= 1.854\ 801\ 830(46) \times 10^{-23}$ J T $^{-1}$	3
magnetizzabilità		$e^2 a_0^2 / m_e$	$= 7.891\ 036\ 433(27) \times 10^{-29}$ J T $^{-2}$	

(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) Il valore numerico della velocità della luce, quando è espresso in unità atomiche, è uguale al reciproco della costante di struttura fine α ; $c/(\text{au della velocità}) = c\hbar/a_0 E_h = \alpha^{-1} = 137.035\ 999\ 679(94)$.

(3) L'unità atomica del momento di dipolo magnetico è il doppio del magnetone di Bohr, μ_B .

3.9.2 Le equazioni della chimica quantistica espresse in termini di grandezze ridotte usando le unità atomiche

Di norma si usa scrivere le equazioni della chimica quantistica usando grandezze ridotte. Perciò le energie sono espresse come energie ridotte E^* , le distanze come distanze ridotte r^* , le masse come masse ridotte m^* , le cariche come cariche ridotte Q^* ed i momenti angolari come momenti angolari

ridotti J^* , essendo le grandezze ridotte date dalle equazioni

$$E^* = E/E_h, \quad r^* = r/a_0, \quad m^* = m/m_{ed}, \quad Q^* = Q/e \quad \text{ed} \quad J^* = J/\hbar \quad (1)$$

Ogni quantità ridotta è adimensionata in quanto rapporto della grandezza effettiva e della corrispondente unità atomica. Il vantaggio di esprimere tutte le equazioni in termini di grandezze ridotte è che le equazioni sono semplificate poiché tutte le costanti fisiche scompaiono da esse (sebbene la semplificazione si ottenga a spese della possibilità di un controllo dimensionale, essendo tutte le grandezze ridotte adimensionate). Per esempio, l'equazione di Schrödinger per l'atomo di idrogeno, espressa usando le normali grandezze fisiche, ha la forma

$$-(\hbar^2/2m_e)\nabla_r^2 \psi(r, \theta, \phi) + V(r)\psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi) \quad (2)$$

Qui r, θ, ϕ sono le coordinate dell'elettrone e l'operatore ∇_r riguarda le derivate parziali $\partial/\partial r, \partial/\partial \theta$ e $\partial/\partial \phi$. Invece, in termini di grandezze ridotte la corrispondente equazione è

$$-(1/2)\nabla_{r^*}^2 \psi(r^*, \theta, \phi) + V^*(r^*)\psi(r^*, \theta, \phi) = E^*\psi(r^*, \theta, \phi) \quad (3)$$

dove ∇_{r^*} riguarda le derivate parziali $\partial/\partial r^*, \partial/\partial \theta$ e $\partial/\partial \phi$. Si può verificare che, sostituendo nell'Eq. (2) alle normali grandezze le grandezze ridotte (asteriscate), si ottiene l'Eq. (3).

Nel campo della chimica quantistica si scrivono normalmente tutte le equazioni in termini di grandezze ridotte (asteriscate), in modo che esse diventino adimensionate, e che tutte le costanti fisiche fondamentali quali e, m_e, \hbar, E_h e a_0 scompaiano dalle equazioni. Come osservato prima questa semplificazione comporta l'impossibilità di un controllo dimensionale. Per paragonare i risultati di un calcolo numerico con quelli sperimentali è ovviamente necessario ritrasformare i valori delle grandezze ridotte nei valori delle effettive grandezze usando l'Eq. (1).

Purtroppo è anche usanza omettere l'asterisco, usando quindi lo stesso simbolo per le grandezze ridotte adimensionate e per le grandezze effettive. Ciò rende impossibile scrivere un'equazione come l'Eq. (1). (Questa situazione è analoga a quella che si ha quando si usa lo stesso simbolo per h e \hbar , dove $\hbar = h/2\pi$, il che rende impossibile scrivere la relazione tra h e \hbar). Si può giustificare ciò con il fatto che è noioso l'uso continuo dell'asterisco per ogni grandezza fisica quando si scrivono le equazioni in chimica quantistica, ma è essenziale che i lettori non famigliari con le abitudini in questo campo comprendano cosa viene espresso nelle equazioni. Parimenti importante è capire come i valori delle grandezze "espresse in unità atomiche", cioè i valori delle grandezze ridotte, possono essere riconvertiti ai valori delle grandezze originali in unità SI.

Anche comuni sono affermazioni come "in unità atomiche, e, m_e, \hbar, E_h ed a_0 sono tutti uguali ad 1", che non è un'espressione corretta. L'espressione corretta sarebbe che in unità atomiche la carica elementare è uguale a 1 e , la massa di un elettrone è uguale a 1 m_e , ecc. La differenza tra equazioni come la (3), che non contiene costanti fondamentali, e la (2) che le contiene, riguarda le grandezze, non le unità. Nella (3) tutte le grandezze sono grandezze ridotte adimensionate, definite dalla (1), mentre nella (2) le grandezze sono le normali grandezze fisiche (con le loro dimensioni) quali vengono usate direttamente in altre circostanze.

Infine, molti autori non usano i simboli delle unità atomiche riportati nella tavole precedenti, ma usano invece il simbolo "u.a." o "ua" indistintamente per tutte le unità atomiche. Questa abitudine non deve sussistere perché porta a confusione, come se si usasse il simbolo "SI" per tutte le unità SI, o "CGS" come simbolo per tutte le unità CGS.

Esempi Per la molecola di idrogeno la lunghezza di legame all'equilibrio r_e , e le energie di dissociazione D_e sono date da

$r_e = 2.1 a_0$	<i>non</i>	$r_e = 2.1$	a.u.
$D_e = 0.16 E_h$	<i>non</i>	$D_e = 0.16$	a.u.

3.10 GRANDEZZE ADIMENSIONATE

I valori delle grandezze fisiche adimensionate, anche chiamate “grandezze di dimensione uno”, sono spesso espresse in termini di valori esattamente definiti matematicamente indicati da simboli speciali o abbreviazioni, come nel caso del % (per cento). Questi simboli sono utilizzati come fossero unità di misura.

3.10.1 Frazioni (valori relativi, stime ed efficienze)

Frazioni come l'incertezza relativa, la frazione di quantità di sostanza x , la frazione in massa w e la frazione in volume φ (vedi Sez. 2.10, p. 47 per tutte queste grandezze), sono talora espresse mediante i simboli della tabella che segue.

Nome	Simbolo	Valore	Esempio
per cento	%	10^{-2}	L'abbondanza isotopica del carbonio 13 espressa come una frazione di quantità di sostanza è $x = 1.1\%$.
per mille	‰	10^{-3}	La frazione in massa di acqua in un campione è $w = 2.3\text{‰}$.

Questi multipli dell'unità uno non fanno parte del SI ed ISO raccomanda di non usarli mai. Essi sono anche frequentemente usati come unità per la “concentrazione” senza una chiara indicazione del tipo di frazione implicata, ad esempio di quantità di sostanza, in massa o in volume. Per evitare ambiguità dovrebbero essere usate in un contesto in cui il significato della grandezza sia definito chiaramente. Anche in questo caso, dovrebbe essere preferito l'uso di un'appropriata unità SI di rapporto.

Esempio La frazione in massa $w = 1.5 \times 10^{-6} = 1.5 \text{ mg/kg}$.
La frazione di quantità di sostanza $x = 3.7 \times 10^{-2} = 3.7\%$ o $x = 37 \text{ mmol/mol}$.
La spettroscopia ad assorbimento atomico mostra che la soluzione acquosa contiene una concentrazione in massa di nickel $\rho(\text{Ni}) = 2.6 \text{ mg dm}^{-3}$, che è circa equivalente ad una frazione in massa $w(\text{Ni}) = 2.6 \times 10^{-6}$.

Si noti l'importanza di usare il nome ed il simbolo raccomandato per la grandezza in ciascuno degli esempi. Espressioni come “la concentrazione del nickel è 2.6×10^{-6} ” sono ambigue e devono essere evitate.

L'ultimo esempio illustra l'equivalenza approssimata di $\rho/\text{mg dm}^{-3}$ e $w/10^{-6}$ in una soluzione acquosa, che deriva dal fatto che la densità in massa di una soluzione acquosa diluita è sempre all'incirca pari a 1.0 g cm^{-3} . Soluzioni diluite sono spesso misurate o tarate per una concentrazione in massa nota in mg dm^{-3} , e questa unità è da preferire all'uso del ppm (o altre abbreviazioni simili che possono essere dipendenti dalla lingua) per specificare una frazione in massa.

3.10.2 Usi deprecati

L'aggiunta di indicazioni a % e simili simboli, come ‰ (V/V) (volendo indicare % in volume) dev'essere evitato. Simili indicazioni possono essere aggiunte ai simboli delle grandezze fisiche, mai alle unità.

Esempio Una frazione in massa $w = 0.5\%$, ma *non* 0.5% (m/m).

Il simbolo % non dev'essere usato in combinazione con altre unità. Nei titoli delle tabelle e nelle indicazioni sugli assi dei grafici l'uso del % al denominatore dev'essere evitato. Se si vuole indicare $x(^{13}\text{C}) = 1.1\%$, la notazione $100x$ è da preferire a $x/\%$ nelle tabelle e nei grafici (si veda ad esempio in Sez. 6.3, colonna 5, p. 122).

Anche gli altri simboli riportati nella tabella seguente si trovano nella letteratura, ma il loro uso non è raccomandato. Si noti che i nomi e simboli per 10^{-9} e 10^{-12} in questa tabella sono qui basati sul sistema americano di denominazioni. In altre lingue, un bilione spesso indica 10^{12} ed un trilione 10^{18} . Si noti anche che il simbolo ppt è talora usato per indicare parti per migliaio ma talora parti per trilione. Nel 1948 la parola bilione fu proposta per 10^{12} e trilione per 10^{18} [132]. Sebbene ppm, ppb, ppt e simili siano largamente usati in varie applicazioni di chimica analitica ed ambientale, si suggerisce di abbandonare completamente il loro uso perchè può dar luogo ad ambiguità. Queste unità non sono necessarie e possono facilmente essere rimpiazzate da grandezze compatibili con il SI, come pmol/mol (picomole per mole), che non sono ambigue. L'ultima colonna contiene le sostituzioni suggerite (altre simili sostituzioni possono essere formulate, come mg/g, μ g/g, pg/g ecc.).

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Valore</i>	<i>Esempi</i>	<i>Sostituire con</i>
parti per cento	pph, %	10^{-2}	Il grado di dissociazione è 1.5 %.	
parti per mille, permille ¹	ppt, ‰	10^{-3}	Un valore approssimato del valore preindustriale del contenuto di CO ₂ nella atmosfera terrestre è 0.275‰ (0.275 ppt). L'elemento Ti ha una frazione in massa di 5.65 ‰ (5.65×10^3 ppm) sulla crosta terrestre.	mmol/mol mg/g
parti per milione	ppm	10^{-6}	La frazione in volume dell'elio è 20 ppm.	μ mol/mol
parti per cento milioni	pphm	10^{-8}	La frazione in massa dell'impurezza nel metallo è minore di 5 pphm.	
parti per miliardo	ppb	10^{-9}	Lo standard di qualità dell'aria corrisponde ad una frazione in volume di $\varphi = 120$ ppb.	nmol/mol
parti per trilione	ppt	10^{-12}	La frazione di fondo naturale in volume di NO nell'aria è di $\varphi = 140$ ppt.	pmol/mol
parti per quadrilione	ppq	10^{-15}		fmol/mol

¹ Il permille è anche indicato come per mille, promille o pro mille.

3.10.3 Unità per grandezze logaritmiche: neper, bel e decibel

In alcuni campi, specialmente in acustica e nelle telecomunicazioni, vengono dati nomi speciali al numero 1 quando esprime grandezze fisiche definite in termini del logaritmo di un rapporto [131]. Per un'oscillazione lineare smorzata, l'ampiezza della grandezza in funzione del tempo tempo è data da

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

Da questa relazione è chiaro che l'unità coerente SI per il coefficiente di decadimento δ e la frequenza angolare ω è il secondo elevato alla potenza meno uno, s^{-1} . Tuttavia, i nomi speciali neper, Np e radiante, rad (vedi Sez. 2.1, p. 13, Sez. 3.4, p. 89 e Sez. 3.7, p. 92) sono usati per le unità dei prodotti adimensionati, rispettivamente δt e ωt . Perciò le grandezze δ e ω possono essere espresse, rispettivamente, nelle unità Np/s e rad/s. Usati in questo modo, il neper, Np, ed il radiante, rad, possono essere entrambi considerati dei nomi speciali per il numero 1.

Nei campi dell'acustica e della trasmissione dei segnali, i livelli di potenza del segnale ed i livelli di ampiezza del segnale (o livello di campo) sono normalmente espressi come il logaritmo in base 10 o come il logaritmo neperiano del rapporto della potenza P e di una potenza di riferimento P_0 , o del campo F ed un campo di riferimento F_0 . Poiché la potenza è in genere proporzionale al quadrato del campo o dell'ampiezza (quando il campo agisce su impedenze uguali in un sistema lineare) è

conveniente in questo caso definire nello stesso modo il livello di potenza ed il livello di campo. Ciò è ottenuto definendo il livello di campo ed il livello di potenza nel modo seguente

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

cosicché, se $(P/P_0) = (F/F_0)^2$ allora $L_P = L_F$. Queste equazioni possono essere anche scritte come

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

Il bel, B, ma più frequentemente il sottomultiplo decibel, dB, sono usati quando i livelli di campo e di potenza sono calcolati usando logaritmi in base 10 mediante le relazioni

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

e

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

Le relazioni tra il bel ed il neper derivano dal confronto di queste equazioni con quelle precedenti. Si ottiene

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

da cui

$$1 \text{ B} = 10 \text{ dB} = (1/2) \ln(10) \text{ Np} \approx 1.151 \text{ 293 Np}$$

In pratica, il bel non è quasi mai usato. Si usa solo il decibel per rappresentare il logaritmo in base 10, specialmente in acustica, e nel contrassegnare i controlli degli amplificatori di potenza. Perciò l'espressione $L_P = n \text{ dB}$ implica che $10 \lg(P/P_0) = n$.

L'uso generale di unità speciali per le grandezze logaritmiche è discussa in [131]. La grandezza livello di potenza e le unità bel, decibel e neper sono riportate nella tabella e nelle note che seguono.

<i>Nome</i>	<i>Grandezza</i>	<i>Valore numerico moltiplicato per l'unità</i>	<i>Note</i>
livello di campo	$L_F = \ln(F/F_0)$	$= \ln(F/F_0) \text{ Np} = 2 \lg(F/F_0) \text{ B} = 20 \lg(F/F_0) \text{ dB}$	1–3
livello di potenza	$L_P = (1/2) \ln(P/P_0)$	$= (1/2) \ln(P/P_0) \text{ Np} = \lg(P/P_0) \text{ B} = 10 \lg(P/P_0) \text{ dB}$	4–6

(1) F_0 è la grandezza di riferimento, che deve essere specificata.

(2) Nel contesto dell'acustica il livello di campo è chiamato livello di pressione sonora ed è indicato col simbolo L_p e $p_0 = 20 \mu\text{Pa}$.

(3) Per esempio, quando $L_F = 1 \text{ Np}$, $F/F_0 \approx 2.718 \text{ 281 8}$.

(4) P_0 è la potenza di riferimento, che deve essere specificata. Il fattore $1/2$ è incluso nella definizione per ottenere $L_P \hat{=} L_F$.

(5) Nel contesto dell'acustica il livello di potenza è chiamato livello di potenza sonora ed è indicato col simbolo L_W e la potenza di riferimento è $P_0 = 1 \text{ pW}$.

(6) Per esempio, quando $L_P = 1 \text{ B} = 10 \text{ dB}$, $P/P_0 = 10$; quando $L_P = 2 \text{ B} = 20 \text{ dB}$, $P/P_0 = 100$; ecc.

4 SIMBOLI MATEMATICI RACCOMANDATI

4.1 LA SCRITTURA DI NUMERI E SIMBOLI MATEMATICI [5.a]

1. I numeri devono essere generalmente scritti in caratteri normali. Il segno decimale tra le cifre di un numero può essere un punto (ad esempio 2.3) o una virgola (ad esempio 2,3). Quando il segno è posto prima della prima cifra significativa, uno zero deve sempre precederlo. Per facilitare la lettura di numeri con molte cifre, queste possono essere separate in gruppi di tre rispetto al segno decimale mediante uno spazio, mai da un punto, una virgola o qualunque altro segno. Però, quando ci sono solo quattro cifre prima o dopo il segno decimale, si raccomanda di non usare nemmeno lo spazio.

Esempi 2573.421 736 o 2573,421 736 o 0.257 342 173 6×10⁴ o
0,257 342 173 6×10⁴
32 573.4215 o 32 573,4215

2. I valori numerici di grandezze fisiche determinati sperimentalmente sono soggetti ad incertezza. L'incertezza sperimentale deve essere sempre specificata. Il suo valore può essere rappresentato come segue

Esempi $l = [5.3478 - 0.0064, 5.3478 + 0.0064] \text{ cm}$
 $l = 5.3478(32) \text{ cm}$

Nel primo esempio l'intervallo di incertezza è indicato esplicitamente come $[a - b, a + b]$. Si raccomanda di usare questa notazione soltanto per indicare che si suppone che il valore vero sia incluso nell'intervallo $[a - b, a + b]$ con un elevato livello di confidenza, tale che, ad esempio, $b \geq 2\sigma$, dove σ indica lo scarto tipo (si veda il Cap. 8, p. 151).

Nel secondo esempio, $a(c)$, il semi-intervallo di incertezza c (UNI ISO 3534-1:2000) indicato tra parentesi si suppone applicato alle cifre meno significative del valore a . Si raccomanda di usare questa notazione per indicare che c (b nell'esempio precedente) rappresenta un'incertezza di 1σ delle cifre finali di a .

3. I simboli letterali di costanti matematiche (ad esempio e , π , $i = \sqrt{-1}$) devono essere scritti in caratteri normali, ma simboli letterali per numeri che non siano nessuna di tali costanti (ad esempio i numeri quantici) devono essere scritti in corsivo, analogamente ai simboli delle grandezze fisiche.
4. I simboli per funzioni matematiche ed operatori specifici (ad esempio \ln , \lg , \exp , \sin , \cos , d , δ , Δ , ∇ , ...) devono essere scritti in caratteri normali, ma i simboli di funzioni generiche (ad esempio $f(x)$, $F(x, y)$, ...) devono essere scritti in corsivo.
5. L'operatore p (come in $p a_{H^+}$, $pK = -\lg K$ etc., vedi Sez. 2.13.1 (viii), p. 75) dev'essere scritto in carattere normale.
6. I simboli delle specie di simmetria in teoria dei gruppi (come S , P , D , ..., s , p , d , ..., Σ , Π , Δ , ..., A_{1g} , B_2'' , ...) devono essere scritti in caratteri normali quando essi rappresentano il simbolo di stato per un atomo o molecola, ma sono spesso scritti in corsivo quando essi rappresentano le specie di simmetria per un gruppo puntuale.

7. I simboli di vettori e matrici devono essere scritti in corsivo grassetto.

Esempi forza \mathbf{F} , campo elettrico \mathbf{E} , vettore di posizione \mathbf{r}

Il simbolo solo corsivo dev'essere usato per indicare il modulo del vettore corrispondente.

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

Le grandezze tensoriali sono scritte in corsivo grassetto con carattere bastoncino (sans-serif).

Esempi \mathbf{S}, \mathbf{T}

I vettori possono anche essere indicati con una freccia verso destra sul corrispondente carattere scritto in corsivo, \vec{A}, \vec{a} ed i tensori di secondo ordine con una doppia freccia verso destra su un carattere in corsivo, $\vec{\vec{S}}, \vec{\vec{T}}$.

4.2 SIMBOLI, OPERATORI E FUNZIONI [5.k]

Descrizione	Simbolo	Note
segni e simboli		
uguale a	=	
non uguale a	\neq	
identicamente uguale a	\equiv	
uguale per definizione a	$\stackrel{\text{def}}{=} , :=$	
approssimativamente uguale a	\approx	
asintoticamente uguale a	\simeq	
corrispondente a	\cong	
proporzionale a	\sim , \propto	
tende a	\rightarrow	
infinito	∞	
minore di	$<$	
maggiore di	$>$	
minore o uguale a	\leq	
maggiore o uguale a	\geq	
molto minore di	\ll	
molto maggiore di	\gg	
operazioni		
più	+	
meno	-	
più o meno	\pm	
meno o più	\mp	
a moltiplicato per b	$a b, ab, a \cdot b, a \times b$	1
a diviso per b	$a/b, ab^{-1}, \frac{a}{b}$	2
valore assoluto di a	$ a $	
a elevato a n	a^n	
radice quadrata di a e di $a^2 + b^2$	$\sqrt{a}, a^{1/2}$ e $\sqrt{a^2 + b^2}, (a^2 + b^2)^{1/2}$	
radice n ma di a	$a^{1/n}, \sqrt[n]{a}$	
valore medio di a	$\langle a \rangle, \bar{a}$	
segno di a (uguale a $a/ a $ se $a \neq 0$, o se $a = 0$)	$\text{sgn } a$	
n fattoriale	$n!$	
coefficiente binomiale, $n!/p!(n-p)!$	$C_p^n, \binom{n}{p}$	
somma di a_i	$\sum a_i, \sum_i a_i, \sum_{i=1}^n a_i$	
prodotto di a_i	$\prod a_i, \prod_i a_i, \prod_{i=1}^n a_i$	
funzioni		
seno di x	$\sin x$	
coseno di x	$\cos x$	
tangente di x	$\tan x$	
cotangente di x	$\cot x$	

(1) Quando la moltiplicazione è indicata con un punto, esso deve essere posto come indicato: $a \cdot b$.

(2) Anche $a : b$ è usato per indicare “diviso per”. Tuttavia, questo simbolo è più spesso usato per indicare rapporti, ad esempio scale di lunghezza su disegni.

<i>Descrizione</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Note</i>
arcoseno di x	$\arcsin x$	3
arcocoseno di x	$\arccos x$	3
arcotangente di x	$\arctan x$	3
arcocotangente di x	$\operatorname{arccot} x$	3
seno iperbolico di x	$\sinh x$	
coseno iperbolico di x	$\cosh x$	
tangente iperbolica di x	$\tanh x$	
cotangente iperbolica di x	$\coth x$	
settore seno iperbolico di x	$\operatorname{settsinh} x$	3
settore coseno iperbolico di x	$\operatorname{settcosh} x$	3
settore tangente iperbolica di x	$\operatorname{setttanh} x$	3
settore cotangente iperbolica di x	$\operatorname{settcoth} x$	3
base dei logaritmi naturali	e	
base esponenziale di x	$\exp x, e^x$	
logaritmo in base a of x	$\log_a x$	4
logaritmo naturale di x	$\ln x, \log_e x$	4
logaritmo in base 10 di x	$\lg x, \log_{10} x$	4
logaritmo in base 2 di x	$\operatorname{lb} x, \log_2 x$	4
massimo intero $\leq x$,		
parte intera di x	$[x]$	
parte intera di divisione	$[n/m]$	
resto dell'intero di divisione	$n/m - [n/m]$	
variazione di x	$\Delta x = x(\text{finale}) - x(\text{iniziale})$	
variazione infinitesima di f	δf	
limite di $f(x)$ quando x tende ad a	$\lim_{x \rightarrow a} f(x)$	
derivata prima di f	$df/dx, f', (d/dx)f$	
derivata seconda di f	$d^2 f/dx^2, f''$	
derivata n ma di f	$d^n f/dx^n, f^{(n)}$	
derivata parziale di f	$\partial f/\partial x, \partial_x f, D_x f$	
differenziale totale di f	df	
differenziale inesatto di f	$\mathring{d}f$	5
derivata prima di x	$\dot{x}, dx/dt$	
rispetto al tempo		
integrale di $f(x)$	$\int f(x) dx, \int dx f(x)$	
delta di Kronecker	$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases}$	
simbolo di Levi-Civita	$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{se } ijk \text{ è una permutazione ciclica di } 123 \\ \epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = 1 \\ -1 & \text{se } ijk \text{ è una permutazione anticiclica di } 123 \\ \epsilon_{132} = \epsilon_{321} = \epsilon_{213} = -1 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$	
funzione delta di Dirac (distribuzione di Dirac)	$\delta(x), \int f(x)\delta(x) dx = f(0)$	

(3) Questi sono gli inversi della funzione di partenza, cioè $\arcsin x$ è l'operatore inverso di $\sin x$.

(4) Per x positivo.

(5) Notazione usata in termodinamica, si veda Sez. 2.11, nota 1, p. 56.

<i>Descrizione</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Note</i>
funzione a gradino unitario, funzione di Heaviside	$\varepsilon(x), H(x), h(x),$ $\varepsilon(x) = 1$ for $x > 0, \quad \varepsilon(x) = 0$ for $x < 0.$	
funzione gamma	$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt$ $\Gamma(n+1) = (n)!$ per interi positivi n	
convoluzione delle funzioni f e g	$f * g = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x-x')g(x') dx'$	
numeri complessi		
radice quadrata di $-1, \sqrt{-1}$	i	
parte reale di $z = a + i b$	$\operatorname{Re} z = a$	
parte immaginaria di $z = a + i b$	$\operatorname{Im} z = b$	
modulo di $z = a + i b,$ valore assoluto di $z = a + i b$	$ z = (a^2 + b^2)^{1/2}$	
argomento di $z = a + i b$	$\arg z; \tan(\arg z) = b/a$	
complesso coniugato di $z = a + i b$	$z^* = a - i b$	
vettori		
vettore \mathbf{a}	\mathbf{a}, \vec{a}	
componente cartesiano di \mathbf{a}	a_x, a_y, a_z	
vettore unitario in un sistema di coordinate cartesiane	$\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ oppure $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$	
prodotto scalare	$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$	
prodotto vettoriale	$\mathbf{a} \times \mathbf{b}, (\mathbf{a} \wedge \mathbf{b})$	
operatore nabla,	$\nabla = \mathbf{e}_x \partial / \partial x + \mathbf{e}_y \partial / \partial y + \mathbf{e}_z \partial / \partial z$	
operatore di Laplace	$\nabla^2, \Delta = \partial^2 / \partial x^2 + \partial^2 / \partial y^2 + \partial^2 / \partial z^2$	
gradiente di un campo scalare V	$\operatorname{grad} V, \nabla V$	
divergenza di un campo vettoriale \mathbf{A}	$\operatorname{div} \mathbf{A}, \nabla \cdot \mathbf{A}$	
rotazione di un campo vettoriale \mathbf{A}	$\operatorname{rot} \mathbf{A}, \nabla \times \mathbf{A}, (\operatorname{curl} \mathbf{A})$	
matrici		
elemento di matrice A_{ij}	A	
prodotto di matrici \mathbf{A} e \mathbf{B}	\mathbf{AB} , dove $(\mathbf{AB})_{ik} = \sum_j A_{ij} B_{jk}$	
matrice unitaria (matrice unità)	\mathbf{E}, \mathbf{I}	
inversa di una matrice quadrata \mathbf{A}	\mathbf{A}^{-1}	
matrice trasposta \mathbf{A}	$\mathbf{A}^T, \tilde{\mathbf{A}}$	
matrice complessa coniugata \mathbf{A}	\mathbf{A}^*	
coniugata trasposta (aggiunta) di \mathbf{A} (coniugata hermitiana di \mathbf{A})	$\mathbf{A}^H, \mathbf{A}^\dagger$, dove $(\mathbf{A}^\dagger)_{ij} = A_{ji}^*$	
traccia di una matrice quadrata \mathbf{A}	$\sum_i A_{ii}, \operatorname{tr} \mathbf{A}$	
determinante di una matrice quadrata \mathbf{A}	$\det \mathbf{A}, \mathbf{A} $	
operatore di insieme e logico		
p e q (segno di congiunzione)	$p \wedge q$	
p o q o entrambi (segno di disgiunzione)	$p \vee q$	
negazione di p , non p	$\neg p$	
p implica q	$p \Rightarrow q$	
p è equivalente a q	$p \Leftrightarrow q$	

<i>Descrizione</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Note</i>
A è contenuto in B	$A \subset B$	
unione di A e B	$A \cup B$	
intersezione di A e B	$A \cap B$	
x appartiene a A	$x \in A$	
x non appartiene a A	$x \notin A$	
l'insieme A contiene x	$A \ni x$	
A ma non B	$A \setminus B$	

5 COSTANTI FISICHE FONDAMENTALI

I dati riportati in questa tabella sono i valori raccomandati nel 2006 da CODATA per le costanti fisiche fondamentali [23] (online in <http://physics.nist.gov/constants>) e da una compilazione 2006 del Particle Data Group [133] (online in <http://pdg.lbl.gov>), si vedano le note per i dettagli. In parentesi è data la deviazione standard standard relativa alle ultime due cifre.

<i>Denominazione</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Valore</i>	<i>Note</i>
costante magnetica	μ_0	$4\pi \times 10^{-7}$ H m ⁻¹ (valore definito)	1
velocità della luce nel vuoto	c_0, c	299 792 458 m s ⁻¹ (valore definito)	
costante elettrica	$\varepsilon_0 = 1/\mu_0 c_0^2$	8.854 187 817... $\times 10^{-12}$ F m ⁻¹	1, 2
impedenza caratteristica del vuoto	$Z_0 = \mu_0 c_0$	376.730 313 461... Ω	2
costante di Planck	h	6.626 068 96(33) $\times 10^{-34}$ J s	
	$\hbar = h/2\pi$	1.054 571 628(53) $\times 10^{-34}$ J s	
	hc_0	1.986 445 501(99) $\times 10^{-25}$ J m	
costante di accoppiamento di Fermi	$G_F/(\hbar c_0)^3$	1.166 37(1) $\times 10^{-5}$ GeV ⁻²	3
angolo di miscelazione debole θ_W	$\sin^2 \theta_W$	0.222 55(56)	4, 5
carica elementare	e	1.602 176 487(40) $\times 10^{-19}$ C	
massa dell'elettrone	m_e	9.109 382 15(45) $\times 10^{-31}$ kg	
massa del protone	m_p	1.672 621 637(83) $\times 10^{-27}$ kg	
massa del neutrone	m_n	1.674 927 211(84) $\times 10^{-27}$ kg	
costante di massa atomica	$m_u = 1$ u	1.660 538 782(83) $\times 10^{-27}$ kg	6
costante di Avogadro	L, N_A	6.022 141 79(30) $\times 10^{23}$ mol ⁻¹	7
costante di Boltzmann	k, k_B	1.380 650 4(24) $\times 10^{-23}$ J K ⁻¹	
costante di Faraday	$F = Le$	9.648 533 99(24) $\times 10^4$ C mol ⁻¹	
costante molare dei gas	R	8.314 472(15) J K ⁻¹ mol ⁻¹	
zero della scala Celsius		273.15 K (valore definito)	
volume molare del gas ideale, $p = 100$ kPa, $t = 0$ °C	V_m	22.710 981(40) dm ³ mol ⁻¹	
volume molare del gas ideale, $p = 101.325$ kPa, $t = 0$ °C		22.413 996(39) dm ³ mol ⁻¹	
atmosfera standard		101 325 Pa (valore definito)	
costante di struttura fine	$\alpha = \mu_0 e^2 c_0 / 2h$	7.297 352 537 6(50) $\times 10^{-3}$	
	α^{-1}	137.035 999 676(94)	
raggio di Bohr	$a_0 = 4\pi\varepsilon_0 \hbar^2 / m_e e^2$	5.291 772 085 9(36) $\times 10^{-11}$ m	
energia di Hartree	$E_h = \hbar^2 / m_e a_0^2$	4.359 743 94(22) $\times 10^{-18}$ J	
costante di Rydberg	$R_\infty = E_h / 2hc_0$	1.097 373 156 852 7(73) $\times 10^7$ m ⁻¹	
magnetone di Bohr	$\mu_B = e\hbar / 2m_e$	9.274 009 15(23) $\times 10^{-24}$ J T ⁻¹	
momento magnetico dell'elettrone	μ_e	-9.284 763 77(23) $\times 10^{-24}$ J T ⁻¹	
fattore g di Landé per l'elettrone libero	$g_e = 2\mu_e / \mu_B$	-2.002 319 304 362 2(15)	
magnetone nucleare	$\mu_N = e\hbar / 2m_p$	5.050 783 24(13) $\times 10^{-27}$ J T ⁻¹	

(1) H m⁻¹ = N A⁻² = N s² C⁻²; F m⁻¹ = C² J⁻¹ m⁻¹.

(2) ε_0 e Z_0 possono essere calcolati esattamente dai valori definiti di μ_0 e c_0 .

(3) Il valore della costante di accoppiamento di Fermi è quello raccomandato dal Particle Data Group [133].

<i>Denominazione</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Valore</i>
momento magnetico del protone	μ_p	$1.410\ 606\ 662(37) \times 10^{-26} \text{ J T}^{-1}$
rapporto giromagnetico del protone	$\gamma_p = 4\pi\mu_p/h$	$2.675\ 222\ 099(70) \times 10^8 \text{ s}^{-1} \text{ T}^{-1}$
momento magnetico del protone schermato (H ₂ O, sfera, 25 °C)	μ_p'/μ_B	$1.520\ 993\ 128(17) \times 10^{-3}$
rapporto giromagnetico del protone schermato (H ₂ O, sfera, 25 °C)	$\gamma_p'/2\pi$	$42.576\ 388\ 1(12) \text{ MHz T}^{-1}$
costante di Stefan-Boltzmann	$\sigma = 2\pi^5 k^4/15h^3 c_0^2$	$5.670\ 400(40) \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$
prima costante di radiazione	$c_1 = 2\pi h c_0^2$	$3.741\ 771\ 18(19) \times 10^{-16} \text{ W m}^2$
seconda costante di radiazione	$c_2 = h c_0/k$	$1.438\ 775\ 2(25) \times 10^{-2} \text{ m K}$
costante gravitazionale di Newton	G	$6.674\ 28(67) \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$
accelerazione di gravità standard	g_n	$9.806\ 65 \text{ m s}^{-2}$ (valore definito)

(4) Con l'angolo di miscelamento debole θ_W , $\sin^2 \theta_W$ è talora chiamato parametro di Weinberg. Esistono schemi differenti nelle masse usate per determinare $\sin^2 \theta_W$ (si veda il Capitolo 10 in [133]). Il valore riportato qui per $\sin^2 \theta_W$ [23] si basa sullo schema on-shell che usa $\sin^2 \theta_W = 1 - (m_W/m_Z)^2$, dove le grandezze m_W and m_Z sono le masse, rispettivamente, dei bosoni W^\pm - e Z^0 .

(5) Il Particle Data Group [133] dà $m_W = 80.403(29) \text{ GeV}/c_0^2$, $m_Z = 91.1876(21) \text{ GeV}/c_0^2$ e raccomanda $\sin^2 \theta_W = 0.231\ 22(15)$, basato sullo schema $\overline{\text{MS}}$. Il valore corrispondente nello schema on-shell è $\sin^2 \theta_W = 0.223\ 06(33)$. Il parametro effettivo dipende anche dall'intervallo di energia o di trasferimento di momento considerato.

(6) u è l'unità di massa atomica unificata (vedi Sez. 3.9, p. 94).

(7) Si veda [134] ed altri articoli sullo stesso numero speciale della rivista *Metrologia* sulla determinazione della costante di Avogadro.

Valori delle costanti matematiche più comuni

<i>Costante matematica</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Valore</i>	<i>Note</i>
rapporto tra circonferenza e diametro del cerchio	π	3.141 592 653 59...	
base dei logaritmi naturali	e	2.718 281 828 46...	
logaritmo naturale di 10	$\ln 10$	2.302 585 092 99...	

Nota: memotecniche in varie lingue (ma non l'italiano) per π sono state qui omesse.

6 PROPRIETÀ DI PARTICELLE, ELEMENTI E NUCLIDI

I simboli per le particelle, gli elementi chimici ed i nuclidi sono stati discussi nella Sezione 2.10.1 (ii), p. 50. Il Particle Data Group [133] raccomanda l'uso di simboli corsivi per le particelle e questo uso è stato adottato da molti fisici (si veda anche Sezione 1.6, p. 7).

6.1 PROPRIETÀ DI SPECIFICHE PARTICELLE

I dati riportati in questa tabella sono tratti dai valori raccomandati nel 2006 da CODATA delle costanti fisiche fondamentali [23] (online in <http://physics.nist.gov/constants>) e dalla compilazione 2006 del Particle Data Group (PDG) [133] (online in <http://pdg.lbl.gov>). Si vedano le note per i dettagli. Tra parentesi è dato lo scarto tipo dell'incertezza delle ultime due cifre.

Nome	Simbolo	Spin I	Numero di carica		Massa		Note
			z		m/u	mc_0^2/MeV	
fotone	γ	1	0		0	0	
neutrino	ν_e	1/2	0		≈ 0	≈ 0	1, 2
elettrone	e^-	1/2	-1		5.485 799 094 3(23) $\times 10^{-4}$	0.510 998 910(13)	3
muone	μ^\pm	1/2	± 1		0.113 428 926 4(30)	105.658 369 2(94)	2
pione	π^\pm	0	± 1		0.149 834 76(37)	139.570 18(35)	2
pione	π^0	0	0		0.144 903 35(64)	134.9766(6)	2
protone	p	1/2	1		1.007 276 466 77(10)	938.272 013(23)	
neutrone	n	1/2	0		1.008 664 915 97(43)	939.565 346(23)	
deuterone	d	1	1		2.013 553 212 724(78)	1875.612 793(47)	
tritone	t	1/2	1		3.015 500 713 4(25)	2808.920 906(70)	4
elione	h	1/2	2		3.014 932 247 3(26)	2808.391 383(70)	4
particella α	α	0	2		4.001 506 179 127(62)	3727.379 109(93)	
bosone Z	Z^0	1	0			91.1876(21) $\times 10^3$	2, 5
bosone W	W^\pm	1	± 1			80.403(29) $\times 10^3$	2, 5

(1) Il neutrino e l'antineutrino forse hanno una piccola massa, $m_{\nu_e} < 2 \text{ eV}/c_0^2$ [133]. In aggiunta al neutrino elettronico ν_e si trova anche un neutrino tau, ν_τ , ed un neutrino muone, ν_μ (e le loro antiparticelle corrispondenti $\bar{\nu}$).

(2) Questi dati provengono dal Particle Data Group [133].

(3) L'elettrone è talora indicato con e o con β^- come una particella β . La sua antiparticella e^+ (positrone, β^+) ha la stessa massa dell'elettrone e^- ma carica di opposto segno e momento magnetico.

(4) Il tritone è la particella ${}^3\text{H}^+$ e l'elione la particella ${}^3\text{He}^{2+}$.

(5) Z^0 e W^\pm sono bosoni di gauge (o bosoni vettori intermedi) [133].

Nome	Simbolo	Momento magnetico		Vita media ¹	Note
		μ/μ_N		τ/s	
fotone	γ		0		
neutrino	ν_e		≈ 0		2, 6
elettrone	e^-		-1.001 159 652 181 11(74)		7, 8
muone	μ^+		8.890 596 98(23)	2.197 03(4) $\times 10^{-6}$	2, 8, 9
pione	π^\pm		0	2.6033(5) $\times 10^{-8}$	2
pione	π^0		0	8.4(6) $\times 10^{-17}$	2
protone	p		2.792 847 356(23)		8, 10
neutrone	n		-1.913 042 73(45)	885.7(8)	8
deuterone	d		0.857 438 230 8(72)		8
tritone	t		2.978 962 448(38)		8, 11
elione	h		-2.127 497 718(25)		8, 12
particella α	α		0		

¹ Il PDG [133] fornisce i valori di vita media (τ), si veda anche la Sez. 2.12, nota 8, p. 64.

(6) Il PDG [133] dà $\mu/\mu_B < 0.9 \times 10^{-10}$.

(7) Il valore del momento magnetico è dato in magnetoni di Bohr μ/μ_B , $\mu_B = e\hbar/2m_e$.

In fisica e chimica nucleare le masse delle particelle sono spesso indicate come energie equivalenti (di norma in megaelettronvolt). L'unità di massa atomica unificata corrisponde a 931.494 028(23) MeV [23].

Coppie formate da particelle positive ed un elettrone, simili ad atomi, sono sufficientemente stabili da essere trattate come entità individuali indicate con nomi speciali.

Esempi positronio (e^+e^- ; Ps) $m(\text{Ps}) = 1.097\,152\,515\,21(46) \times 10^{-3}$ u
muonio (μ^+e^- ; Mu) $m(\text{Mu}) = 0.113\,977\,490\,9(29)$ u

(Note, continua)

(8) Il segno del momento magnetico è definito rispetto alla direzione del momento angolare di spin .

(9) μ^- e μ^+ hanno la stessa massa ma cariche di segno opposto ed opposti momenti magnetici.

(10) Il momento magnetico del protone schermato, μ_p' , è dato da $\mu_p'/\mu_N = 2.792\,775\,598(30)$ (H_2O , sfera, 25 °C).

(11) La semivita, $t_{1/2}$, del tritone è circa 12.3 a (si veda la Sez. 2.12, p. 64) con una vita media corrispondente, τ , di 17.7 a.

(12) Questo è il momento magnetico dell'elione schermato, μ_h' , dato come μ_h'/μ_N (gas, sfera, 25 °C).

6.2 PESI ATOMICI STANDARD DEGLI ELEMENTI (2005)

Come deciso dalla Commissione IUPAC per i Pes Atomici e le Abbondanze Isotopiche (CAWIA) nel 1979 [135] la massa atomica relativa (generalmente chiamata peso atomico [136]) di un elemento, E , può essere definita per ogni campione specifico. Essa è la massa media degli atomi nel campione divisa per l'unità di massa atomica unificata¹ o in alternativa la massa molare dei suoi atomi divisa per la costante di massa molare $M_u = N_A m_u = 1 \text{ g mol}^{-1}$:

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

Le variazioni di composizione isotopica di molti elementi in campioni di differente origine limitano la precisione con cui si può fornire un valore al peso atomico. I pesi atomici standard, rivisti ogni due anni da CAWIA, sono considerati applicabili a materiali normali. Ciò significa che il peso atomico di un elemento in un materiale normale starà, con livello di confidenza elevato, entro l'incertezza indicata per i valori tabulati. Per "normale" si intende qui che il materiale è ragionevolmente una possibile fonte di approvvigionamento in commercio per l'industria e le scienze dell'elemento o dei suoi composti e che non ha subito modifiche significative della sua composizione isotopica in periodi geologicamente brevi [137]. Ciò esclude ovviamente materiali studiati appositamente per la loro composizione isotopica anomala. Nuove linee guida statistiche sono state formulate ed usate per ottenere le incertezze delle abbondanze isotopiche per la composizione isotopica degli elementi 1997 [138].

La tabella 6.2 che segue riporta i pesi atomici 2005 degli elementi [139] ed il simbolo del termine $2S+1L_J$ per lo stato base atomico [140] in ordine di numero atomico. I pesi atomici sono quelli raccomandati dalla Commissione IUPAC per le Abbondanze Isotopiche ed i Pes Atomici (CIAAW) (ex CAWIA) nel 2005 [139] e valgono per gli elementi che esistono naturalmente sulla terra. Una versione elettronica della Tabella CIAAW dei Pes Atomici Standard 2005 si trova sulla pagina web di CIAAW a http://www.ciaaw.org/atomic_weights4.htm. La lista include i nomi approvati per gli elementi 110 and 111 (Ds e Rg) [141, 142]. Il simbolo Rg è stato anche usato per indicare "gas rari". Per una storia dei valori raccomandati dei pesi atomici dal 1882 al 1997, si veda [143].

I pesi atomici di molti elementi dipendono dall'origine e dal trattamento subito dai materiali [138]. Le note alla tabella spiegano i tipi di variazione che possono essere attese per i singoli elementi. Quando usati con la dovuta considerazione per le note, i valori sono considerati affidabili entro lo scarto tipo indicato tra parentesi, che si applica all'ultima cifra. Per elementi senza una composizione isotopica terrestre tipica non viene raccomandato un valore per il peso atomico standard. La massa atomica dell'isotopo più stabile può essere trovata nella successiva Sez. 6.3.

<i>Simbolo</i>	<i>Numero atomico</i>	<i>Nome</i>	<i>Peso atomico (Massa atomica relativa)</i>	<i>Simbolo del termine dello stato base</i>	<i>Note</i>
H	1	idrogeno	1.007 94(7)	$2S_{1/2}$	g, m, r
He	2	elio	4.002 602(2)	$1S_0$	g, r
Li	3	litio	[6.941(2)] [†]	$2S_{1/2}$	g, m, r
Be	4	berillio	9.012 182(3)	$1S_0$	
B	5	boro	10.811(7)	$2P_{1/2}^o$	g, m, r
C	6	carbonio	12.0107(8)	$3P_0$	g, r
N	7	azoto	14.0067(2)	$4S_{3/2}^o$	g, r
O	8	ossigeno	15.9994(3)	$3P_2$	g, r
F	9	fluoro	18.998 403 2(5)	$2P_{3/2}^o$	

¹ Si noti che la costante di massa atomica m_u è uguale al Dalton, Da, o all'unità di massa atomica unificata, u, ed è definita in termini di massa dell'atomo di carbonio 12: $m_u = 1 \text{ u} = 1 \text{ Da} = m_a(^{12}\text{C})/12$.

<i>Simbolo</i>	<i>Numero atomico</i>	<i>Nome</i>	<i>Peso atomico (Massa atomica relativa)</i>	<i>Simbolo del termine di stato base</i>	<i>Note</i>
Ne	10	neo (neon)	20.1797(6)	1S_0	g, m
Na	11	sodio	22.989 769 28(2)	$^2S_{1/2}$	
Mg	12	magnesio	24.3050(6)	1S_0	
Al	13	alluminio	26.981 538 6(8)	$^2P_{1/2}^o$	
Si	14	silicio	28.0855(3)	3P_0	r
P	15	fosforo	30.973 762(2)	$^4S_{3/2}^o$	
S	16	zolfo	32.065(5)	3P_2	g, r
Cl	17	cloro	35.453(2)	$^2P_{3/2}^o$	g, m, r
Ar	18	argo (argon)	39.948(1)	1S_0	g, r
K	19	potassio	39.0983(1)	$^2S_{1/2}$	
Ca	20	calcio	40.078(4)	1S_0	g
Sc	21	scandio	44.955 912(6)	$^2D_{3/2}$	
Ti	22	titanio	47.867(1)	3F_2	
V	23	vanadio	50.9415(1)	$^4F_{3/2}$	
Cr	24	cromo	51.9961(6)	7S_3	
Mn	25	manganese	54.938 045(5)	$^6S_{5/2}$	
Fe	26	ferro	55.845(2)	5D_4	
Co	27	cobalto	58.933 195(5)	$^4F_{9/2}$	
Ni	28	nichel	58.6934(2)	3F_4	
Cu	29	rame	63.546(3)	$^2S_{1/2}$	r
Zn	30	zinco	65.409(4)	1S_0	
Ga	31	gallio	69.723(1)	$^2P_{1/2}^o$	
Ge	32	germanio	72.64(1)	3P_0	
As	33	arsenico	74.921 60(2)	$^4S_{3/2}^o$	
Se	34	selenio	78.96(3)	3P_2	r
Br	35	bromo	79.904(1)	$^2P_{3/2}^o$	
Kr	36	cripto (cripton)	83.798(2)	1S_0	g, m
Rb	37	rubidio	85.4678(3)	$^2S_{1/2}$	g
Sr	38	stronzio	87.62(1)	1S_0	g, r
Y	39	ittrio	88.905 85(2)	$^2D_{3/2}$	
Zr	40	zircornio	91.224(2)	3F_2	g
Nb	41	niobio	92.906 38(2)	$^6D_{1/2}$	
Mo	42	molibdeno	95.94(2)	7S_3	g
Tc	43	tecnezio		$^6S_{5/2}$	A
Ru	44	rutenio	101.07(2)	5F_5	g
Rh	45	rodio	102.905 50(2)	$^4F_{9/2}$	
Pd	46	palladio	106.42(1)	1S_0	g
Ag	47	argento	107.8682(2)	$^2S_{1/2}$	g
Cd	48	cadmio	112.411(8)	1S_0	g
In	49	indio	114.818(3)	$^2P_{1/2}^o$	
Sn	50	stagno	118.710(7)	3P_0	g
Sb	51	antimonio	121.760(1)	$^4S_{3/2}^o$	g
Te	52	tellurio	127.60(3)	3P_2	g
I	53	iodio	126.904 47(3)	$^2P_{3/2}^o$	
Xe	54	xeno (xenon)	131.293(6)	1S_0	g, m
Cs	55	cesio	132.905 451 9(2)	$^2S_{1/2}$	

<i>Simbolo atomico</i>	<i>Numero</i> <i>Nome</i>	<i>Peso Atomico</i> <i>(Massa atomica relativa)</i>	<i>Simbolo del termine</i> <i>dello stato base</i>	<i>Note</i>
Ba	56 bario	137.327(7)	1S_0	
La	57 lantanio	138.905 47(7)	$^2D_{3/2}$	g
Ce	58 cerio	140.116(1)	$^1G_4^o$	g
Pr	59 praseodimio	140.907 65(2)	$^4I_{9/2}^o$	
Nd	60 neodimio	144.242(3)	5I_4	g
Pm	61 promezio		$^6H_{5/2}^o$	A
Sm	62 samario	150.36(2)	7F_0	g
Eu	63 europio	151.964(1)	$^8S_{7/2}^o$	g
Gd	64 gadolinio	157.25(3)	$^9D_2^o$	g
Tb	65 terbio	158.925 35(2)	$^6H_{15/2}^o$	
Dy	66 disprosio	162.500(1)	5I_8	g
Ho	67 olmio	164.930 32(2)	$^4I_{15/2}^o$	
Er	68 erbio	167.259(3)	3H_6	g
Tm	69 tullio	168.934 21(2)	$^2F_{7/2}^o$	
Yb	70 itterbio	173.04(3)	1S_0	g
Lu	71 lutezio	174.967(1)	$^2D_{3/2}$	g
Hf	72 afnio	178.49(2)	3F_2	
Ta	73 tantalio	180.947 88(2)	$^4F_{3/2}$	
W	74 tungsteno	183.84(1)	5D_0	
Re	75 renio	186.207(1)	$^6S_{5/2}$	
Os	76 osmio	190.23(3)	5D_4	g
Ir	77 iridio	192.217(3)	$^4F_{9/2}$	
Pt	78 platino	195.084(9)	3D_3	
Au	79 oro	196.966 569(4)	$^2S_{1/2}$	
Hg	80 mercurio	200.59(2)	1S_0	
Tl	81 tallio	204.3833(2)	$^2P_{1/2}^o$	
Pb	82 piombo	207.2(1)	3P_0	g, r
Bi	83 bismuto	208.980 40(1)	$^4S_{3/2}^o$	
Po	84 polonio		3P_2	A
At	85 astato		$^2P_{3/2}^o$	A
Rn	86 rado (radon)		1S_0	A
Fr	87 francio		$^2S_{1/2}$	A
Ra	88 radio		1S_0	A
Ac	89 attinio		$^2D_{3/2}$	A
Th	90 torio	232.038 06(2)	3F_2	g, Z
Pa	91 protoattinio	231.035 88(2)	$^4K_{11/2}$	Z
U	92 uranio	238.028 91(3)	5L_6	g, m, Z
Np	93 nettunio		$^6L_{11/2}$	A
Pu	94 plutonio		7F_0	A
Am	95 americio		$^8S_{7/2}^o$	A
Cm	96 curio		$^9D_2^o$	A
Bk	97 berkelio		$^6H_{15/2}^o$	A
Cf	98 californio		5I_8	A
Es	99 einsteinio		$^4I_{15/2}^o$	A

<i>Simbolo</i>	<i>Numero numero</i>	<i>Nome</i>	<i>Peso atomico (Massa atomica relativa)</i>	<i>Simbolo di termine dello stato base</i>	<i>Note</i>
Fm	100	fermio		${}^3\text{H}_6$	A
Md	101	mendelevio		${}^2\text{F}_{7/2}^o$	A
No	102	nobelio		${}^1\text{S}_0$	A
Lr	103	lawrenzio			A
Rf	104	rutherfordio			A
Db	105	dubnio			A
Sg	106	seaborgio			A
Bh	107	bohrio			A
Hs	108	hassio			A
Mt	109	meitnerio			A
Ds	110	darmstadtio			A
Rg	111	roentgenio			A

† Il litio di origine commerciale ha pesi atomici compresi tra 6.939 e 6.996; quando è necessario un valore più preciso, esso deve essere determinato per il materiale specifico.

(g) Sono noti campioni geologici la cui composizione isotopica è al di fuori dei limiti per il materiale normale. La differenza tra il peso atomico dell'elemento in tali campioni e quello dato nella tabella può essere superiore all'incertezza ivi riportata.

(m) Composizioni isotopiche modificate possono essere trovate in materiali commerciali perchè essi sono stati assoggettati non di proposito a frazionamento isotopico. Ne derivano possibili sostanziali deviazioni di peso atomico dell'elemento rispetto a quello dato in tabella.

(r) L'ampiezza dell'intervallo di variazione osservato in materiale normale di origine terrestre impedisce di fornire un valore più preciso di $A_r(\text{E})$; il valore tabulato di $A_r(\text{E})$ e la sua incertezza dovrebbero valere per materiale normale.

(A) Elemento radioattivo senza un nuclide stabile, che manca di una composizione isotopica terrestre tipica. All'interno della copertina posteriore della Tabella Periodica IUPAC degli Elementi, il valore tra parentesi indica il numero di massa dell'isotopo a vita più lunga dell'elemento (si veda anche la tabella delle masse dei nuclidi, Sez. 6.3).

(Z) Elemento senza nuclide stabile, che mostra una variazione della composizione terrestre tipica dei nuclidi a vita lunga che consente di fornire un valore significativo di peso atomico.

6.3 PROPRIETÀ DEI NUCLIDI

La tavola contiene le seguenti proprietà di nuclidi naturali e di alcuni nuclidi instabili:

Colonna

- 1 Z è il numero atomico (numero di protoni) del nuclide.
- 2 Simbolo dell'elemento.
- 3 A è il numero di massa del nuclide. L'asterisco * indica un nuclide instabile (per elementi senza isotopi naturali, è il nuclide più stabile) ed il segno # un nuclide di vita sufficientemente lunga (maggiore di 10^5 anni) [144] da consentire la determinazione dell'abbondanza isotopica.
- 4 La massa atomica è data in unità di massa atomica unificata, $1 \text{ u} = m_{\text{a}}(^{12}\text{C})/12$, unitamente alla deviazione standard tra parentesi, da applicarsi all'ultima cifra. I dati sono estratti da una raccolta più estesa della valutazione AME2003 delle masse atomiche [145, 146].
- 5 Le composizioni isotopiche tipiche sono date come frazioni di quantità di sostanza (frazioni di mole), x , dei corrispondenti atomi in percento. Secondo l'opinione di CAWIA (ora CIAAWA), essi rappresentano la composizione isotopica di composti chimici o di materiali comunemente usati nei laboratori. Essi possono quindi non corrispondere al materiale naturalmente più abbondante [138]. Va sottolineato che questi valori servono solo per determinare le proprietà medie dei composti chimici o dei materiali di origine naturale terrestre non specificata, ma potrebbero non corrispondere a nessun campione effettivamente disponibile con quell'esatta composizione. I valori qui indicati sono quelli della compilazione 2001 CAWIA, come indicati nella colonna 9 di [147] come composizioni isotopiche tipiche. Questa referenza usa la *Valutazione delle Masse Atomiche 1993* [148, 149]. C'è un'incoerenza in questa tabella, perché la colonna 4 usa invece i valori più recenti AME2003 [145, 146] delle masse atomiche, mentre la colonna 5 è basata sui valori precedenti delle masse atomiche [148, 149]. Quando si devono effettuare dei calcoli precisi, ad esempio per definire proprietà individuali, si dovrebbero usare campioni dei quali si conoscono valori più precisi delle abbondanze isotopiche (come quelle indicate in colonna 8 di [147]) o che esse siano state determinate con sufficiente precisione mediante misure specifiche. Le incertezze date in parentesi si applicano alle ultime cifre ed indicano il semiintervallo delle probabili variazioni dovute ai materiali ed agli errori sperimentali. Per dati addizionali ed informazione di base sugli intervalli di variabilità dell'abbondanza isotopica in materiali naturali ed antropogenici, si veda [149, 150].
- 6 I è il numero quantico di spin nucleare. Un segno più indica parità positiva ed un segno meno parità negativa. Le parentesi indicano valori incerti; tutti i valori sono stati tratti dalla valutazione NUBASE [144].
- 7 Sotto momento magnetico si fornisce il massimo valore atteso della componente z del momento di dipolo magnetico, m , in magnetoni nucleari. Il segno positivo o negativo implica che l'orientazione del dipolo magnetico rispetto al momento angolare corrisponde alla rotazione rispettivamente di una carica positiva o negativa. I dati sono stati estratti dalla compilazione di N. J. Stone [151]. Un asterisco * indica che nella compilazione originale sono forniti più valori; ** indica che esiste un valore più vecchio con una precisione dichiarata migliore. L'assenza di un più o un meno indica che il segno non è stato determinato dallo sperimentatore.
- 8 Sotto momento di quadrupolo, si fornisce l'area del momento di quadrupolo elettrico (vedi Sez. 2.5, note 14 e 15 a p. 23 e 24) in unità femtometri al quadrato, $1 \text{ fm}^2 = 10^{-30} \text{ m}^2$, sebbene le tavole li riportino in genere in barn (b), $1 \text{ b} = 10^{-28} \text{ m}^2 = 100 \text{ fm}^2$. Il segno positivo implica un nucleo prolato, un segno negativo un nucleo oblatto. I dati sono tratti da N. J. Stone [151]. Un asterisco * indica che la compilazione originale fornisce più di un valore; ** indica che esiste un dato più vecchio con precisione dichiarata migliore. L'assenza di un più o di un meno indica che esso non è stato determinato dallo sperimentatore.

<i>Z</i>	<i>Simbolo</i>	<i>A</i>	<i>Massa atomica,</i> <i>m_a/u</i>	<i>Composizione</i> <i>isotopica,</i> <i>100 x</i>	<i>Spin</i> <i>nucleare,</i> <i>I</i>	<i>Momento</i> <i>magnetico,</i> <i>m/μ_N</i>	<i>Momento</i> <i>quadrupolare,</i> <i>Q/fm²</i>	
1	H	1	1.007 825 032 07(10)	99.9885(70)	1/2+	+2.792 847 34(3)	+0.286(2)*	
		(D)	2	2.014 101 777 8(4)	0.0115(70)	1+		+0.857 438 228(9)
		(T)	3*	3.016 049 277 7(25)		1/2+		+2.978 962 44(4)
2	He	3	3.016 029 319 1(26)	0.000 134(3)	1/2+	-2.127 497 72(3)		
		4	4.002 603 254 15(6)	99.999 866(3)	0+	0		
3	Li	6	6.015 122 795(16)	7.59(4)	1+	+0.822 047 3(6)*	-0.082(2)*	
		7	7.016 004 55(8)	92.41(4)	3/2-	+3.256 427(2)*	-4.06(8)*	
4	Be	9	9.012 182 2(4)	100	3/2-	-1.177 432(3)*	+5.29(4)*	
5	B	10	10.012 937 0(4)	19.9(7)	3+	+1.800 644 78(6)	+8.47(6)	
		11	11.009 305 4(4)	80.1(7)	3/2-	+2.688 648 9(10)	+4.07(3)	
6	C	12	12 (by definition)	98.93(8)	0+	0		
		13	13.003 354 837 8(10)	1.07(8)	1/2-	+0.702 411 8(14)		
		14*	14.003 241 989(4)		0+	0		
7	N	14	14.003 074 004 8(6)	99.636(20)	1+	+0.403 761 00(6)	+2.001(10)*	
		15	15.000 108 898 2(7)	0.364(20)	1/2-	-0.283 188 84(5)		
8	O	16	15.994 914 619 56(16)	99.757(16)	0+	0	-2.578*	
		17	16.999 131 70(12)	0.038(1)	5/2+	-1.893 79(9)		
		18	17.999 161 0(7)	0.205(14)	0+	0		
9	F	19	18.998 403 22(7)	100	1/2+	+2.628 868(8)		
10	Ne	20	19.992 440 175 4(19)	90.48(3)	0+	0	+10.3(8)	
		21	20.993 846 68(4)	0.27(1)	3/2+	-0.661 797(5)		
		22	21.991 385 114(19)	9.25(3)	0+	0		
11	Na	23	22.989 769 280 9(29)	100	3/2+	+2.217 655 6(6)*	+10.45(10)*	
12	Mg	24	23.985 041 700(14)	78.99(4)	0+	0	+19.9(2)*	
		25	24.985 836 92(3)	10.00(1)	5/2+	-0.855 45(8)		
		26	25.982 592 929(30)	11.01(3)	0+	0		
13	Al	27	26.981 538 63(12)	100	5/2+	+3.641 506 9(7)	+14.66(10)*	
14	Si	28	27.976 926 532 5(19)	92.223(19)	0+	0		
		29	28.976 494 700(22)	4.685(8)	1/2+	-0.555 29(3)		
		30	29.973 770 17(3)	3.092(11)	0+	0		
15	P	31	30.973 761 63(20)	100	1/2+	+1.131 60(3)		
16	S	32	31.972 071 00(15)	94.99(26)	0+	0	-6.4(10)*	
		33	32.971 458 76(15)	0.75(2)	3/2+	+0.643 821 2(14)		
		34	33.967 866 90(12)	4.25(24)	0+	0		
		36	35.967 080 76(20)	0.01(1)	0+	0		
17	Cl	35	34.968 852 68(4)	75.76(10)	3/2+	+0.821 874 3(4)	8.50(11)*	
		37	36.965 902 59(5)	24.24(10)	3/2+	+0.684 123 6(4)	-6.44(7)*	
18	Ar	36	35.967 545 106(29)	0.3365(30)	0+	0		
		38	37.962 732 4(4)	0.0632(5)	0+	0		
		40	39.962 383 122 5(29)	99.6003(30)	0+	0		
19	K	39	38.963 706 68(20)	93.2581(44)	3/2+	+0.391 47(3)**	+5.85	
		40#	39.963 998 48(21)	0.0117(1)	4-	-1.298 100(3)	-7.3(1)*	
		41	40.961 825 76(21)	6.7302(44)	3/2+	+0.214 870 1(2)**	+7.11(7)*	

<i>Z</i>	<i>Simbolo</i>	<i>A</i>	<i>Massa atomica,</i> <i>m_a/u</i>	<i>Composizione</i> <i>isotopica,</i> <i>100 x</i>	<i>Spin</i> <i>nucleare,</i> <i>I</i>	<i>Momento</i> <i>magnetico,</i> <i>m/μ_N</i>	<i>Momento</i> <i>quadrupolare,</i> <i>Q/fm²</i>
20	Ca	40	39.962 590 98(22)	96.941(156)	0+	0	
		42	41.958 618 01(27)	0.647(23)	0+	0	
		43	42.958 766 6(3)	0.135(10)	7/2-	-1.317 643(7)*	-5.5(1)**
		44	43.955 481 8(4)	2.086(110)	0+	0	
		46	45.953 692 6(24)	0.004(3)	0+	0	
		48#	47.952 534(4)	0.187(21)	0+	0	
21	Sc	45	44.955 911 9(9)	100	7/2-	+4.756 487(2)	-15.6(3)*
22	Ti	46	45.952 631 6(9)	8.25(3)	0+	0	
		47	46.951 763 1(9)	7.44(2)	5/2-	-0.788 48(1)	+30.0(20)*
		48	47.947 946 3(9)	73.72(3)	0+	0	
		49	48.947 870 0(9)	5.41(2)	7/2-	-1.104 17(1)	24.7(11)*
		50	49.944 791 2(9)	5.18(2)	0+	0	
23	V	50#	49.947 158 5(11)	0.250(4)	6+	+3.345 688 9(14)	21.0(40)*
		51	50.943 959 5(11)	99.750(4)	7/2-	+5.148 705 7(2)	-4.3(5)*
24	Cr	50	49.946 044 2(11)	4.345(13)	0+	0	
		52	51.940 507 5(8)	83.789(18)	0+	0	
		53	52.940 649 4(8)	9.501(17)	3/2-	-0.474 54(3)	-15.0(50)*
		54	53.938 880 4(8)	2.365(7)	0+	0	
25	Mn	55	54.938 045 1(7)	100	5/2-	+3.468 717 90(9)	+33.0(10)*
26	Fe	54	53.939 610 5(7)	5.845(35)	0+	0	
		56	55.934 937 5(7)	91.754(36)	0+	0	
		57	56.935 394 0(7)	2.119(10)	1/2-	+0.090 623 00(9)*	
		58	57.933 275 6(8)	0.282(4)	0+	0	
27	Co	59	58.933 195 0(7)	100	7/2-	+4.627(9)	+41.0(10)*
28	Ni	58	57.935 342 9(7)	68.0769(89)	0+	0	
		60	59.930 786 4(7)	26.2231(77)	0+	0	
		61	60.931 056 0(7)	1.1399(6)	3/2-	-0.750 02(4)	+16.2(15)
		62	61.928 345 1(6)	3.6345(17)	0+	0	
		64	63.927 966 0(7)	0.9256(9)	0+	0	
29	Cu	63	62.929 597 5(6)	69.15(15)	3/2-	2.227 345 6(14)*	-21.1(4)*
		65	64.927 789 5(7)	30.85(15)	3/2-	2.381 61(19)*	-19.5(4)
30	Zn	64	63.929 142 2(7)	48.268(321)	0+	0	
		66	65.926 033 4(10)	27.975(77)	0+	0	
		67	66.927 127 3(10)	4.102(21)	5/2-	+0.875 204 9(11)*	+15.0(15)
		68	67.924 844 2(10)	19.024(123)	0+	0	
		70	69.925 319 3(21)	0.631(9)	0+	0	
31	Ga	69	68.925 573 6(13)	60.108(9)	3/2-	+2.016 59(5)	+16.50(8)*
		71	70.924 701 3(11)	39.892(9)	3/2-	+2.562 27(2)	+10.40(8)*
32	Ge	70	69.924 247 4(11)	20.38(18)	0+	0	
		72	71.922 075 8(18)	27.31(26)	0+	0	
		73	72.923 458 9(18)	7.76(8)	9/2+	-0.879 467 7(2)	-17.0(30)
		74	73.921 177 8(18)	36.72(15)	0+	0	
		76#	75.921 402 6(18)	7.83(7)	0+	0	
33	As	75	74.921 596 5(20)	100	3/2-	+1.439 48(7)	+30.0(50)**

<i>Z</i>	<i>Simbolo</i>	<i>A</i>	<i>Massa atomica,</i> <i>m_a/u</i>	<i>Composizione</i> <i>isotopica,</i> <i>100 x</i>	<i>Spin</i> <i>nucleare,</i> <i>I</i>	<i>Momento</i> <i>magnetico,</i> <i>m/μ_N</i>	<i>Momento</i> <i>quadrupolare,</i> <i>Q/fm²</i>
34	Se	74	73.922 476 4(18)	0.89(4)	0+	0	
		76	75.919 213 6(18)	9.37(29)	0+	0	
		77	76.919 914 0(18)	7.63(16)	1/2-	+0.535 042 2(6)*	
		78	77.917 309 1(18)	23.77(28)	0+	0	
		80	79.916 521 3(21)	49.61(41)	0+	0	
		82#	81.916 699 4(22)	8.73(22)	0+	0	
35	Br	79	78.918 337 1(22)	50.69(7)	3/2-	+2.106 400(4)	31.8(5)**
		81	80.916 290 6(21)	49.31(7)	3/2-	+2.270 562(4)	+26.6(4)**
36	Kr	78	77.920 364 8(12)	0.355(3)	0+	0	
		80	79.916 379 0(16)	2.286(10)	0+	0	
		82	81.913 483 6(19)	11.593(31)	0+	0	
		83	82.914 136(3)	11.500(19)	9/2+	-0.970 669(3)	+25.9(1)*
		84	83.911 507(3)	56.987(15)	0+	0	
		86	85.910 610 73(11)	17.279(41)	0+	0	
37	Rb	85	84.911 789 738(12)	72.17(2)	5/2-	+1.352 98(10)**	+27.7(1)**
		87#	86.909 180 527(13)	27.83(2)	3/2-	+2.751 31(12)**	+13.4(1)*
38	Sr	84	83.913 425(3)	0.56(1)	0+	0	
		86	85.909 260 2(12)	9.86(1)	0+	0	
		87	86.908 877 1(12)	7.00(1)	9/2+	-1.093 603 0(13)*	+33.0(20)*
		88	87.905 612 1(12)	82.58(1)	0+	0	
39	Y	89	88.905 848 3(27)	100	1/2-	-0.137 415 4(3)*	
40	Zr	90	89.904 704 4(25)	51.45(40)	0+	0	
		91	90.905 645 8(25)	11.22(5)	5/2+	-1.303 62(2)	-17.6(3)*
		92	91.905 040 8(25)	17.15(8)	0+	0	
		94	93.906 315 2(26)	17.38(28)	0+	0	
		96#	95.908 273 4(30)	2.80(9)	0+	0	
41	Nb	93	92.906 378 1(26)	100	9/2+	+6.1705(3)	-37.0(20)*
42	Mo	92	91.906 811(4)	14.77(31)	0+	0	
		94	93.905 088 3(21)	9.23(10)	0+	0	
		95	94.905 842 1(21)	15.90(9)	5/2+	-0.9142(1)	-2.2(1)*
		96	95.904 679 5(21)	16.68(1)	0+	0	
		97	96.906 021 5(21)	9.56(5)	5/2+	-0.9335(1)	+25.5(13)*
		98	97.905 408 2(21)	24.19(26)	0+	0	
		100#	99.907 477(6)	9.67(20)	0+	0	
		43	Tc	98*	97.907 216(4)		(6)+
44	Ru	96	95.907 598(8)	5.54(14)	0+	0	
		98	97.905 287(7)	1.87(3)	0+	0	
		99	98.905 939 3(22)	12.76(14)	5/2+	-0.641(5)	+7.9(4)
		100	99.904 219 5(22)	12.60(7)	0+	0	
		101	100.905 582 1(22)	17.06(2)	5/2+	-0.719(6)*	+46.0(20)
		102	101.904 349 3(22)	31.55(14)	0+	0	
		104	103.905 433(3)	18.62(27)	0+	0	
45	Rh	103	102.905 504(3)	100	1/2-	-0.8840(2)	
46	Pd	102	101.905 609(3)	1.02(1)	0+	0	
		104	103.904 036(4)	11.14(8)	0+	0	
		105	104.905 085(4)	22.33(8)	5/2+	-0.642(3)	+65.0(30)**
		106	105.903 486(4)	27.33(3)	0+	0	
		108	107.903 892(4)	26.46(9)	0+	0	
		110	109.905 153(12)	11.72(9)	0+	0	

<i>Z</i>	<i>Simbolo</i>	<i>A</i>	<i>Massa atomica,</i> <i>m_a/u</i>	<i>Composizione</i> <i>isotopica,</i> <i>100 x</i>	<i>Spin</i> <i>nucleare,</i> <i>I</i>	<i>Momento</i> <i>magnetico,</i> <i>m/μ_N</i>	<i>Momento</i> <i>quadrupolare,</i> <i>Q/fm²</i>
47	Ag	107	106.905 097(5)	51.839(8)	1/2−	−0.113 679 65(15)*	
		109	108.904 752(3)	48.161(8)	1/2−	−0.130 690 6(2)*	
48	Cd	106	105.906 459(6)	1.25(6)	0+	0	
		108	107.904 184(6)	0.89(3)	0+	0	
		110	109.903 002 1(29)	12.49(18)	0+	0	
		111	110.904 178 1(29)	12.80(12)	1/2+	−0.594 886 1(8)*	
		112	111.902 757 8(29)	24.13(21)	0+	0	
		113#	112.904 401 7(29)	12.22(12)	1/2+	−0.622 300 9(9)	
		114	113.903 358 5(29)	28.73(42)	0+	0	
	116#	115.904 756(3)	7.49(18)	0+	0		
49	In	113	112.904 058(3)	4.29(5)	9/2+	+5.5289(2)	+80.0(40)
		115#	114.903 878(5)	95.71(5)	9/2+	+5.5408(2)	+81.0(50)*
50	Sn	112	111.904 818(5)	0.97(1)	0+	0	
		114	113.902 779(3)	0.66(1)	0+	0	
		115	114.903 342(3)	0.34(1)	1/2+	−0.918 83(7)	
		116	115.901 741(3)	14.54(9)	0+	0	
		117	116.902 952(3)	7.68(7)	1/2+	−1.001 04(7)	
		118	117.901 603(3)	24.22(9)	0+	0	
		119	118.903 308(3)	8.59(4)	1/2+	−1.047 28(7)	
		120	119.902 194 7(27)	32.58(9)	0+	0	
		122	121.903 439 0(29)	4.63(3)	0+	0	
		124	123.905 273 9(15)	5.79(5)	0+	0	
51	Sb	121	120.903 815 7(24)	57.21(5)	5/2+	+3.3634(3)	−36.0(40)**
		123	122.904 214 0(22)	42.79(5)	7/2+	+2.5498(2)	−49.0(50)
52	Te	120	119.904 020(10)	0.09(1)	0+	0	
		122	121.903 043 9(16)	2.55(12)	0+	0	
		123#	122.904 270 0(16)	0.89(3)	1/2+	−0.736 947 8(8)	
		124	123.902 817 9(16)	4.74(14)	0+	0	
		125	124.904 430 7(16)	7.07(15)	1/2+	−0.888 450 9(10)*	
		126	125.903 311 7(16)	18.84(25)	0+	0	
		128#	127.904 463 1(19)	31.74(8)	0+	0	
		130#	129.906 224 4(21)	34.08(62)	0+	0	
53	I	127	126.904 473(4)	100	5/2+	+2.813 27(8)	72.0(20)**
54	Xe	124	123.905 893 0(20)	0.0952(3)	0+	0	
		126	125.904 274(7)	0.0890(2)	0+	0	
		128	127.903 531 3(15)	1.9102(8)	0+	0	
		129	128.904 779 4(8)	26.4006(82)	1/2+	−0.777 976(8)	
		130	129.903 508 0(8)	4.0710(13)	0+	0	
		131	130.905 082 4(10)	21.2324(30)	3/2+	+0.6915(2)**	−11.4(1)*
		132	131.904 153 5(10)	26.9086(33)	0+	0	
		134	133.905 394 5(9)	10.4357(21)	0+	0	
136	135.907 219(8)	8.8573(44)	0+	0			
55	Cs	133	132.905 451 933(24)	100	7/2+	+2.582 025(3)**	−0.355(4)*
56	Ba	130	129.906 320(8)	0.106(1)	0+	0	
		132	131.905 061(3)	0.101(1)	0+	0	
		134	133.904 508 4(4)	2.417(18)	0+	0	
		135	134.905 688 6(4)	6.592(12)	3/2+	0.838 627(2)*	+16.0(3)*
		136	135.904 575 9(4)	7.854(24)	0+	0	
		137	136.905 827 4(5)	11.232(24)	3/2+	0.937 34(2)*	+24.5(4)*
		138	137.905 247 2(5)	71.698(42)	0+	0	

<i>Z</i>	<i>Simbolo</i>	<i>A</i>	<i>Massa atomica,</i> <i>m_a/u</i>	<i>Composizione</i> <i>isotopica,</i> <i>100 x</i>	<i>Spin</i> <i>nucleare,</i> <i>I</i>	<i>Momento</i> <i>magnetico,</i> <i>m/μ_N</i>	<i>Momento</i> <i>quadrupolare,</i> <i>Q/fm²</i>
57	La	138#	137.907 112(4)	0.090(1)	5+	+3.713 646(7)	+45.0(20)*
		139	138.906 353 3(26)	99.910(1)	7/2+	+2.783 045 5(9)	+20.0(10)
58	Ce	136	135.907 172(14)	0.185(2)	0+	0	
		138	137.905 991(11)	0.251(2)	0+	0	
		140	139.905 438 7(26)	88.450(51)	0+	0	
		142	141.909 244(3)	11.114(51)	0+	0	
59	Pr	141	140.907 652 8(26)	100	5/2+	+4.2754(5)	-7.7(6)*
60	Nd	142	141.907 723 3(25)	27.2(5)	0+	0	
		143	142.909 814 3(25)	12.2(2)	7/2-	-1.065(5)	-61.0(20)*
		144#	143.910 087 3(25)	23.8(3)	0+	0	
		145	144.912 573 6(25)	8.3(1)	7/2-	-0.656(4)	-31.4(12)**
		146	145.913 116 9(25)	17.2(3)	0+	0	
		148	147.916 893(3)	5.7(1)	0+	0	
		150#	149.920 891(3)	5.6(2)	0+	0	
61	Pm	145*	144.912 749(3)		5/2+		
62	Sm	144	143.911 999(3)	3.07(7)	0+	0	
		147#	146.914 897 9(26)	14.99(18)	7/2-	-0.812(2)**	-26.1(7)*
		148#	147.914 822 7(26)	11.24(10)	0+	0	
		149	148.917 184 7(26)	13.82(7)	7/2-	-0.6677(11)**	+7.5(2)*
		150	149.917 275 5(26)	7.38(1)	0+	0	
		152	151.919 732 4(27)	26.75(16)	0+	0	
		154	153.922 209 3(27)	22.75(29)	0+	0	
63	Eu	151	150.919 850 2(26)	47.81(6)	5/2+	+3.4717(6)	83.0**
		153	152.921 230 3(26)	52.19(6)	5/2+	+1.5324(3)*	+222.0*
64	Gd	152#	151.919 791 0(27)	0.20(1)	0+	0	
		154	153.920 865 6(27)	2.18(3)	0+	0	
		155	154.922 622 0(27)	14.80(12)	3/2-	-0.2572(4)*	+127.0(50)*
		156	155.922 122 7(27)	20.47(9)	0+	0	
		157	156.923 960 1(27)	15.65(2)	3/2-	-0.3373(6)*	+136.0(60)**
		158	157.924 103 9(27)	24.84(7)	0+	0	
		160	159.927 054 1(27)	21.86(19)	0+	0	
65	Tb	159	158.925 346 8(27)	100	3/2+	+2.014(4)	+143.2(8)
66	Dy	156	155.924 283(7)	0.056(3)	0+	0	
		158	157.924 409(4)	0.095(3)	0+	0	
		160	159.925 197 5(27)	2.329(18)	0+	0	
		161	160.926 933 4(27)	18.889(42)	5/2+	-0.480(3)*	247.7(30)**
		162	161.926 798 4(27)	25.475(36)	0+	0	
		163	162.928 731 2(27)	24.896(42)	5/2-	+0.673(4)	+265.0(20)**
		164	163.929 174 8(27)	28.260(54)	0+	0	
67	Ho	165	164.930 322 1(27)	100	7/2-	+4.17(3)	358.0(20)**
68	Er	162	161.928 778(4)	0.139(5)	0+	0	
		164	163.929 200(3)	1.601(3)	0+	0	
		166	165.930 293 1(27)	33.503(36)	0+	0	
		167	166.932 048 2(27)	22.869(9)	7/2+	-0.563 85(12)	+357.0(3)**
		168	167.932 370 2(27)	26.978(18)	0+	0	
		170	169.935 464 3(30)	14.910(36)	0+	0	
69	Tm	169	168.934 213 3(27)	100	1/2+	-0.2310(15)*	

<i>Z</i>	<i>Simbolo</i>	<i>A</i>	<i>Massa atomica,</i> <i>m_a/u</i>	<i>Composizione</i> <i>isotopica,</i> <i>100 x</i>	<i>Spin</i> <i>nucleare,</i> <i>I</i>	<i>Momento</i> <i>magnetico,</i> <i>m/μ_N</i>	<i>Momento</i> <i>quadrupolare,</i> <i>Q/fm²</i>
70	Yb	168	167.933 897(5)	0.13(1)	0+	0	
		170	169.934 761 8(26)	3.04(15)	0+	0	
		171	170.936 325 8(26)	14.28(57)	1/2-	+0.493 67(1)*	
		172	171.936 381 5(26)	21.83(67)	0+	0	
		173	172.938 210 8(26)	16.13(27)	5/2-	-0.648(3)**	+280.0(40)
		174	173.938 862 1(26)	31.83(92)	0+	0	
		176	175.942 571 7(28)	12.76(41)	0+	0	
71	Lu	175	174.940 771 8(23)	97.41(2)	7/2+	+2.2323(11)**	+349.0(20)*
		176#	175.942 686 3(23)	2.59(2)	7-	+3.162(12)**	+492.0(50)*
72	Hf	174#	173.940 046(3)	0.16(1)	0+	0	
		176	175.941 408 6(24)	5.26(7)	0+	0	
		177	176.943 220 7(23)	18.60(9)	7/2-	+0.7935(6)	+337.0(30)*
		178	177.943 698 8(23)	27.28(7)	0+	0	
		179	178.945 816 1(23)	13.62(2)	9/2+	-0.6409(13)	+379.0(30)*
		180	179.946 550 0(23)	35.08(16)	0+	0	
73	Ta	180	179.947 464 8(24)	0.012(2)	9-		
		181	180.947 995 8(19)	99.988(2)	7/2+	+2.3705(7)	+317.0(20)*
74	W	180	179.946 704(4)	0.12(1)	0+	0	
		182	181.948 204 2(9)	26.50(16)	0+	0	
		183	182.950 223 0(9)	14.31(4)	1/2-	+0.117 784 76(9)	
		184	183.950 931 2(9)	30.64(2)	0+	0	
		186	185.954 364 1(19)	28.43(19)	0+	0	
75	Re	185	184.952 955 0(13)	37.40(2)	5/2+	+3.1871(3)	+218.0(20)*
		187#	186.955 753 1(15)	62.60(2)	5/2+	+3.2197(3)	+207.0(20)*
76	Os	184	183.952 489 1(14)	0.02(1)	0+	0	
		186#	185.953 838 2(15)	1.59(3)	0+	0	
		187	186.955 750 5(15)	1.96(2)	1/2-	+0.064 651 89(6)*	
		188	187.955 838 2(15)	13.24(8)	0+	0	
		189	188.958 147 5(16)	16.15(5)	3/2-	+0.659 933(4)	+98.0(60)**
		190	189.958 447 0(16)	26.26(2)	0+	0	
		192	191.961 480 7(27)	40.78(19)	0+	0	
77	Ir	191	190.960 594 0(18)	37.3(2)	3/2+	+0.1507(6)*	+81.6(9)*
		193	192.962 926 4(18)	62.7(2)	3/2+	+0.1637(6)*	+75.1(9)*
78	Pt	190#	189.959 932(6)	0.014(1)	0+	0	
		192	191.961 038 0(27)	0.782(7)	0+	0	
		194	193.962 680 3(9)	32.967(99)	0+	0	
		195	194.964 791 1(9)	33.832(10)	1/2-	+0.609 52(6)	
		196	195.964 951 5(9)	25.242(41)	0+	0	
		198	197.967 893(3)	7.163(55)	0+	0	
79	Au	197	196.966 568 7(6)	100	3/2+	+0.145 746(9)**	+54.7(16)**
80	Hg	196	195.965 833(3)	0.15(1)	0+	0	
		198	197.966 769 0(4)	9.97(20)	0+	0	
		199	198.968 279 9(4)	16.87(22)	1/2-	+0.505 885 5(9)	
		200	199.968 326 0(4)	23.10(19)	0+	0	
		201	200.970 302 3(6)	13.18(9)	3/2-	-0.560 225 7(14)*	+38.0(40)*
		202	201.970 643 0(6)	29.86(26)	0+	0	
		204	203.973 493 9(4)	6.87(15)	0+	0	
81	Tl	203	202.972 344 2(14)	29.52(1)	1/2+	+1.622 257 87(12)*	
		205	204.974 427 5(14)	70.48(1)	1/2+	+1.638 214 61(12)	
82	Pb	204	203.973 043 6(13)	1.4(1)	0+	0	
		206	205.974 465 3(13)	24.1(1)	0+	0	
		207	206.975 896 9(13)	22.1(1)	1/2-	+0.592 583(9)*	
		208	207.976 652 1(13)	52.4(1)	0+	0	

<i>Z</i>	<i>Simbolo</i>	<i>A</i>	<i>Massa atomica,</i> <i>m_a/u</i>	<i>Composizione</i> <i>isotopica,</i> <i>100 x</i>	<i>Spin</i> <i>nucleare,</i> <i>I</i>	<i>Momento</i> <i>magnetico,</i> <i>m/μ_N</i>	<i>Momento</i> <i>quadrupolare,</i> <i>Q/fm²</i>
83	Bi	209#	208.980 398 7(16)	100	9/2−	+4.1103(5)*	−51.6(15)*
84	Po	209*	208.982 430 4(20)		1/2−		
85	At	210*	209.987 148(8)		(5)+		
86	Rn	222*	222.017 577 7(25)		0+	0	
87	Fr	223*	223.019 735 9(26)		3/2(−)	+1.17(2)	+117.0(10)
88	Ra	226*	226.025 409 8(25)		0+	0	
89	Ac	227*	227.027 752 1(26)		3/2−	+1.1(1)	+170.0(200)
90	Th	232#	232.038 055 3(21)	100	0+	0	
91	Pa	231*	231.035 884 0(24)	100	3/2−	2.01(2)	
92	U	233*	233.039 635 2(29)		5/2+	0.59(5)	366.3(8)*
		234#	234.040 952 2(20)	0.0054(5)	0+	0	
		235#	235.043 929 9(20)	0.7204(6)	7/2−	−0.38(3)*	493.6(6)*
		238#	238.050 788 2(20)	99.2742(10)	0+	0	
93	Np	237*	237.048 173 4(20)		5/2+	+3.14(4)*	+386.6(6)
94	Pu	244*	244.064 204(5)		0+		
95	Am	243*	243.061 381 1(25)		5/2−	+1.503(14)	+286.0(30)*
96	Cm	247*	247.070 354(5)		9/2−	0.36(7)	
97	Bk	247*	247.070 307(6)				
98	Cf	251*	251.079 587(5)				
99	Es	252*	252.082 980(50)				
		253*	253.084 824 7(28)		7/2+	+4.10(7)	670.0(800)
100	Fm	257*	257.095 105(7)				
101	Md	258*	258.098 431(5)				
102	No	259*	259.101 03(11)				
103	Lr	262*	262.109 63(22)				
104	Rf	261*	261.108 77(3)				
105	Db	262*	262.114 08(20)				
106	Sg	263*	263.118 32(13)				
107	Bh	264*	264.1246(3)				
108	Hs	265*	265.130 09(15)				
109	Mt	268*	268.138 73(34)				
110	Ds	271*	271.146 06(11)				
111	Rg	272*	272.153 62(36)				

7 CONVERSIONE DI UNITÀ DI MISURA

Le unità di misura SI sono raccomandate per ogni campo della scienza e della tecnica. Tuttavia, alcune unità non razionalizzate sono usate ed in alcuni casi si prospetta che tale uso rimanga ancora nell'uso per molti anni. Inoltre, la letteratura scientifica ha usato ed usa ancora ampiamente unità non SI. Quindi è sovente necessario convertire i valori di grandezze fisiche tra unità SI ed altre unità. Questo capitolo si propone di facilitare tale processo, come pure la conversione di unità di misura tra vari sistemi in generale.

La Sez. 7.1, p. 131 fornisce esempi che illustrano l'uso del calcolo per grandezze nel convertire i valori numerici delle grandezze fisiche espresse in diverse unità di misura. La tabella della Sez. 7.2, p. 135, elenca una varietà di unità non razionalizzate usate in chimica, con i fattori di conversione alle corrispondenti unità SI. I fattori di trasformazione per l'energia e grandezze ad essa relative (quali il numero d'onda, la frequenza, la temperatura e l'energia molare) e per le unità di pressione, sono anche riportati nelle tabelle della copertina posteriore di questo manuale.

Molte delle difficoltà nel convertire le unità di misura tra sistemi differenti sono particolarmente gravi per le unità elettromagnetiche, o per le unità atomiche e le loro relazioni con le unità elettromagnetiche. Nelle Sezioni 7.3 e 7.4, p. 143 e 147 le relazioni relative alle unità elettromagnetiche ed atomiche sono riportate in dettaglio, per fungere come base per la comprensione dei fattori di conversione riportati nella tabella della Sez. 7.2, p. 135.

7.1 L'USO DEL CALCOLO PER GRANDEZZE

Il calcolo per grandezze è un sistema algebrico nel quale i simboli sono usati in modo coerente per rappresentare grandezze fisiche e non i loro valori numerici espressi in certe unità di misura. Si considerano sempre i valori delle grandezze fisiche come formati dal prodotto di un numero per una unità di misura (vedi Sez. 1.1, p. 3) e si manipolano i simboli delle grandezze fisiche, i valori numerici e le unità di misura con le regole ordinarie dell'algebra (vedi nota ¹ a piè di pagina). Questo è il sistema raccomandato in generale per la scienza e la tecnologia. Il calcolo per grandezze mostra vantaggi particolari nel facilitare la soluzione dei problemi di conversione tra unità differenti e di differenti sistemi di unità. Un altro importante vantaggio è che le equazioni tra grandezze sono indipendenti dalla scelta delle unità di misura e devono sempre soddisfare alla regola che le dimensioni debbono essere le stesse per i due termini dell'uguaglianza. Questi vantaggi sono illustrati negli esempi che seguono, dove i valori numerici usati sono approssimativi.

Esempio 1. La lunghezza d'onda λ di una riga gialla del sodio è data da

$$\lambda \approx 5.896 \times 10^{-7} \text{ m, or } \lambda/\text{m} \approx 5.896 \times 10^{-7}$$

L'ångström è definito dall'equazione (vedi Sez. 7.2, "lunghezza", p. 135)

$$1 \text{ \AA} = \text{\AA} := 10^{-10} \text{ m, or } \text{m/\AA} := 10^{10}$$

Sostituendo nella prima equazione si trova il valore di λ in ångström

$$\lambda/\text{\AA} = (\lambda/\text{m}) (\text{m/\AA}) \approx (5.896 \times 10^{-7}) (10^{10}) = 5896$$

oppure

$$\lambda \approx 5896 \text{ \AA}$$

Esempio 2. La tensione di vapore dell'acqua a 20 °C è

$$p(\text{H}_2\text{O}, 20 \text{ °C}) \approx 17.5 \text{ Torr}$$

Il torr, il bar e l'atmosfera sono dati dalle equazioni (vedi Sez. 7.2, "pressione", p. 138)

$$\begin{aligned} 1 \text{ Torr} &\approx 133.3 \text{ Pa} \\ 1 \text{ bar} &:= 10^5 \text{ Pa} \\ 1 \text{ atm} &:= 101\,325 \text{ Pa} \end{aligned}$$

Perciò

$$\begin{aligned} p(\text{H}_2\text{O}, 20 \text{ °C}) &\approx 17.5 \times 133.3 \text{ Pa} \approx 2.33 \text{ kPa} = \\ &(2.33 \times 10^3/10^5) \text{ bar} = 23.3 \text{ mbar} = \\ &(2.33 \times 10^3/101\,325) \text{ atm} \approx 2.30 \times 10^{-2} \text{ atm} \end{aligned}$$

Esempio 3. Le misure spettroscopiche mostrano che, per il radicale metilene, CH_2 , lo stato eccitato $\tilde{a} \text{ } ^1\text{A}_1$ avviene ad un numero d'onda 3156 cm^{-1} sopra lo stato base $\tilde{\text{X}} \text{ } ^3\text{B}_1$

$$\tilde{\nu}(\tilde{a} - \tilde{\text{X}}) = T_0(\tilde{a}) - T_0(\tilde{\text{X}}) \approx 3156 \text{ cm}^{-1}$$

L'energia di eccitazione dallo stato base di tripletto allo stato eccitato di singoletto è dunque

$$\begin{aligned} \Delta E = hc_0\tilde{\nu} &\approx (6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}) (2.998 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}) (3156 \text{ cm}^{-1}) \approx \\ &6.269 \times 10^{-22} \text{ J m cm}^{-1} = \\ &6.269 \times 10^{-20} \text{ J} = 6.269 \times 10^{-2} \text{ aJ} \end{aligned}$$

¹ Un nome più appropriato per "calcolo per grandezze" potrebbe essere "algebra delle grandezze", perché si usano in realtà i principi dell'algebra piuttosto che quelli del calcolo (nel senso del calcolo differenziale o integrale).

laddove i valori di h e c_0 sono tratti dalle costanti fondamentali della fisica riportate al Capitolo 5, p. 111 e si è usata la relazione $1 \text{ m} = 100 \text{ cm}$, o $1 \text{ m} = 10^2 \text{ cm}$. Poiché l'elettronvolt è dato dall'equazione (Sez. 7.2, "energia", p. 137) $1 \text{ eV} \approx 1.6022 \times 10^{-19} \text{ J}$, o $1 \text{ aJ} \approx (1/0.16022) \text{ eV}$,

$$\Delta E \approx (6.269 \times 10^{-2} / 0.16022) \text{ eV} \approx 0.3913 \text{ eV}$$

Analogamente, l'hartree è dato da $E_h = \hbar^2 / m_e a_0^2 \approx 4.3597 \text{ aJ}$, o $1 \text{ aJ} \approx (1/4.3597) E_h$ (Sez. 3.9.1, p. 94), perciò l'energia di eccitazione è data, in unità atomiche, da

$$\Delta E \approx (6.269 \times 10^{-2} / 4.3597) E_h \approx 1.4379 \times 10^{-2} E_h$$

Infine l'energia molare di eccitazione è data da

$$\Delta E_m = N_A \Delta E \approx (6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1})(6.269 \times 10^{-2} \text{ aJ}) \approx 37.75 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Inoltre, poiché $1 \text{ kcal} := 4.184 \text{ kJ}$, o $1 \text{ kJ} := (1/4.184) \text{ kcal}$,

$$\Delta E_m \approx (37.75 / 4.184) \text{ kcal mol}^{-1} \approx 9.023 \text{ kcal mol}^{-1}$$

Nella trasformazione da ΔE a ΔE_m il coefficiente N_A non è un semplice numero, ma ha una dimensione. Inoltre, in questo esempio il necessario coefficiente di trasformazione potrebbe essere stato ricavato direttamente dalla tabella posta nella copertina posteriore di questo manuale.

Esempio 4. La conducibilità molare, Λ , di un elettrolita è definita dall'equazione

$$\Lambda = \kappa / c$$

dove κ è la conducibilità della soluzione elettrolitica meno la conducibilità del solvente puro e c è la concentrazione dell'elettrolita. Le conducibilità degli elettroliti sono normalmente espresse in S cm^{-1} e le concentrazioni in mol dm^{-3} ; per esempio $\kappa(\text{KCl}) \approx 7.39 \times 10^{-5} \text{ S cm}^{-1}$ per $c(\text{KCl}) \approx 0.000500 \text{ mol dm}^{-3}$. La conducibilità molare può quindi essere calcolata come segue

$$\Lambda \approx (7.39 \times 10^{-5} \text{ S cm}^{-1}) / (0.000500 \text{ mol dm}^{-3}) \approx 0.1478 \text{ S mol}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ dm}^3 = 147.8 \text{ S mol}^{-1} \text{ cm}^2$$

poiché $1 \text{ dm}^3 = 1000 \text{ cm}^3$. La relazione precedente è stata spesso scritta in passato, ma talora ancora oggi, nella forma non raccomandata

$$\Lambda = 1000 \kappa / c$$

Tuttavia, in questa forma, i simboli *non* rappresentano grandezze fisiche, ma i *valori numerici* delle grandezze fisiche, espressi in certe unità di misura. Specificamente, l'ultima equazione è vera solo se Λ è il valore numerico della conducibilità molare espressa in $\text{S mol}^{-1} \text{ cm}^2$, κ è il valore numerico della conducibilità espressa in S cm^{-1} e c è il valore numerico della concentrazione espressa in mol dm^{-3} . Questa forma non obbedisce alle regole del calcolo per grandezze e deve essere evitata. L'equazione $\Lambda = \kappa / c$, in cui i simboli rappresentano grandezze fisiche, è vera qualunque siano le unità di misura. Se si desidera scrivere la relazione tra i valori numerici, essa dev'essere scritta nella forma seguente

$$\Lambda / (\text{S mol}^{-1} \text{ cm}^2) = \frac{1000 \kappa / (\text{S cm}^{-1})}{c / (\text{mol dm}^{-3})}$$

Esempio 5. Una soluzione di 0.125 mol del soluto B in $m_S \approx 953 \text{ g}$ di solvente S ha una molalità b_B data da (vedi anche la nota ² a piè di pagina)

$$b_B = n_B / m_S \approx (0.125 / 953) \text{ mol g}^{-1} \approx 0.131 \text{ mol kg}^{-1}$$

La frazione di quantità di sostanza del soluto è approssimativamente data da

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

dove si assume che $n_B \ll n_S$.

² Si usa b_B a causa della possibile confusione di notazione quando m_B è usato per indicare la molalità e m_S per indicare la massa di S. Tuttavia, anche il simbolo m_B è frequentemente usato per indicare la molalità (vedi Sez. 2.10, nota 14, p. 48).

Se il solvente è acqua con massa molare $18.015 \text{ g mol}^{-1}$, allora

$$x_B \approx (0.131 \text{ mol kg}^{-1}) (18.015 \text{ g mol}^{-1}) \approx 2.36 \text{ g/kg} = 0.00236$$

Queste equazioni sono talora scritte nella forma deprecata $b_B = 1000 n_B/M_S$, e $x_B \approx b_B M_S/1000$. Tuttavia, questo *non* è l'uso corretto del calcolo per grandezze perchè in questa forma i simboli indicano i *valori numerici* delle grandezze fisiche espressi in certe unità; specificamente, si assume che b_B , m_S e M_S indichino valori numerici espressi rispettivamente in mol kg^{-1} , g , e g mol^{-1} . Un modo corretto di scrivere la seconda equazione è, per esempio,

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

Esempio 6. Per materiali paramagnetici, la suscettività magnetica può essere espressa sperimentalmente ed usata per fornire informazioni sul momento di dipolo magnetico molecolare e quindi sulla struttura elettronica delle molecole del materiale. Il contributo paramagnetico alla suscettività magnetica molare di un materiale, χ_m , è legata al momento di dipolo magnetico molecolare m dalla relazione di Curie

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

Nei vecchi sistemi non razionalizzati esu, emu e Gaussiano (vedi Sez. 7.3, p. 143), questa equazione diventa

$$\chi_m^{(\text{ir})} = \chi^{(\text{ir})} V_m = N_A m^2 / 3kT$$

Risolvendo per m ed esprimendo il risultato in termini del magnetone di Bohr μ_B , nel ISQ(SI)

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

e, nei sistemi non razionalizzati emu e Gaussiano,

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

Infine, usando i valori delle costanti fisiche fondamentali μ_B , k , μ_0 , e N_A date nel Capitolo 5, p. 111, si ottiene

$$m/\mu_B \approx 0.7977 [\chi_m / (\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1})]^{1/2} [T/\text{K}]^{1/2} \approx 2.828 [\chi_m^{(\text{ir})} / (\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1})]^{1/2} [T/\text{K}]^{1/2}$$

Queste espressioni sono utili per calcoli pratici. Il risultato finale è spesso espresso nella forma non raccomandata

$$m/\mu_B \approx 2.828 (\chi_m T)^{1/2}$$

dove si assume, in contrasto con le regole del calcolo per grandezze, che χ_m e T indichino rispettivamente i *valori numerici* della suscettività molare e della temperatura nelle unità di misura $\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ e K , e dove si assume (anche se in genere è taciuto) che la suscettività è definita usando le equazioni elettromagnetiche quali definite nei sistemi non razionalizzati (vedi Sez. 7.3, p. 143).

Esempio 7. L'unità esu o Gaussiana di carica elettrica è $\sqrt{\text{erg cm}}$. In alternativa, il franklin (Fr) è usato per rappresentare $\sqrt{\text{erg cm}}$ (vedi Sez. 7.3, p. 143). La definizione del franklin afferma che due particelle, ciascuna con una carica elettrica di un franklin e separate da una distanza di un centimetro, si attirano con una forza di 2 din. Per ottenere un fattore di conversione rispetto all'unità coulomb del sistema SI, ci si deve chiedere quali cariche producono la stessa forza in unità SI ed alla stessa distanza. Si ottiene

$$1 \text{ dyn} = 1 \text{ cm g s}^{-2} = 10^{-5} \text{ N} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q^2}{(10^{-2} \text{ m})^2}$$

Ne consegue (vedi Sez. 7.3, p. 143) che

$$Q^2 = 4\pi\epsilon_0 \times 10^{-9} \text{ N m}^2 = \mu_0\epsilon_0 \times 10^{-2} \text{ A}^2 \text{ m}^2 = c_0^{-2} \times 10^{-2} \text{ A}^2 \text{ m}^2$$

e quindi

$$Q = \frac{1}{10 c_0} \text{ A m} = \frac{10}{\zeta} \text{ C}$$

dove ζ è il numero esatto $\zeta = c_0/(\text{cm s}^{-1}) = 29979245800$ (vedi Sez. 7.2 e 7.3, p. 135 e 143). Perciò $1 \text{ Fr} = 1/(2.99792458 \times 10^9) \text{ C}$.

Esempio 8. L'unità esu o Gaussiana di intensità di campo elettrico è $\sqrt{\text{erg cm}} \text{ cm}^{-2}$ o, in alternativa, Fr cm^{-2} . Il semplice uso delle suindicate relazioni tra il franklin ed il coulomb porterebbe a $1 \text{ Fr cm}^{-2} = (10^5/\zeta) \text{ C m}^{-2}$. Tuttavia, C m^{-2} non è l'unità di misura di intensità di campo elettrico nel sistema SI. Per ottenere il fattore di conversione per l'intensità di campo elettrico nel sistema SI, si deve fissare

$$1 \frac{\text{Fr}}{\text{cm}^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \times \frac{10^5}{\zeta} \frac{\text{C}}{\text{m}^2}$$

Dall'esempio 7 si ha $4\pi\epsilon_0 \times 10^{-9} \text{ Nm}^2 = (10/\zeta)^2 \text{ C}^2$, donde

$$\frac{10^5 \text{ C}}{4\pi\epsilon_0 \zeta \text{ m}^2} = \zeta \times 10^{-6} \frac{\text{N}}{\text{C}}$$

Si conclude che $1 \text{ Fr cm}^{-2} = \zeta \times 10^{-6} \text{ V m}^{-1}$.

Esempio 9. L'unità esu o Gaussiana di polarizzabilità è il cm^3 : in un sistema di cariche con polarizzabilità 1 cm^3 , un campo di 1 Fr/cm^2 produce un momento di dipolo di 1 Fr cm (vedi Sez. 7.3, p. 143). Il corrispondente valore per questa polarizzabilità nel sistema SI si ottiene come segue:

$$1 \text{ cm}^3 = \frac{p}{E} = \frac{(10/\zeta) \text{ C } 10^{-2} \text{ m}}{\zeta 10^{-6} \text{ V m}^{-1}} = \zeta^{-2} 10^5 \text{ m}^2 \text{ C V}^{-1}$$

Si ha dunque $1 \text{ cm}^3 = (10^5/\zeta^2) \text{ m}^2 \text{ C}^2 \text{ J}^{-1}$, dalla definizione del volt. Questa equazione sembra strana a prima vista: essa non fornisce una relazione generale tra un volume di 1 cm^3 ed altre unità SI, ma afferma che una polarizzabilità che ha un valore di 1 cm^3 nei sistemi esu o Gaussiano ha il valore $(10^5/\zeta^2) \text{ m}^2 \text{ C}^2 \text{ J}^{-1}$ in unità SI.

7.2 TABELLE DI CONVERSIONE PER LE UNITÀ DI MISURA

Le tabelle che seguono forniscono i fattori di conversione da una varietà di unità alla corrispondente unità SI. Esempi di uso di queste tabelle sono già stati dati nella precedente sezione. Per ciascuna grandezza fisica dopo il nome è indicato il simbolo raccomandato. Quindi è fornita l'unità SI, seguita da quelle esu, emu, Gaussiana, atomica (ua), ed altre unità di uso comune, con i loro fattori di conversione al SI ed ad altre unità. La costante ζ che viene usata nei fattori di conversione di unità elettromagnetiche è il numero esatto $29\,979\,245\,800 = c_0/(\text{cm s}^{-1})$.

L'inclusione di unità non SI nella tabella non implica che il loro uso sia incoraggiato. Tranne qualche eccezione, si devono sempre preferire le unità SI a quelle di altri sistemi di unità. Tuttavia, poiché molte delle unità riportate si trovano nella letteratura scientifica, è opportuno conoscere le loro relazioni con quelle del SI.

Per convenienza, le unità nei sistemi esu, emu e Gaussiano sono indicate in termini delle quattro dimensioni *lunghezza, massa, tempo e carica elettrica*, includendo il franklin (Fr) come unità elettrostatica di carica ed il biot (Bi) come unità elettromagnetica di corrente. Ciò produce per ogni grandezza fisica le stesse dimensioni in tutti questi sistemi, cosicché tutti i fattori di conversione sono numeri puri. Il fattore $4\pi\epsilon_0 = k_{\text{es}}^{-1}$ ed il Fr possono essere eliminati scrivendo $\text{Fr} = \text{erg}^{1/2} \text{cm}^{1/2} = \text{cm}^{3/2} \text{g}^{1/2} \text{s}^{-1}$ e $k_{\text{es}} = 1 \text{Fr}^{-2} \text{erg cm} = 1$, per ricuperare le espressioni esu in termini di tre unità base (vedi Sez. 7.3, p. 143). Il simbolo Fr deve essere considerato qui come quello dell'unità elettrostatica di carica. Analogamente, il fattore $\mu_0/4\pi = k_{\text{em}}$ ed il Bi possono essere eliminati usando $\text{Bi} = \text{dyn}^{1/2} = \text{cm}^{1/2} \text{g}^{1/2} \text{s}^{-1}$ e $k_{\text{em}} = \text{dyn Bi}^{-2} = 1$, per ricuperare le espressioni emu in termini delle tre unità base.

La tabella deve essere letta nel seguente modo, ad esempio per il fermi come unità di lunghezza: $f = 10^{-15} \text{ m}$ significa che il simbolo f per una lunghezza di 13.1 f può essere sostituito da 10^{-15} m , significando che la lunghezza ha il valore $13.1 \times 10^{-15} \text{ m}$. Un esempio più complicato è quello che riguarda, per esempio, la polarizzabilità α . Quando α è 17.8 cm^3 nel sistema Gaussiano, è $(17.8 \times 10^5/\zeta^2) \text{ m}^2 \text{ C}^2 \text{ J}^{-1} \approx 3.53 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ C}^2 \text{ J}^{-1}$ nel sistema SI. Cioè, il simbolo cm^3 può essere sostituito dall'espressione $(10^5/\zeta^2) \text{ m}^2 \text{ C}^2 \text{ J}^{-1}$ per ottenere il valore della polarizzabilità in unità SI (vedi anche l'esempio 9 nella Sez. 7.1, p. 134). Fattori di conversione sono dati sia esattamente (nel qual caso si usa il segno =; se si tratta di una definizione, si usa il segno :=), o sono solo approssimati quanto il valore conosciuto delle costanti fisiche fondamentali (nel qual caso si usa il segno \approx). In quest'ultimo caso, l'entità dell'incertezza è sempre inferiore a 5 nell'ultima cifra fornita, a meno che l'incertezza sia indicata esplicitamente.

Nome	Simbolo	Espresso in unità SI	Note
<i>lunghezza, l</i>			
metro (unità SI)	m		
centimetro (unità CGS)	cm	$= 10^{-2} \text{ m}$	
bohr (ua)	a_0	$= 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2 \approx 5.291\,772\,085\,9(36) \times 10^{-11} \text{ m}$	
ångström	Å	$= 10^{-10} \text{ m}$	
micron	μ	$= 1 \mu\text{m} = 10^{-6} \text{ m}$	
millimicron	m μ	$= 1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$	
unità x	X	$\approx 1.002 \times 10^{-13} \text{ m}$	
fermi	f	$= 1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$	
pollice	in	$= 2.54 \times 10^{-2} \text{ m}$	
piede	ft	$= 12 \text{ in} = 0.3048 \text{ m}$	
yarda	yd	$= 3 \text{ ft} = 0.9144 \text{ m}$	
miglio	mi	$= 1760 \text{ yd} = 1609.344 \text{ m}$	
miglio nautico		$= 1852 \text{ m}$	

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Espresso in unità SI</i>	<i>Note</i>
<i>lunghezza, l</i> (continua)			
unità astronomica	ua	$\approx 1.495\,978\,706\,91(6)\times 10^{11}$ m	
parsec	pc	$\approx 3.085\,678\times 10^{16}$ m	
anno luce	a.l.	$\approx 9.460\,730\times 10^{15}$ m	1
secondo luce		= 299 792 458 m	
<i>area, A</i>			
metro quadrato (quadro)	m ²		(unità SI)
barn	b	= 10^{-28} m ²	
acro		≈ 4046.856 m ²	
ara	a	= 100 m ²	
ettaro	ha	= 10 ⁴ m ²	
<i>volume, V</i>			
metro cubico (cubo)	m ³		(unità SI)
litro	l, L	= 1 dm ³ = 10 ⁻³ m ³	2
lambda	λ	= 10 ⁻⁶ dm ³ [= 1 μl]	
barile (USA)		= 158.9873 dm ³	
gallone (USA)	gal (US)	= 3.785 412 dm ³	
gallone (UK)	gal (UK)	= 4.546 092 dm ³	
<i>angolo piano, α</i>			
radiante (unità SI)	rad		
grado	°, deg	= (π/180) rad \approx (1/57.295 78) rad	
minuto	'	= (π/10 800) rad [= (1/60)°]	
secondo	"	= (π/648 000) rad [= (1/3600)°]	
gon	gon	= (π/200) rad \approx (1/63.661 98) rad	
<i>massa, m</i>			
kilogrammo (chilogrammo)	kg		(unità SI)
grammo (unità CGS)	g	= 10 ⁻³ kg	
massa dell'elettrone (ua)	m_e	$\approx 9.109\,382\,15(45)\times 10^{-31}$ kg	
dalton, unità di massa , atomica unificata	Da, u	:= $m_a(^{12}\text{C})/12 \approx 1.660\,538\,782(83)\times 10^{-27}$ kg	
gamma	γ	= 1 μg	
tonnellata, (tonnellata metrica)t	t	= 1 Mg = 10 ³ kg	
libbra (avoirdupois)	lb	= 0.453 592 37 kg	
libbra, (libbra metrica)		= 0.5 kg	
oncia (avoirdupois)	oz	= 28.349 52 g	
oncia (troy)	oz (troy)	= 31.103 476 8 g	
grano	gr	= 64.798 91 mg	

(1) Questo valore si riferisce all'anno Giuliano (1 a = 365.25 d, 1 d = 86 400 s) [152]. a.l. non è un simbolo in accordo con le regole di sintassi indicate in Sez. 1.3, p. 5, ma è un'abbreviazione spesso usata.

(2) ISO e IEC usano per il litro soltanto la lettera minuscola.

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Espresso in unità SI</i>	<i>Note</i>
<i>tempo, t</i>			
secondo (unità SI e CGS)	s		
ua di tempo	\hbar/E_h	$\approx 2.418\,884\,326\,505(16)\times 10^{-17}$ s	
minuto	min	= 60 s	
ora	h	= 3600 s	
giorno	d	= 24 h = 86 400 s	3
anno	a	$\approx 31\,556\,952$ s	4
svedberg	Sv	= 10^{-13} s	
<i>accelerazione, a</i>			
unità SI	m s^{-2}		
accelerazione standard di caduta libera	g_n	= 9.806 65 m s^{-2}	
gal (unità CGS)	Gal	= 10^{-2} m s^{-2}	
<i>forza, F</i>			
newton (unità SI)	N	= 1 kg m s^{-2}	5
dina (unità CGS)	din	= 1 g cm s^{-2} = 10^{-5} N	
ua di forza	E_h/a_0	$\approx 8.238\,722\,06(41)\times 10^{-8}$ N	
kilogrammo forza, kilopond	kgf = kp	= 9.806 65 N	
<i>energia, E, U</i>			
joule (unità SI)	J	= 1 $\text{kg m}^2 \text{s}^{-2}$	
erg (unità CGS)	erg	= 1 $\text{g cm}^2 \text{s}^{-2}$ = 10^{-7} J	
hartree (ua)	E_h	= $\hbar^2/m_e a_0^2 \approx 4.359\,743\,94(22)\times 10^{-18}$ J	
rydberg	Ry	= $E_h/2 \approx 2.179\,871\,97(11)\times 10^{-18}$ J	
elettronvolt	eV	= $e\cdot 1$ V $\approx 1.602\,176\,487(40)\times 10^{-19}$ J	
caloria, termochimica	cal _{term}	= 4.184 J	
caloria, internazionale	cal _{IT}	= 4.1868 J	
caloria a 15 °C	cal ₁₅	≈ 4.1855 J	
atmosfera litro	l atm	= 101.325 J	
British thermal unit (unità termica britannica)	Btu	= 1055.06 J	

(3) Si noti che il giorno astronomico non è definito esattamente in termini di secondi per via dei cosiddetti secondi di aggiustamento che sono aggiunti o sottratti dal giorno ogni sei mesi per mantenere il tempo medio della mezzanotte esattamente alle ore 24:00:00. Tuttavia, in [3] ora e giorno sono definiti in termini del secondo come qui definito.

(4) L'anno non è commensurabile col giorno e non è costante. Prima del 1967, quando fu introdotto lo standard atomico, l'anno tropico 1900 serviva come base per la definizione del secondo. Per l'epoca 1900.0 esso ammontava a 365.242 198 79 d $\approx 31\,556\,925.98$ s, crescendo ogni secolo di 0.530 s. Gli anni di calendario sono definiti esattamente in termini di giorni: l'anno **Giuliano** è uguale a 365.25 d; l'anno **Gregoriano** è uguale a 365.2425 d; l'anno **Mayano** è uguale a 365.2420 d. La definizione in tabella corrisponde all'anno Gregoriano. Esso è una media basata sull'anno di 365 d, con anni bisestili di 366 d; l'anno è bisestile *sia* quando è divisibile per 4 ma non per 100, *sia* quando è divisibile per 400. Il caso che l'anno 3200 sia bisestile è ancora aperto, ma non è un problema che debba essere risolto prima della metà del secolo 32mo. Per la conversione si può usare approssimativamente 1 a $\approx 3.1557\times 10^7$ s. Se è necessaria una maggiore precisione, si deve usare una definizione precisa di anno.

(5) 1 N è all'incirca uguale alla forza esercitata dalla gravità terrestre su una mela.

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Espresso in unità SI</i>	<i>Note</i>
<i>pressione, p</i>			
pascal (unità SI)	Pa	$= 1 \text{ N m}^{-2} = 1 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-2}$	
atmosfera standard	atm	$= 101\,325 \text{ Pa}$	
bar	bar	$= 10^5 \text{ Pa}$	
torr	Torr	$= (101\,325/760) \text{ Pa} \approx 133.322 \text{ Pa}$	
millimetro di mercurio convenzionale	mmHg	$= 13.5951 \times 980.665 \times 10^{-2} \text{ Pa} \approx$ 133.322 Pa	
libbra per pollice quadrato	psi	$\approx 6.894\,758 \times 10^3 \text{ Pa}$	
<i>potenza, P</i>			
watt (unità SI)	W	$= 1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-3}$	
cavallo vapore (Imperial horse power)	cv (hp)	$\approx 745.7 \text{ W}$	
cavallo vapore metrico	hk	$= 735.498\,75 \text{ W}$	
<i>azione, momento angolare, L, J</i>			
unità SI	J s	$= 1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-1}$	
unità CGS	erg s	$= 10^{-7} \text{ J s}$	
ua di azione	\hbar	$:= h/2\pi \approx 1.054\,571\,628(53) \times 10^{-34} \text{ J s}$	
<i>viscosità dinamica, η</i>			
unità SI	Pa s	$= 1 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$	
poise (unità CGS)	P	$= 10^{-1} \text{ Pa s}$	
centipoise	cP	$= 1 \text{ mPa s}$	
<i>viscosità cinematica, ν</i>			
unità SI	$\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$		
stokes (unità CGS)	St	$= 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	
<i>temperatura termodinamica, T</i>			
kelvin (unità SI)	K		
grado Rankine	$^{\circ}\text{R}$	$= (5/9) \text{ K}$	6
<i>temperatura Celsius, t</i>			
grado Celsius (unità SI)	$^{\circ}\text{C}$	$= 1 \text{ K}$	6
<i>entropia, S</i>			
<i>capacità termica, C</i>			
unità SI	J K^{-1}		
clausius	Cl	$= 4.184 \text{ J K}^{-1} [= 1 \text{ cal}_{\text{term}} \text{ K}^{-1}]$	

(6) $T/^{\circ}\text{R} = (9/5)T/\text{K}$. Inoltre, la temperatura Celsius t è legata alla temperatura termodinamica T dall'equazione

$$t/^{\circ}\text{C} = T/\text{K} - 273.15$$

Analogamente, la temperatura Fahrenheit t_{F} è legata alla temperatura Celsius t dall'equazione

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

Nome	Simbolo	Espresso in unità SI	Note
<i>entropia molare, S_m</i>			
<i>capacità termica molare, C_m</i>			
unità SI	$\text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1}$	$= 1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2} \text{ K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$	
unità di entropia		$= 4.184 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} =$ $[1 \text{ cal}_{\text{term}} \text{ K}^{-1} \text{ mol}^{-1}]$	
<i>volume molare, V_m</i>			
unità SI	$\text{m}^3 \text{mol}^{-1}$		
amagat		$:= V_m$ per un gas reale a 1 atm e $273.15 \text{ K} \approx 22.4 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$	
<i>densità di quantità di sostanza, $1/V_m$</i>			
unità SI	mol m^{-3}		
reciproco del amagat		$:= 1/V_m$ per un gas reale a 1 atm e $273.15 \text{ K} \approx 44.6 \text{ mol m}^{-3}$	7
<i>attività, A</i>			
becquerel (unità SI)	Bq	$= 1 \text{ s}^{-1}$	
curie	Ci	$= 3.7 \times 10^{10} \text{ Bq}$	
<i>dose assorbita di radiazione, D</i>			8
gray (SI unit)	Gy	$= 1 \text{ J kg}^{-1} = 1 \text{ m}^2 \text{ s}^{-2}$	
rad	rad	$= 0.01 \text{ Gy}$	
<i>dose equivalente, H</i>			
sievert (unità SI)	Sv	$= 1 \text{ J kg}^{-1} = 1 \text{ m}^2 \text{ s}^{-2}$	
rem	rem	$= 0.01 \text{ Sv}$	9
<i>corrente elettrica, I</i>			
ampere (unità SI)	A		
esu, Gaussiana	Fr s^{-1}	$:= (10/\zeta)A \approx 3.335\,64 \times 10^{-10} \text{ A}$	10
biot (emu)	Bi	$= 10 \text{ A}$	
ua	eE_h/\hbar	$\approx 6.623\,617\,63(17) \times 10^{-3} \text{ A}$	
<i>carica elettrica, Q</i>			
coulomb (unità SI)	C	$= 1 \text{ A s}$	
franklin (esu, Gaussiano)	Fr	$:= (10/\zeta)C \approx 3.335\,64 \times 10^{-10} \text{ C}$	10
emu (abcoulomb)	Bi s	$= 10 \text{ C}$	
carica del protone (ua)	e	$\approx 1.602\,176\,487(40) \times 10^{-19} \text{ C} \approx$ $4.803\,21 \times 10^{-10} \text{ Fr}$	

(7) Sfortunatamente, il nome “amagat” è usato come unità sia per il volume molare che per la densità di quantità di sostanza. Il suo valore è leggermente differente per gas differenti, in relazione alla deviazione dal comportamento ideale del gas considerato.

(8) L’unità röntgen, R, è impiegata per esprimere l’esposizione ai raggi X o γ . $1 \text{ R} = 2.58 \times 10^{-4} \text{ C kg}^{-1}$.

(9) rem sta per l’espressione inglese ‘röntgen equivalent man’.

(10) ζ è un numero esatto, $\zeta = c_0/(\text{cm s}^{-1}) = 29\,979\,245\,800$.

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Espresso in unità SI</i>	<i>Note</i>
<i>densità di carica, ρ</i>			
unità SI	C m ⁻³	= 1 A s m ⁻³	
esu, Gaussiano	Fr cm ⁻³	:= (10 ⁷ /ζ) C m ⁻³ ≈ 3.335 640 952×10 ⁻⁴ C m ⁻³	10
ua	ea ₀ ⁻³	≈ 1.081 202 300(27)×10 ¹² C m ⁻³	
<i>potenziale elettrico, V, ϕ</i>			
<i>tensione elettrica, U</i>			
volt (unità SI)	V	= 1 J C ⁻¹ = 1 kg m ² s ⁻³ A ⁻¹	
esu, Gaussiano	Fr cm ⁻¹	= ζ×10 ⁻⁸ V = 299.792 458 V	10
“cm ⁻¹ ”	e cm ⁻¹ /4πϵ ₀	≈ 1.439 964 41(36)×10 ⁻⁷ V	11
ua	e/4πϵ ₀ a ₀	= E _h /e ≈ 27.211 383 86(68) V	
volt internazionale medio		= 1.000 34 V	
volt internazionale USA		= 1.000 330 V	
<i>resistenza elettrica, R</i>			
ohm (unità SI)	Ω	= 1 V A ⁻¹ = 1 m ² kg s ⁻³ A ⁻²	
ohm internazionale medio		= 1.000 49 Ω	
ohm internazionale USA		= 1.000 495 Ω	
Gaussiano	s cm ⁻¹	= ζ ² × 10 ⁻⁹ Ω ≈ 8.987 551 787×10 ¹¹ Ω	10
<i>conducibilità, κ, σ</i>			
unità SI	S m ⁻¹	= 1 kg ⁻¹ m ⁻³ s ³ A ²	
Gaussiano	s ⁻¹	= (10 ¹¹ /ζ ²) S m ⁻¹ ≈ 1.112 650 056×10 ⁻¹⁰ S m ⁻¹	10
<i>capacità, C</i>			
farad (unità SI)	F	= 1 kg ⁻¹ m ⁻² s ⁴ A ²	
Gaussiano	cm	:= (10 ⁹ /ζ ²) F ≈ 1.112 650 056×10 ⁻¹² F	10
<i>intensità di campo elettrico, E</i>			
unità SI	V m ⁻¹	= 1 J C ⁻¹ m ⁻¹ = 1 kg m s ⁻³ A ⁻¹	
esu, Gaussiano	Fr ⁻¹ cm ⁻²	:= ζ × 10 ⁻⁶ V m ⁻¹ = 2.997 924 58×10 ⁴ V m ⁻¹	10
“cm ⁻² ”	e cm ⁻² /4πϵ ₀	≈ 1.439 964 41(36)×10 ⁻⁵ V m ⁻¹	11
ua	e/4πϵ ₀ a ₀ ²	= E _h /ea ₀ ≈ 5.142 206 32(13)×10 ¹¹ V m ⁻¹	

(11) Le unità tra virgolette per il potenziale elettrico e fino alla polarizzabilità possono trovar riscontro in letteratura, ma esse non sono unità corrette; l'espressione indicata nella colonna *Simbolo* definisce l'unità in termini di grandezze fisiche ed altre unità, cosicché, per una conversione in SI, le grandezze fisiche richiedono solamente di essere rimpiazzate dai loro valori in SI e le unità devono essere interpretate come unità SI.

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Espresso in unità SI</i>	<i>Note</i>
<i>gradiente di campo elettrico,</i> $E'_{\alpha\beta}$, $q_{\alpha\beta}$ esu, Gaussiano	(unità SI) V m^{-2} $\text{Fr}^{-1} \text{ cm}^{-3}$	$= 1 \text{ J C}^{-1} \text{ m}^{-2} = 1 \text{ kg s}^{-3} \text{ A}^{-1}$ $:= \zeta \times 10^{-4} \text{ V m}^{-2} =$ $2.997\,924\,58 \times 10^6 \text{ V m}^{-2}$	10
“cm ⁻³ ” ua	$e \text{ cm}^{-3} / 4\pi\epsilon_0$ $e / 4\pi\epsilon_0 a_0^3$	$\approx 1.439\,964\,41(36) \times 10^{-3} \text{ V m}^{-2}$ $= E_h / ea_0^2 \approx$ $9.717\,361\,66(24) \times 10^{21} \text{ V m}^{-2}$	11
<i>momento elettrico di dipolo, p, μ</i> (unità SI) esu, Gaussiano	C m Fr cm	$= 1 \text{ A s m}$ $:= (10^{-1}/\zeta) \text{ C m} \approx$ $3.335\,640\,952 \times 10^{-12} \text{ C m}$	10
debye	D	$= 10^{-18} \text{ Fr cm} \approx$ $3.335\,640\,952 \times 10^{-30} \text{ C m}$	
“cm”, lunghezza del dipolo ua	$e \text{ cm}$ ea_0	$\approx 1.602\,176\,487(40) \times 10^{-21} \text{ C m}$ $\approx 8.478\,352\,81(21) \times 10^{-30} \text{ C m}$	11
<i>momento elettrico di quadrupolo,</i> $Q_{\alpha\beta}$, $\Theta_{\alpha\beta}$, eQ (unità SI) esu, Gaussiano	C m^2 Fr cm^2	$= 1 \text{ A s m}^2$ $:= (10^{-3}/\zeta) \text{ C m}^2 \approx$ $3.335\,640\,952 \times 10^{-14} \text{ C m}^2$	10
“cm ² ”, area del quadrupolo ua	$e \text{ cm}^2$ ea_0^2	$\approx 1.602\,176\,487(40) \times 10^{-23} \text{ C m}^2$ $\approx 4.486\,551\,07(11) \times 10^{-40} \text{ C m}^2$	11
<i>polarizzabilità, α</i> (unità SI) esu, Gaussiano	$\text{J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^2$ $\text{Fr}^2 \text{ cm}^3$	$= 1 \text{ F m}^2 = 1 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^4 \text{ A}^2$ $:= (10^5/\zeta^2) \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^2 \approx$ $1.112\,650\,056 \times 10^{-16} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^2$	10
“cm ³ ”, volume polarizzato	$4\pi\epsilon_0 \text{ cm}^3$	$\approx 1.112\,650\,056 \times 10^{-16} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^2$	11
“Å ³ ”	$4\pi\epsilon_0 \text{ Å}^3$	$\approx 1.112\,650\,056 \times 10^{-40} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^2$	11
ua	$4\pi\epsilon_0 a_0^3$	$= e^2 a_0^2 / E_h \approx$ $1.648\,777\,253\,6(34) \times 10^{-41} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^2$	
<i>spostamento dielettrico, D</i> <i>polarizzazione di volume, P</i> unità SI esu, Gaussiano	C m^{-2} Fr cm^{-2}	$= 1 \text{ A s m}^{-2}$ $:= (10^5/\zeta) \text{ C m}^{-2} \approx$ $3.335\,640\,952 \times 10^{-6} \text{ C m}^{-2}$	12
<i>densità di flusso magnetico</i> (<i>campo magnetico</i>) tesla (unità SI) gauss (emu, Gaussiano) ua	T G \hbar/ea_0^2	$= 1 \text{ J A}^{-1} \text{ m}^{-2} = 1 \text{ V s m}^{-2} = 1 \text{ Wb m}^{-2}$ $= 10^{-4} \text{ T}$ $\approx 2.350\,517\,382(59) \times 10^5 \text{ T}$	

(12) L'uso dell'unità esu o Gaussiana per lo spostamento dielettrico implica normalmente che si indica lo spostamento non-razionalizzato come $D^{(ir)} = 4\pi D$ (vedi Sez. 7.3, p. 143).

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Espresso in unità SI</i>	<i>Note</i>
<i>flusso magnetico, Φ</i>			
weber (unità SI)	Wb	$= 1 \text{ J A}^{-1} = 1 \text{ V s} = 1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2} \text{ A}^{-1}$	
maxwell (emu, Gaussiano)	Mx	$= 10^{-8} \text{ Wb} [= 1 \text{ G cm}^2]$	
<i>intensità di campo magnetico, H</i>			
(unità SI)	A m^{-1}		
oersted (emu, Gaussiano)	Oe	$= (10^3/4\pi) \text{ A m}^{-1}$	13
<i>magnetizzazione (di volume), M</i>			
(unità SI)	A m^{-1}		
gauss (emu, Gaussiano)	G	$= 10^3 \text{ A m}^{-1}$	13
<i>momento magnetico di dipolo, m, μ</i>			
(unità SI)	J T^{-1}	$= 1 \text{ A m}^2$	
emu, Gaussiano	erg G^{-1}	$= 10 \text{ A cm}^2 = 10^{-3} \text{ J T}^{-1}$	
magnetone di Bohr	μ_B	$:= e\hbar/2m_e \approx$ $9.274\ 009\ 15(23) \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$	14
ua	$e\hbar/m_e$	$:= 2\mu_B \approx 1.854\ 801\ 830(46) \times 10^{-23} \text{ J T}^{-1}$	
magnetone nucleare	μ_N	$:= (m_e/m_p)\mu_B \approx$ $5.050\ 783\ 24(13) \times 10^{-27} \text{ J T}^{-1}$	
<i>magnetizzabilità, ξ</i>			
(unità SI)	J T^{-2}	$= 1 \text{ A}^2 \text{ s}^2 \text{ m}^2 \text{ kg}^{-1}$	
Gaussiano	erg G^{-2}	$= 10 \text{ J T}^{-2}$	
ua	$e^2 a_0^2 / m_e$	$\approx 7.891\ 036\ 433(27) \times 10^{-29} \text{ J T}^{-2}$	
<i>suscettività magnetica, χ, κ</i>			
(unità SI)	1		
emu, Gaussiano	1		15
<i>suscettività magnetica molare, χ_m</i>			
(unità SI)	$\text{m}^3 \text{ mol}^{-1}$		
emu, Gaussiano	$\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1}$	$= 10^{-6} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$	16
<i>induttanza, autoinduttanza, L</i>			
henry (unità SI)	H	$= 1 \text{ V s A}^{-1} = 1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2} \text{ A}^{-2}$	
Gaussiano	$\text{s}^2 \text{ cm}^{-1}$	$= \zeta^2 \times 10^{-9} \text{ H} \approx 8.987\ 551\ 787 \times 10^{11} \text{ H}$	10
emu	cm	$= 10^{-9} \text{ H}$	

(13) In pratica l'oersted, Oe, è usato soltanto come unità per $H^{(\text{ir})} = 4\pi H$, quindi quando $H^{(\text{ir})} = 1 \text{ Oe}$, $H = (10^3/4\pi) \text{ A m}^{-1}$ (vedi Sez. 7.3, p. 143). Nei sistemi Gaussiano o emu, gauss e oersted sono unità equivalenti.

(14) Il magnetone di Bohr μ_B è talora indicato con MB o con M.B., entrambi non raccomandati.

(15) In pratica le suscettività citate in un contesto di unità emu o Gaussiane sono sempre valori di $\chi^{(\text{ir})} = \chi/4\pi$; perciò, quando $\chi^{(\text{ir})} = 10^{-6}$, $\chi = 4\pi \times 10^{-6}$ (vedi Sez. 7.3, p. 143).

(16) In pratica le unità $\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ implicano normalmente che la suscettività molare non razionalizzata è indicata come $\chi_m^{(\text{ir})} = \chi_m/4\pi$; quindi, per esempio, se $\chi_m^{(\text{ir})} = -15 \times 10^{-6} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$, che è spesso scritto “-15 cgs ppm”, $\chi_m = -1.88 \times 10^{-10} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$ (vedi Sez. 7.3, p. 143).

7.3 I SISTEMI DI UNITÀ ESU, EMU, GAUSSIANO E ATOMICO IN RELAZIONE AL SI

Le equazioni ISQ (vedi Sez. 1.2, p. 4) della teoria elettromagnetica sono normalmente usate con le grandezze fisiche espresse in unità SI, in particolare le quattro unità base metro (m), kilogrammo (kg), secondo (s) ed ampere (A) rispettivamente per la lunghezza, la massa, il tempo e la corrente elettrica. Le equazioni base per la forza elettrostatica \mathbf{F}_{es} tra particelle di carica Q_1 e Q_2 nel vuoto e per la forza elettromagnetica infinitesimale $d^2\mathbf{F}_{\text{em}}$ tra elementi di conduttore di lunghezza $d\mathbf{l}_1$ e $d\mathbf{l}_2$ e le corrispondenti correnti I_1 e I_2 nel vuoto, sono

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_{\text{es}} &= Q_1 Q_2 \mathbf{r} / 4\pi\epsilon_0 r^3 \\ d^2\mathbf{F}_{\text{em}} &= (\mu_0/4\pi) I_1 d\mathbf{l}_1 \times (I_2 d\mathbf{l}_2 \times \mathbf{r}) / r^3\end{aligned}$$

dove particelle ed elementi di conduttore sono separati dal vettore \mathbf{r} (with $|\mathbf{r}| = r$). La grandezza fisica ϵ_0 , costante elettrica (in precedenza chiamata permittività del vuoto), è definita nel SI in modo da avere il valore

$$\epsilon_0 = (10^7/4\pi c_0^2) \text{ kg}^{-1} \text{ m}^{-1} \text{ C}^2 \approx 8.854\,187\,817 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ m}^{-1} \text{ J}^{-1}$$

Analogamente, la grandezza fisica μ_0 , costante magnetica (in precedenza chiamata permeabilità del vuoto), ha il valore

$$\mu_0 := 4\pi \times 10^{-7} \text{ N A}^{-2} \approx 1.256\,637\,061\,4 \times 10^{-6} \text{ N A}^{-2}$$

nel SI. In sistemi di unità differenti ϵ_0 e μ_0 possono avere valori numerici differenti ed essere espressi in unità differenti. In questo manuale, si usano ϵ_0 e μ_0 come abbreviazioni dei valori SI dati in precedenza e si preferisce usare i simboli più generali k_{es} e k_{em} per indicare queste grandezze in altri sistemi di unità ed equazioni come verrà discusso successivamente. Il valore SI di μ_0 risulta dalla definizione dell'ampere (Sez. 3.3, p. 87). Il valore di ϵ_0 risulta dalla relazione di Maxwell

$$\epsilon_0 \mu_0 = 1/c_0^2$$

dove c_0 è la velocità della luce nel vuoto (vedi Cap. 5, p. 111).

Più in generale, seguendo idee elaborate in [153] e [154], le equazioni base per le forze elettrostatiche ed elettromagnetiche possono essere scritte come

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_{\text{es}} &= k_{\text{es}} \frac{Q_1 Q_2 \mathbf{r}}{r^3} \\ d^2\mathbf{F}_{\text{em}} &= \frac{k_{\text{em}}}{k^2} \frac{I_1 d\mathbf{l}_1 \times (I_2 d\mathbf{l}_2 \times \mathbf{r})}{r^3}\end{aligned}$$

dove le tre costanti k_{es} , k_{em} e k soddisfano una più generale relazione di Maxwell

$$k^2 \cdot k_{\text{es}}/k_{\text{em}} = c_0^2$$

L'introduzione di tre costanti è necessaria per descrivere in modo coerente il sistema di unità e di equazioni che si usano normalmente nella teoria elettromagnetica. Esse sono, in aggiunta a quelle usate nel SI, quelle usate nei sistemi esu (unità elettrostatica), emu (unità elettromagnetica), Gaussiano e nel sistema delle unità atomiche. Le costanti k , k_{es} e k_{em} hanno i valori convenzionali indicati nella tabella che segue.

	<i>SI</i>	<i>esu</i>	<i>emu</i>	<i>Gaussiano</i>	<i>unità atomica</i>	<i>Note</i>
k	1	1	1	$\zeta \text{ cm s}^{-1}$	1	1
k_{es}	$1/4\pi\epsilon_0$	1	$\zeta^2 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-2}$	1	1	2
k_{em}	$\mu_0/4\pi$	$(1/\zeta^2) \text{ s}^2 \text{ cm}^{-2}$	1	1	α^2	3, 4

(1) ζ è un numero esatto, $\zeta = c_0/(\text{cm s}^{-1}) = 29\,979\,245\,800$, vedi p. 135.

(2) $1/4\pi\epsilon_0 = \zeta^2 \times 10^{-11} \text{ N A}^{-2} \text{ m}^2 \text{ s}^{-2}$

(3) $\mu_0/4\pi = 10^{-7} \text{ N A}^{-2}$

(4) α è la costante di struttura fine con $\alpha^{-1} = 137.035\,999\,679(94)$ (vedi Cap. 5, p. 111).

Questa tabella può essere usata insieme ai contenuti della Sez. 7.4, p. 147 per trasformare espressioni che coinvolgono grandezze elettromagnetiche espresse in sistemi diversi di unità. Si veda, in particolare, nel sistema Gaussiano, $k = c_0$. Ciò garantisce, insieme alla relazione generale delle equazioni di Maxwell fornite nella Sez. 7.4, che la velocità della luce nel vuoto risulti essere c_0 nel sistema Gaussiano. Esempi di trasformazioni tra il SI ed il sistema Gaussiano sono anche forniti nella Sez. 7.4.

Osservazioni aggiuntive

(i) Il sistema esu

Nel sistema esu, le unità base sono il centimetro (cm), il grammo (g) ed il secondo (s) rispettivamente per la lunghezza, massa e tempo. Il franklin, simbolo Fr (vedi nota ¹ a piè di pagina) per l'unità elettrostatica di carica può essere eventualmente introdotto come una quarta unità base. Due particelle con carica elettrica di un franklin, distanti un centimetro nel vuoto, si respingono con una forza di $1 \text{ din} = 1 \text{ cm g s}^{-2}$. Da questa definizione, si ottiene la relazione $1 \text{ Fr} = (10/\zeta) \text{ C}$ (vedi l'esempio 7, Sez. 7.1, p. 133). Poiché $k_{\text{es}} = 1$ dalla definizione generale di forza elettrostatica fornita precedentemente, l'equazione $\text{Fr} = \text{erg}^{1/2} \text{ cm}^{1/2}$ è valida nel sistema esu, dove $\text{erg}^{1/2} \text{ cm}^{1/2}$ è l'unità esu di carica. In questo manuale il franklin è quindi usato per comodità per indicare l'unità esu di carica.

(ii) Il sistema emu

Nel sistema emu, le unità base sono il centimetro (cm), il grammo (g) ed il secondo (s), rispettivamente per la lunghezza, la massa ed il tempo. Il biot (simbolo Bi) per l'unità elettromagnetica di corrente elettrica può essere eventualmente introdotto come una quarta unità base. Due fili lunghi e separati dalla distanza di un centimetro percorsi da correnti elettriche di un biot nella stessa direzione, si attirano nel vuoto con una forza per unità di lunghezza (forza lineica) di 2 din cm^{-1} . Da questa definizione si ottiene la relazione $1 \text{ Bi} = 10 \text{ A}$. Poiché $k_{\text{em}} = 1$ dalla relazione generale per la forza elettromagnetica fornita precedentemente, l'equazione $\text{Bi} = \text{dyn}^{1/2}$ è valida nel sistema emu, dove $\text{dyn}^{1/2}$ è l'unità emu di corrente elettrica. Il biot è stato spesso usato come un'espressione compatta per indicare l'unità emu di corrente elettrica.

(iii) Il sistema Gaussiano

Nel sistema Gaussiano, i sistemi esu e emu sono usati mescolati insieme. Per la relazione tra il franklin ed il biot e le unità SI si ottiene immediatamente

$$1 \text{ Bi} = \zeta \text{ Fr s}^{-1}$$

Poiché $k_{\text{es}} = 1$ e $k_{\text{em}} = 1$, il valore della costante k è definita essere c_0 dalla più generale relazione di Maxwell fornita innanzi. In trattati sulla teoria della relatività, a k è talora assegnato il valore 1, che corrisponde ad una trasformazione dell'asse del tempo da coordinate t a coordinate $x = c_0 t$.

¹ Il nome "franklin", symbol Fr, per l'unità esu di carica fu proposto da Guggenheim [155], ma non è stato mai ampiamente adottato. Anche il nome "statcoulomb" è stato usato per l'unità esu di carica.

(iv) Il sistema di unità atomiche

Nel sistema di unità atomiche [22] (vedi anche la Sez. 3.9.1, p. 94), le cariche sono date in unità della carica elementare e , le correnti in unità eE_h/\hbar , dove E_h è l'hartree e \hbar è la costante di Planck divisa per 2π , le lunghezze in unità che possono essere sia il bohr che a_0 , le intensità di campo elettrico in unità E_h/ea_0 , la densità di flusso magnetico in unità \hbar/ea_0^2 . I fattori di conversione da queste ed altre unità atomiche alle unità SI sono riportate nelle Sez. 3.9.1 e 7.2, p. 94 e 135. Quindi, poiché convenzionalmente $k = 1$, ne consegue che in questo sistema $k_{es} = 1$ (vedi la nota a a piè di pagina ²) e $k_{em} = \alpha^2$ (vedi la nota a a piè di pagina ³).

(v) Grandezze non-razionalizzate

La costante numerica 4π è introdotta nelle definizioni di ε_0 e μ_0 a causa della simmetria sferica che le equazioni che definiscono \mathbf{F}_{es} e $d^2\mathbf{F}_{em}$ comportano; in tal modo, si evita di doverle riportare in equazioni successive, ad esempio nelle equazioni di Maxwell. Quando i fattori 4π sono introdotti in questo modo, come accade per il SI, le equazioni sono anche chiamate “razionalizzate”.

Inoltre, è norma includere il fattore 4π nelle seguenti grandezze quando si converte l'equazione elettromagnetica dal sistema SI a quelli esu, emu, Gaussiano o delle unità atomiche:

$$\begin{aligned} D^{(ir)} &= 4\pi D \\ H^{(ir)} &= 4\pi H \\ \chi_e^{(ir)} &= \chi_e/4\pi \\ \chi^{(ir)} &= \chi/4\pi \end{aligned}$$

dove l'apice (ir) sta per irrazionale, significando non-razionalizzato e che indica il valore della grandezza corrispondente in un sistema di unità “non-razionalizzato”, in contrasto con il sistema SI, che è “razionalizzato” nel senso descritto in precedenza.

La permeabilità magnetica μ è data da $\mu = \mu_r k_{em} 4\pi = \mu_r \mu_0$ nel SI, e da $\mu = \mu_r k_{em}$ nei sistemi non razionalizzati. μ_r è la permeabilità relativa adimensionale ed è definita in termini della suscettività magnetica nella Sez. 7.4, p. 148. La permittività elettrica ε è data da $\varepsilon = \varepsilon_r 4\pi/k_{es} = \varepsilon_r \cdot \varepsilon_0$ nel SI, e da $\varepsilon = \varepsilon_r/k_{es}$ nei sistemi di unità non razionalizzati. ε_r è la permittività relativa adimensionale ed è definita in termini della suscettività elettrica nella Sez. 7.4, p. 147.

² Poiché $E_h = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0}$, $E = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Q}{r^2} = \frac{E_h a_0}{e^2} \frac{Q}{r^2} = \frac{E_h}{ea_0} \frac{(Q/e)}{(r/a_0)^2}$.

³ Poiché il valore della velocità della luce in unità atomiche è il reciproco della costante di struttura fine, α^{-1} , la condizione $k^2 k_{es}/k_{em} = c_0^2$ porta a $k_{em} = \alpha^2$ in unità atomiche per $k = 1$.

7.4 TRASFORMAZIONE DELLE EQUAZIONI DELLA TEORIA ELETTROMAGNETICA TRA LE FORME ISQ(SI) E GAUSSIANA

<i>Relazione generale</i>	<i>ISQ(SI)</i>	<i>Gaussiana</i>
Forza tra due particelle localizzate cariche nel vuoto (legge di Coulomb):		
$\mathbf{F} = k_{\text{es}} Q_1 Q_2 \mathbf{r} / r^3$	$\mathbf{F} = Q_1 Q_2 \mathbf{r} / 4\pi\epsilon_0 r^3$	$\mathbf{F} = Q_1 Q_2 \mathbf{r} / r^3$
Potenziale elettrostatico attorno ad una particella localizzata carica nel vuoto:		
$\phi = k_{\text{es}} Q / r$	$\phi = Q / 4\pi\epsilon_0 r$	$\phi = Q / r$
Relazione tra intensità di campo elettrico e potenziale elettrostatico:		
$\mathbf{E} = -\nabla\phi$	$\mathbf{E} = -\nabla\phi$	$\mathbf{E} = -\nabla\phi$
Campo dovuto ad una distribuzione di cariche ρ nel vuoto (legge di Gauss):		
$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi k_{\text{es}} \rho$	$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho / \epsilon_0$	$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi \rho$
Momento elettrico di dipolo di una distribuzione di cariche:		
$\mathbf{p} = \int \rho \mathbf{r} dV$	$\mathbf{p} = \int \rho \mathbf{r} dV$	$\mathbf{p} = \int \rho \mathbf{r} dV$
Potenziale attorno ad un dipolo nel vuoto:		
$\phi = k_{\text{es}} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / r^3$	$\phi = \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / 4\pi\epsilon_0 r^3$	$\phi = \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / r^3$
Energia di una distribuzione di cariche in un campo elettrico:		
$E = Q\phi - \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} + \dots$	$E = Q\phi - \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} + \dots$	$E = Q\phi - \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} + \dots$
Momento elettrico di dipolo indotto da un campo elettrico:		
$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E} + \dots$	$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E} + \dots$	$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E} + \dots$
Polarizzazione dielettrica:		
$\mathbf{P} = \chi_e \mathbf{E} / 4\pi k_{\text{es}}$	$\mathbf{P} = \chi_e \epsilon_0 \mathbf{E}$	$\mathbf{P} = \chi_e^{(\text{ir})} \mathbf{E}$
Susceptività elettrica e permittività relativa:		
$\epsilon_r = 1 + \chi_e$	$\epsilon_r = 1 + \chi_e$	$\epsilon_r = 1 + 4\pi \chi_e^{(\text{ir})}$
Spostamento dielettrico ¹ :		
$\mathbf{D} = \mathbf{E} / 4\pi k_{\text{es}} + \mathbf{P}$	$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$	$\mathbf{D}^{(\text{ir})} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}$
$\mathbf{D} = \epsilon_r \mathbf{E} / 4\pi k_{\text{es}}$	$\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E}$	$\mathbf{D}^{(\text{ir})} = \epsilon_r \mathbf{E}$
Capacità di un condensatore ad elettrodi paralleli, area A , distanza d :		
$C = \epsilon_r A / 4\pi k_{\text{es}} d$	$C = \epsilon_0 \epsilon_r A / d$	$C = \epsilon_r A / 4\pi d$
Forza tra due elementi di corrente nel vuoto:		
$d^2 \mathbf{F} = \frac{k_{\text{em}}}{k^2} \frac{I_1 d\mathbf{l}_1 \times (I_2 d\mathbf{l}_2 \times \mathbf{r})}{r^3}$	$d^2 \mathbf{F} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{I_1 d\mathbf{l}_1 \times (I_2 d\mathbf{l}_2 \times \mathbf{r})}{r^3}$	$d^2 \mathbf{F} = \frac{I_1 d\mathbf{l}_1 \times (I_2 d\mathbf{l}_2 \times \mathbf{r})}{c_0^2 r^3}$
Vettore di potenziale magnetico dovuto ad un elemento di corrente nel vuoto:		
$d\mathbf{A} = \frac{k_{\text{em}}}{k} I d\mathbf{l} / r$	$d\mathbf{A} = \frac{\mu_0}{4\pi} I d\mathbf{l} / r$	$d\mathbf{A} = I d\mathbf{l} / c_0 r$
Relazione tra la densità di flusso magnetico ed il vettore di potenziale magnetico:		
$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$	$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$	$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$
Densità di flusso magnetico dovuta ad un elemento di corrente nel vuoto (legge di Biot-Savart):		
$d\mathbf{B} = \frac{k_{\text{em}}}{k} I d\mathbf{l} \times \mathbf{r} / r^3$	$d\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} I d\mathbf{l} \times \mathbf{r} / r^3$	$d\mathbf{B} = I d\mathbf{l} \times \mathbf{r} / c_0 r^3$

(1) La seconda equazione è valida per un mezzo isotropo.

Densità di flusso magnetico dovuta ad una densità di corrente \mathbf{j} nel vuoto (legge di Ampère):

$$\nabla \times \mathbf{B} = 4\pi \frac{k_{\text{em}}}{k} \mathbf{j} \qquad \nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} \qquad \nabla \times \mathbf{B} = 4\pi \mathbf{j} / c_0$$

Forza esercitata su un elemento di corrente in una densità di flusso magnetico:

$$d\mathbf{F} = I d\mathbf{l} \times \mathbf{B} / k \qquad d\mathbf{F} = I d\mathbf{l} \times \mathbf{B} \qquad d\mathbf{F} = I d\mathbf{l} \times \mathbf{B} / c_0$$

Dipolo magnetico di una spira di corrente di area \mathbf{A} :

$$\mathbf{m} = I \mathbf{A} / k \qquad \mathbf{m} = I \mathbf{A} \qquad \mathbf{m} = I \mathbf{A} / c_0$$

Vettore di potenziale magnetico attorno ad un dipolo magnetico nel vuoto:

$$\mathbf{A} = k_{\text{em}} \mathbf{m} \times \mathbf{r} / r^3 \qquad \mathbf{A} = \frac{\mu_0}{4\pi} \mathbf{m} \times \mathbf{r} / r^3 \qquad \mathbf{A} = \mathbf{m} \times \mathbf{r} / r^3$$

Energia di un dipolo magnetico in una densità di flusso magnetico:

$$E = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B} \qquad E = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B} \qquad E = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$$

Dipolo magnetico indotto da una densità di flusso magnetico:

$$\mathbf{m} = \xi \mathbf{B} + \dots \qquad \mathbf{m} = \xi \mathbf{B} + \dots \qquad \mathbf{m} = \xi \mathbf{B} + \dots$$

Magnetizzazione:

$$\mathbf{M} = \chi \mathbf{H} \qquad \mathbf{M} = \chi \mathbf{H} \qquad \mathbf{M} = \chi^{(\text{ir})} \mathbf{H}^{(\text{ir})}$$

Suscettività magnetica e permeabilità relativa:

$$\mu_r = 1 + \chi \qquad \mu_r = 1 + \chi \qquad \mu_r = 1 + 4\pi \chi^{(\text{ir})}$$

Intensità di campo magnetico¹:

$$\mathbf{H} = \mathbf{B} / 4\pi k_{\text{em}} - \mathbf{M} \qquad \mathbf{H} = \mathbf{B} / \mu_0 - \mathbf{M} \qquad \mathbf{H}^{(\text{ir})} = \mathbf{B} - 4\pi \mathbf{M}$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{B} / 4\pi \mu_r k_{\text{em}} \qquad \mathbf{H} = \mathbf{B} / \mu_0 \mu_r \qquad \mathbf{H}^{(\text{ir})} = \mathbf{B} / \mu_r$$

Conducibilità:

$$\mathbf{j} = \kappa \mathbf{E} \qquad \mathbf{j} = \kappa \mathbf{E} \qquad \mathbf{j} = \kappa \mathbf{E}$$

Autoinduttanza di un solenoide di volume V con n spire per unità di lunghezza:

$$L = 4\pi \frac{k_{\text{em}}}{k^2} \mu_r n^2 V \qquad L = \mu_0 \mu_r n^2 V \qquad L = 4\pi \mu_r n^2 V / c_0^2$$

Legge di Faraday sull'induzione:

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{k} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \mathbf{0} \qquad \nabla \times \mathbf{E} + \partial \mathbf{B} / \partial t = \mathbf{0} \qquad \nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c_0} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \mathbf{0}$$

Relazione tra l'intensità di campo elettrico ed i potenziali elettromagnetici:

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi - \frac{1}{k} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \qquad \mathbf{E} = -\nabla \phi - \partial \mathbf{A} / \partial t \qquad \mathbf{E} = -\nabla \phi - \frac{1}{c_0} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

Equazioni di Maxwell:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho & \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho & \nabla \cdot \mathbf{D}^{(\text{ir})} &= 4\pi \rho \\ k \nabla \times \mathbf{H} - \partial \mathbf{D} / \partial t &= \mathbf{j} & \nabla \times \mathbf{H} - \partial \mathbf{D} / \partial t &= \mathbf{j} & \nabla \times \mathbf{H}^{(\text{ir})} - \frac{1}{c_0} \frac{\partial \mathbf{D}^{(\text{ir})}}{\partial t} &= \frac{4\pi}{c_0} \mathbf{j} \\ k \nabla \times \mathbf{E} + \partial \mathbf{B} / \partial t &= \mathbf{0} & \nabla \times \mathbf{E} + \partial \mathbf{B} / \partial t &= \mathbf{0} & \nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c_0} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= \mathbf{0} \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \end{aligned}$$

Equazioni d'onda per i potenziali elettromagnetici ϕ e \mathbf{A} (nella scelta (o gauge) di Lorentz):

$$\Delta\phi - \frac{k_{\text{em}}}{k^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -4\pi k_{\text{es}} \rho$$

$$\Delta\phi - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -\rho / \varepsilon_0$$

$$\Delta\phi - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -4\pi \rho$$

$$\Delta\mathbf{A} - \frac{k_{\text{em}}}{k^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -4\pi k_{\text{em}} \mathbf{j}$$

$$\Delta\mathbf{A} - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\mu_0 \mathbf{j}$$

$$\Delta\mathbf{A} - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c_0} \mathbf{j}$$

$$\nabla\mathbf{A} + \frac{k_{\text{em}}}{k} \frac{\partial\phi}{\partial t} = 0$$

$$\nabla\mathbf{A} + \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial\phi}{\partial t} = 0$$

$$\nabla\mathbf{A} + \frac{1}{c_0} \frac{\partial\phi}{\partial t} = 0$$

Densità di energia di radiazione:

$$U/V = (\mathbf{E} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{H}) / 2$$

$$U/V = (\mathbf{E} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{H}) / 2$$

$$U/V = (\mathbf{E} \cdot \mathbf{D}^{(\text{ir})} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{H}^{(\text{ir})}) / 8\pi$$

Velocità di flusso di energia di radiazione (vettore di Poynting):

$$\mathbf{S} = k \mathbf{E} \times \mathbf{H}$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$$

$$\mathbf{S} = \frac{c_0}{4\pi} \mathbf{E} \times \mathbf{H}^{(\text{ir})}$$

Forza su una carica Q in moto a velocità \mathbf{v} (forza di Lorentz):

$$\mathbf{F} = Q (\mathbf{E} + \mathbf{v}/k \times \mathbf{B})$$

$$\mathbf{F} = Q (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

$$\mathbf{F} = Q (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}/c_0)$$

8 STIMA DELL'INCERTEZZA

È essenziale valutare una stima dell'incertezza quando si riportano valori sperimentali. In altre parole, ogniqualvolta si riportano risultati sperimentali (o teorici) quantitativi deve anche essere riportata la “miglior stima attesa del valore della grandezza oggetto di valutazione, come pure riguardo all'intervallo dei possibili valori, specificando una stima dell'incertezza. La dispersione attesa dei valori delle misure deriva da diverse fonti. Il contributo all'incertezza totale di tutte queste fonti dev'essere stimato mediante un bilancio (budget) di incertezza. Le tabelle che seguono mostrano alcuni dei modi in cui i contributi al bilancio di incertezza possono essere stimati e combinati, e gli esempi che seguono mostrano come si può ottenere una valutazione completa combinando insieme i vari contributi all'incertezza. Il presente sommario è parzialmente basato su [8].

8.1 VALUTAZIONE DELL'INCERTEZZA PER UNA SINGOLA GRANDEZZA MISURATA

L'incertezza per una grandezza misurata X può essere riportata in diversi modi, fornendo la miglior stima attesa per il valore della grandezza insieme ad un secondo valore numerico che indica l'incertezza corrispondente al probabile intervallo di variabilità del valore della grandezza. Si usa la notazione X per le grandezze misurate, x per i risultati delle misurazioni ed u_c per l'incertezza tipo.

Esempio 1. $m_s = 100.021\,47$ g con una incertezza tipo combinata (cioè l'incertezza tipo stimata) $u_c = 0.35$ mg. Se si assume che i possibili valori stimati dello standard siano distribuiti normalmente con uno scarto tipo approssimato u_c , ne consegue che il valore ignoto della grandezza possa stare nell'intervallo $m_s \pm u_c$ con un livello di confidenza di circa il 68 %.

Esempio 2. $m_s = (100.021\,47 \pm 0.000\,70)$ g, dove il numero che segue il simbolo \pm è il valore numerico dell'incertezza estesa $U = k u_c$, con U stimata mediante l'incertezza tipo combinata (cioè lo scarto tipo stimato) $u_c = 0.35$ mg ed un fattore di copertura $k = 2$. Se si assume che i possibili valori stimati dello standard siano distribuiti normalmente con scarto tipo approssimato u_c , ne consegue che il valore ignoto della grandezza possa stare nell'intervallo definito da U con un livello di confidenza del 95 % (vedi Sez. 8.3, p. 156).

Esempio 3. $m_s = 100.021\,47(35)$ g, dove il numero tra parentesi indica lo scarto tipo combinato $u_c = 0.35$ mg che si assume applicato alle ultime cifre.

Nome	Simbolo	Definizione	Note
Distribuzioni di probabilità			
distribuzione di probabilità di X	$f(X)$	Densità di probabilità della grandezza X : normale (Gaussiana), rettangolare, triangolare, Student- t , ecc.	
valore atteso di X	$E[X]$	$E[X] = \int x f(x) dx$	
media	μ	$E[X]$	
varianza	σ^2	$E[(X - \mu)^2]$	
deviazione standard	σ	$\sigma = \sqrt{\sigma^2}$	
Statistica			
numero di misure	N		
media aritmetica	\bar{x}	$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$	
stima della varianza	$s^2(x)$	$s^2(x) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2$	1
scarto tipo	$s(x)$	$s(x) = \sqrt{s^2(x)}$	
scarto tipo della media	$s(\bar{x})$	$s(\bar{x}) = s(x)/\sqrt{N}$	

(1) Questa è una stima non polarizzata e tiene conto della rimozione di un grado di libertà dovuta al fatto che la dispersione è misurata rispetto alla media.

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Definizione</i>	<i>Note</i>
Incertezza			
incertezza tipo di x_i	$u(x_i)$	Stimata con metodi di valutazione Tipo A o Tipo B	2
valutazione Tipo A		La valutazione Tipo A (dell'incertezza standard) è un metodo di valutazione dell'incertezza standard basato sull'analisi statistica di una serie di osservazioni	3
valutazione Tipo B		La valutazione Tipo B (dell'incertezza standard) è un metodo di valutazione dell'incertezza standard basato su metodi diversi dall'analisi statistica di una serie di osservazioni (per esempio, può essere basata su un giudizio scientifico che usi tutte le informazioni disponibili)	4
incertezza tipo relativa di x	$u_r(x_i)$	$u_r(x_i) = u(x_i)/ x_i $ ($x_i \neq 0$)	
incertezza standard composta del risultato della misura y	$u_c(y)$	Incertezza stimata di y in base a tutti i risultati della misura, dove $y = f(x_1, x_2, \dots, x_M)$	5
incertezza tipo relativa composta y	$u_{c,r}(y)$	$u_{c,r}(y) = u_c(y)/ y $ ($y \neq 0$)	
incertezza estesa	$U(y)$	$U(y) = k u_c(y)$	6
fattore di copertura	k		6

(Note, continua)

(2) L'incertezza del risultato di una misura consiste in genere di vari componenti, che possono essere raggruppati in due categorie, basate sul modo con cui il loro valore numerico è stimato:

Tipo A: quelli che sono valutati con metodi statistici

Tipo B: quelli che sono stimati in modi diversi dai metodi statistici

Un rapporto dettagliato deve consistere in una lista completa dei componenti, specificando per ciascuno di essi il metodo usato per valutarlo. Tale rapporto costituisce il "bilancio (budget) di incertezza".

(3) Esempi di valutazione Tipo A sono il calcolo della deviazione standard della media di una serie di osservazioni indipendenti; l'uso del metodo dei minimi quadrati per approssimare i dati mediante una funzione, per stimare i parametri della funzione e la deviazione standard ad essi associata; l'analisi della varianza (ANOVA) per identificare e quantificare effetti casuali in certi tipi di misure. Queste componenti dell'incertezza sono caratterizzate dalle varianze stimate s_i^2 (deviazione standard o "scarto tipo" stimato s_i) e dal numero di gradi di libertà ν_i . Quando necessario, si devono stimare anche le covarianze.

(4) Questa conoscenza può includere dati di misure precedenti, informazioni generali sul comportamento e sulle proprietà di materiali e strumenti, specifiche dei costruttori, dati forniti da tarature o altri rapporti. Queste componenti dell'incertezza sono caratterizzate da incertezze u_i^2 che possono essere considerate approssimazioni delle corrispondenti varianze, di cui si ipotizza l'esistenza. Le grandezze u_i^2 vengono trattate come varianze stimate e le grandezze u_i come deviazioni standard (o "scarti tipo") stimati.

8.2 PROPAGAZIONE DELL'INCERTEZZA PER MISURE NON CORRELATE

Per una discussione della correlazione nell'incertezza delle X_i si veda [8].

Equazione di misura	Risultato di misura	Equazione della incertezza tipo	Note
$Y = \sum_{k=1}^N a_k X_k$	$y = \sum_{k=1}^N a_k x_k$	$u_c(y) = \left(\sum_{k=1}^N a_k^2 u^2(x_k) \right)^{1/2}$	1
$Y = AX_1^{a_1} \cdots X_h^{a_h} \cdots X_N^{a_N}$	$y = Ax_1^{a_1} \cdots x_h^{a_h} \cdots x_N^{a_N}$	$u_{c,r}(y) = \left(\sum_{h=1}^N a_h^2 u_r^2(x_h) \right)^{1/2}$	2

(1) Questo metodo è talvolta chiamato somma in quadratura. L'equazione di misura consiste nella somma delle grandezze X_i moltiplicate per costanti a_k . Si assume qui che le a_k , derivanti dal modello adottato, siano note con certezza.

(2) L'equazione di misura consiste qui nel prodotto di grandezze X_h elevate a potenze a_1, a_2, \dots, a_N e moltiplicate per una costante A . Si assume qui che A e le a_h siano note con certezza.

(Note, continua)

(4) (continua)

Esempi di valutazione Tipo B:

- (a) Se è ragionevole assumere che la grandezza X possa essere modellata mediante una distribuzione normale, i limiti inferiore e superiore a_- ed a_+ dovrebbero essere stimati in modo tale che la miglior stima del valore della grandezza sia $x = (a_- + a_+)/2$ (cioè centrata rispetto ai limiti) e che ci sia un caso su due (cioè una probabilità del 50 %) che il valore della grandezza si trovi nell'intervallo da a_- ad a_+ , cioè che $u(x) \approx 1.48(a_+ - a_-)/2$.
- (b) Se invece la grandezza X è meglio modellata da una distribuzione di probabilità rettangolare, allora i limiti inferiore e superiore a_- ed a_+ della grandezza X dovrebbero essere stimati in modo che la probabilità che il suo valore sia compreso nell'intervallo da a_- a a_+ sia del 100 %. Non esistendo informazioni contrastanti, si tratta la grandezza con valori equiprobabili in tutti i punti dell'intervallo da a_- ad a_+ ; ciò viene chiamato modello uniforme (o rettangolare) per la distribuzione di probabilità associata. La miglior stima del valore della grandezza è in questo caso ancora $x = (a_- + a_+)/2$ ma con un'incertezza tipo associata $u(x) = (a_+ - a_-)/2\sqrt{3}$.
- (5) La grandezza Y , chiamata misurando, non è misurata direttamente, ma è determinata mediante altre N grandezze X_1, X_2, \dots, X_N tramite una funzione f (talora chiamata equazione di misura), $Y = f(X_1, X_2, \dots, X_N)$. Le grandezze X_i includono le correzioni (o fattori di correzione) cioè le grandezze che tengono conto di altri fattori di variabilità, quali differenti osservatori, strumenti, campioni di materiale, laboratori ecc.. Una realizzazione della grandezza Y , indicata con $y = f(x_1, x_2, \dots, x_N)$, è ottenuta dall'equazione di misura mediante le stime x_1, x_2, \dots, x_N delle N grandezze di ingresso X_1, X_2, \dots, X_N . La propagazione dell'incertezza è illustrata nella tabella precedente.
- (6) Alcune applicazioni commerciali, industriali e normative richiedono la valutazione dell'incertezza ottenuta da un intervallo relativo al risultato della misura y entro il quale si può asserire con un elevato livello di confidenza che il valore del misurando Y sia compreso. In questi casi si preferisce in genere usare l'incertezza estesa U , che è ottenuta moltiplicando l'incertezza composta, $u_c(y)$, per un fattore di copertura k . Perciò $U = k u_c(y)$ e si ritiene che, entro quel livello di confidenza, Y sia maggiore o uguale di $y - U$ e che sia minore o uguale di $y + U$, cosa che si scrive $y \pm U$. Il valore del fattore di copertura k è scelto sulla base del livello di confidenza che si desidera associare all'intervallo definito da $U = k u_c$. Tipicamente, per k è assunto un valore compreso tra due e tre. Quando si può assumere che la distribuzione di Y sia normale e che u_c sia una valida stima della deviazione standard di y , $U = 2u_c$ (cioè $k = 2$) definisce un intervallo con livello di confidenza approssimativamente del 95 % e $U = 3u_c$ (cioè $k = 3$) definisce un intervallo con livello di confidenza maggiore del 99 %.

8.3 INDICAZIONE DELL'INCERTEZZA IN TERMINI DI INTERVALLI DI CONFIDENZA

L'incertezza può anche essere in genere indicata mediante la definizione di un intervallo entro il quale si assume che cada il valore della grandezza con una probabilità data. Questo intervallo può essere specificato come $(y - ku) \leq Y \leq (y + ku)$.

Esempio $100.021\,40\text{ g} \leq m_s \leq 100.021\,54\text{ g}$ oppure $m_s = (100.021\,47 \pm 0.000\,07)\text{ g}$

Per specificare l'intervallo, si deve anche fornire il livello di confidenza rappresentante la probabilità con cui si stima che il valore della grandezza sia compreso nell'intervallo (per esempio 68 %, 90 % o 95 %). Questa probabilità può essere stimata in relazione alla distribuzione di probabilità considerata più appropriata per la misura in questione (Gaussiana, Student-*t*, ecc. [8,9]).

9 ABBREVIAZIONI ED ACRONIMI

Abbreviazioni ed acronimi (parole formate dalle iniziali di gruppi di parole che si ripetono frequentemente) devono essere usati con parsimonia. Se essi non sono di uso comune (ad esempio RMN, IR) essi devono sempre essere definiti la prima volta che compaiono in uno scritto, e dovrebbero essere evitati nei titoli e nei riassunti. Alcuni acronimi sono ormai accettati comunemente, come “laser” dall’acronimo LASER. Abbreviazioni usate per indicare grandezze fisiche devono essere sostituite dal simbolo raccomandato per quella grandezza (per esempio E_i invece di IP per l’energia di ionizzazione, si veda la Sez. 2.5, p. 22; ρ invece di dens. per la densità di massa, si veda la Sez. 2.2, p. 14). Per ulteriori raccomandazioni riguardanti l’uso di abbreviazioni si veda [156].

Una lista di abbreviazioni ed acronimi usati in questa monografia è fornita qui come aiuto al lettore, ma non necessariamente per incoraggiare il loro uso. In molti casi, un acronimo si possono trovare acronimi scritti in lettere minuscole anzichè maiuscole. Nella lista che segue se ne indica soltanto l’uso più comune. Liste più estese riguardanti diversi metodi spettroscopici sono state pubblicate da IUPAC [157, 158] e da Wendisch [159]; una lista estesa di acronimi usati in chimica teorica sono stati pubblicati da IUPAC [21].

NOTA ALLA EDIZIONE ITALIANA. Poiché alcuni acronimi sono universalmente noti nella versione inglese (o del Paese che ospita l’istituzione, ad esempio BIPM), non tutti gli acronimi sono stati tradotti nel loro corrispondente italiano. In altri casi l’acronimo in italiano è raddoppiato da quello inglese, indicato in corsivo (e sempre mantenendo l’ordine alfabetico). Nel testo della traduzione gli acronimi o le abbreviazioni sono stati aggiornate alla versione italiana, solo nei casi in cui quella italiana è l’unica esistente in questa lista ed è diversa da quella inglese.

A/D	analogico a digitale
AA	assorbimento atomico
AAN	analisi per attivazione neutronica
ACEA	approssimazione per coppie di elettroni accoppiati
ACM	<i>adiabatic channel model (vedi MCA)</i>
ACT	<i>activated complex theory (vedi TCA)</i>
AES	<i>Auger electron spectroscopy (vedi SEA)</i>
AFI	analisi mediante fascio ionico
AFM	<i>atomic force microscopy (MFA)</i>
AGA	approssimazione per gruppo accoppiato
AIUPS	<i>angle-integrated ultraviolet photoelectron spectroscopy (vedi SFEUAI)</i>
AMC	analizzatore multicanale
AMC	analizzatore di massa cilindrico
AMML	analisi di massa mediante microsonda laser
amu	<i>atomic mass unit (vedi uma)</i>
ANOVA	analisi della varianza
APS	<i>appearance potential spectroscopy (vedi SAP)</i>
ARAES	<i>angle-resolved Auger electron spectroscopy (SEARA)</i>
ARPEFS	<i>angle-resolved photoelectron fine structure (SFFRA)</i>
AS	<i>Auger spectroscopy (vedi SA)</i>
ASO	accoppiamento spin-orbita
ATD	analisi termica differenziale
ATG	analisi termogravimetrica
ATMM	ampiezza totale a metà del massimo
AXDE	analisi X a dispersione di energia
bcc	<i>body-centred cubic (vedi ccc)</i>
BET	Brunauer-Emmett-Teller (isoterma di adsorbimento)
BIPM	Bureau International des Poids et Mesures
BIS	<i>bremsstrahlung isochromat spectroscopy (vedi SIB)</i>
bp	<i>boiling point (vedi pe)</i>
Btu	British thermal unit (unità britannica di calore)
ca	corrente alternata
CAC	campo autoconsistente
CACMC	campo autoconsistente multiconfigurazione
CAC-MP	campo autoconsistente di Møller-Plesset
CAD	convertitore analogico-digitale
CARS	<i>coherent anti-Stokes Raman scattering (vedi SRCA)</i>
CAWIA	Commission on Atomic Weights and Isotopic Abundances (now CIAAW)
CC	cromatografia su carta
cc	corrente continua
CC	cubico compatto
CCA	<i>coupled cluster approximation (vedi AGA)</i>
CCC	concentrazione critica di coagulazione
ccc	cubico corpo-centrato
CCD	<i>coupled charge device (vedi DCA)</i>
CCL	<i>colour centre laser (vedi LCC)</i>
ccp	<i>cubic close packed (vedi CC)</i>
CCT	cella per conducibilità termica

CCU	Comité Consultatif d'Unités
CDA	convertitore digitale-analogico
CDS	calorimetria differenziale a scansione
CE	cattura elettronica
<i>CEELS</i>	<i>characteristic electron energy-loss spectroscopy (vedi SPCEE)</i>
<i>CELS</i>	<i>characteristic energy-loss spectroscopy (vedi SPCE)</i>
<i>CEPA</i>	<i>coupled electron pair approximation (vedi ACEA)</i>
cfc	cubico faccia-centrato
CFV	cromatografia in fase vapore
CGPM	Conférence Générale des Poids et Mesures
cgs, CGS	centimetro-grammo-secondo
CI	circuito integrato
CIAAW	Commission on Isotopic Abundances and Atomic Weights (prima CAWIA)
<i>CIDEP</i>	<i>chemically induced dynamic electron polarization (vedi PEDCI)</i>
<i>CIDNP</i>	<i>chemically induced dynamic nuclear polarization (vedi PNDCI)</i>
<i>CIMS</i>	<i>chemical ionization mass spectroscopy (vedi SICM)</i>
CIPM	Comité International des Poids et Mesures
<i>CIVR</i>	<i>classical intramolecular vibrational redistribution (vedi RVIC)</i>
<i>CIVR</i>	<i>collision induced vibrational relaxation (vedi RVIC)</i>
CL	cromatografia a liquido
CLOA	combinazione lineare di orbitali atomici
CLOM	combinazione lineare di orbitali molecolari
CLPE	cromatografia in fase liquida con prestazioni elevate
<i>CME</i>	<i>chemically modified electrode (vedi EMC)</i>
<i>CNDO</i>	<i>complete neglect of differential overlap (vedi OCDS)</i>
CODATA	Committee on Data for Science and Technology
<i>COMAS</i>	<i>Concentration Modulation Absorption Spectroscopy (vedi SAMC)</i>
cpz	carica di punto zero
<i>CRDS</i>	<i>cavity ring-down spectroscopy</i>
CSL	campo spettrale libero
<i>CSRS</i>	<i>coherent Stokes-Raman scattering (vedi DCSR)</i>
css	cromatografia a strato sottile
<i>CVD</i>	<i>chemical vapor deposition (vedi DCV)</i>
<i>CW</i>	<i>continuous wave (vedi OC)</i>
D/A	digitale ad analogico
<i>D₄WM</i>	<i>degenerate 4-wave mixing</i>
DA	diffrazione atomica
<i>DAC</i>	<i>digital-to-analogue converter (vedi CDA)</i>
<i>DAPS</i>	<i>disappearance potential spectroscopy (vedi SSP)</i>
DBS	diffusione Brillouin stimolata
DC	desorbimento di campo
DC	dicroismo circolare
<i>dc, DC</i>	<i>direct current (vedi cc)</i>
DCA	dispositivo a carica accoppiata
DCM	dicroismo circolare magnetico
DCSR	diffusione coerente Stokes-Raman
DCV	deposizione chimica allo stato vapore
DCV	dicroismo circolare vibrazionale
DE	diffrazione elettronica
de	diametro esterno

DEABE	diffrazione elettronica anelastica a bassa energia
DEAE	diffrazione elettronica ad alta energia
DEBE	diffrazione elettronica a bassa energia
DEBE	diffusione elettronica a bassa energia
DEBESP	diffrazione elettronica a bassa energia per spin polarizzati
DEEB	diffrazione elettronica ad energia bassissima
DEEBE	diffrazione elettronica elastica a bassa energia
DEME	diffrazione elettronica a media energia
DERAE	diffrazione elettronica a riflessione ad alta energia
DES	desorbimento elettronico stimolato
DFE	diffrazione fotoelettrica
DFEX	diffrazione fotoelettronica X
<i>DFT</i>	<i>density functional theory (vedi TFD)</i>
di	diametro interno
DIAE	diffusione ionica ad alta energia
DIBE	diffusione ionica a bassa energia
DIL	decadimento ad induzione libera
DIL	desorbimento indotto mediante laser
DIME	diffusione ionica a media energia
DLA	diode laser accordabile
DLVO	Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek
DM	dinamica molecolare
DNI	diffusione neutronica inelastica
DPBE	diffrazione positronica a bassa energia
DPC	differenza di potenziale di contatto
DPT	desorbimento programmato in temperatura
<i>DQMC</i>	<i>diffusion quantum Monte Carlo (vedi MCDQ)</i>
DR	dispersione rotatoria
DREE	doppia risonanza elettrone-elettrone
DREN	doppia risonanza elettrone-nucleo
DRI	doppia risonanza internucleare
<i>DRIFTS</i>	<i>diffuse reflectance infrared Fourier transform spectroscopy (vedi SIRDFIT)</i>
DRM	dispersione rotatoria magnetica
DRMO	dispersione rotatoria magneto-ottica
DRO	dispersione rotatoria ottica
<i>DSC</i>	<i>differential scanning calorimetry (vedi CDS)</i>
DSF	desorbimento stimolato mediante fotoni
<i>DTA</i>	<i>differential thermal analysis (vedi ATD)</i>
DX	diffrazione dei raggi X
E1	eliminazione unimolecolare
E2	eliminazione bimolecolare
<i>EAPFS</i>	<i>extended appearance potential fine structure</i>
ec	esagonale compatto
ECM	elettrodo a caduta di mercurio
ECMA	elettrodo a caduta di mercurio appeso
ECN	elettrodo calomel normale
EDA	elettrone donatore-accettore [complesso]
EDR	elettrodo a disco rotante

<i>EDX</i>	<i>energy-dispersive X-ray analysis (vedi XDE)</i>
<i>EELS</i>	<i>electron energy-loss spectroscopy (vedi SPEE)</i>
<i>EH</i>	<i>electron holography (vedi OE)</i>
<i>EIS</i>	elettrodo idrogeno standard
<i>EIS</i>	<i>electrochemical impedance spectroscopy (vedi SIEC)</i>
<i>EIS</i>	<i>electron impact spectroscopy (vedi SIE)</i>
<i>EL</i>	elettroluminescenza
<i>ELDOR</i>	<i>electron-electron double resonance (vedi DREE)</i>
<i>ELEED</i>	<i>elastic low energy electron diffraction (vedi DEEBE)</i>
<i>EMC</i>	elettrodo modificato chimicamente
<i>emf</i>	<i>electromotive force (vedi fem)</i>
<i>emu</i>	unità elettromagnetica
<i>ENDOR</i>	<i>electron-nuclear double resonance (vedi DREN)</i>
<i>ENO</i>	effetto nucleare Overhauser
<i>EPR</i>	<i>electron paramagnetic resonance (vedi RPE)</i>
<i>EPZ</i>	energia di punto zero
<i>ERM</i>	epitassia mediante raggio molecolare
<i>ESCA</i>	<i>electron spectroscopy for chemical applications (or analysis)</i>
<i>ESDIAD</i>	<i>electron stimulated desorption ion angular distribution</i>
<i>ESR</i>	<i>electron spin resonance (vedi RSE)</i>
<i>esu</i>	unità elettrostatica
<i>ETS</i>	<i>electron transmission spectroscopy, electron tunneling spectroscopy (vedi SET)</i>
<i>EXAFS</i>	<i>extended X-ray absorption fine structure</i>
<i>EXAPS</i>	<i>electron excited X-ray appearance potential spectroscopy</i>
<i>EXELFS</i>	<i>extended electron energy-loss fine structure</i>
<i>FAB(MS)</i>	<i>fast atom bombardment (mass spectroscopy)</i>
<i>FCT</i>	funzione di correlazione temporale
<i>FDR</i>	funzione di distribuzione radiale
<i>FEESP</i>	<i>field-emitted electron spin-polarization [spectroscopy]</i>
<i>FEL</i>	fluorescenza per eccitazione laser
<i>fem</i>	forza elettromotrice
<i>FEM</i>	<i>field emission [electron] microscopy (vedi MEC)</i>
<i>FES</i>	<i>field emission spectroscopy (vedi SEC)</i>
<i>FFT</i>	<i>fast Fourier transform (vedi TVF)</i>
<i>FGMC</i>	funzione di Green per molti corpi
<i>FID</i>	<i>flame ionization detector (vedi RFI)</i>
<i>FIL</i>	fluorescenza indotta mediante laser
<i>FIM</i>	<i>field-ion microscopy (vedi MCI)</i>
<i>FIMS</i>	<i>field-ion mass spectroscopy (SMCI)</i>
<i>FIR</i>	<i>far-infrared (LI)</i>
<i>FM</i>	fotomoltiplicatore
<i>FM</i>	<i>frequency modulated (MF)</i>
<i>FPD</i>	<i>flame photometric detector (RFF)</i>
<i>FT</i>	<i>Fourier transform (vedi TF)</i>
<i>FTD</i>	<i>flame thermionic detector (vedi RFTI)</i>
<i>FTIR</i>	<i>Fourier transform infrared (vedi TFI)</i>
<i>GC</i>	gas cromatografia
<i>GDF</i>	generazione di differenza di frequenza
<i>GIXS</i>	<i>grazing-incidence X-ray scattering</i>

GLC	gas-liquido cromatografia
GM	Geiger-Müller
GSA	generazione di seconda armonica
GTO	<i>Gaussian-type orbital (vedi OG)</i>
HEED	<i>high-energy electron diffraction (vedi DEAE)</i>
HEELS	<i>high-energy electron energy-loss spectroscopy (vedi SEPEAE)</i>
HF	Hartree-Fock
HF-NR	Hartree-Fock non ristretto
<i>hfs</i>	<i>hyperfine structure (hyperfine splitting) (vedi SI)</i>
HMDE	<i>hanging mercury drop electrode (vedi ECMA)</i>
HMO	<i>Hückel molecular orbital (vedi OMH)</i>
HOMO	<i>highest occupied molecular orbital (vedi OMOM)</i>
HPLC	<i>high-performance liquid chromatography (vedi CLPE)</i>
HREELS	<i>high-resolution electron energy-loss spectroscopy</i>
HTS	<i>Hadamard transform spectroscopy (vedi STH)</i>
I/O	<i>input-output</i>
IC	interazione di configurazione configuration interaction
IC	ionizzazione chimica
IC	ionizzazione di campo
IC	<i>integrated circuit</i>
ICISS	<i>impact-collision ion scattering spectroscopy (vedi SDIIC)</i>
ICSU	International Council for Science
<i>id</i>	<i>inner diameter (vedi di)</i>
IEC	International Electrotechnical Commission
IEPA	<i>independent electron pair approximation</i>
IETS	<i>inelastic electron tunneling spectroscopy (vedi STEI)</i>
IIE	ionizzazione per impatto elettronico
ILEED	<i>inelastic low-energy electron diffraction (vedi DEABE)</i>
IMF	ionizzazione multifotonica
IMR	ionizzazione multifotonica a risonanza
INDO	<i>incomplete neglect of differential overlap</i>
INDOR	<i>internuclear double resonance (vedi DRI)</i>
INS	<i>inelastic neutron scattering (vedi DNI)</i>
INS	<i>ion neutralization spectroscopy (vedi SNI)</i>
IP	<i>ionization potential (symbol: E_i) (vedi PI)</i>
IPES	<i>inverse photoelectron spectroscopy (vedi SFEI)</i>
IPTS	<i>International Practical Temperature Scale (vedi SIPT)</i>
IR	infrarosso
IRAS	<i>infrared absorption spectroscopy (vedi SAIR)</i>
IRS	<i>infrared spectroscopy (vedi SIR)</i>
IS	<i>ionization spectroscopy (vedi SI)</i>
ISO	International Organization for Standardization
ISQ	<i>International System of Quantities (vedi SIG)</i>
ISS	<i>ion scattering spectroscopy (vedi SDI)</i>
ITS	<i>International Temperature Scale (vedi STI)</i>
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry
IUPAP	International Union of Pure and Applied Physics
KS	Kohn-Sham

L	legante
L2TOFMS	<i>laser desorption laser photoionization time-of-flight mass</i>
LASER	laser
LC	<i>liquid chromatography (vedi CL)</i>
LCAO	<i>linear combination of atomic orbitals (vedi CLOA)</i>
LCC	laser a centri di colore
L-CCA	<i>linear coupled-cluster approximation</i>
LCMO	<i>linear combination of molecular orbitals (vedi CLOM)</i>
LED	<i>light-emitting diode</i>
LEED	<i>low-energy electron diffraction (vedi DEBE)</i>
LEELS	<i>low-energy electron energy-loss spectroscopy (vedi SEPEBE)</i>
LEES	<i>low-energy electron scattering (vedi DEBE)</i>
LH	Lindemann-Hinshelwood [teoria]
LI	lontano infrarosso
LID	<i>laser induced desorption (vedi DIL)</i>
LIDAR	<i>light detection and ranging</i>
LIGS	<i>laser induced grating spectroscopy</i>
LIMA	<i>laser microprobe mass analysis (vedi AMML)</i>
LUMO	<i>lowest unoccupied molecular orbital</i>
LV	legame di valenza
LVG	legame di valenza generalizzato
M	metallo centrale
MA	modulazione in ampiezza
MAN	microanalisi nucleare
MAS	microscopia Auger a scansione
MAS	<i>magic-angle spinning</i>
MASER	<i>microwave amplification by stimulated emission of radiation</i>
MB	magnetone di Bohr (simbolo: μ_B)
MBE	<i>molecular beam epitaxy (vedi ERM)</i>
MBGF	<i>many-body Green's function (vedi FGMC)</i>
MBPT	<i>many-body perturbation theory (vedi TPMC)</i>
MBQ	microbilancia di quarzo
MC	Monte Carlo
MCA	modello del canale adiabatico
MCDQ	metodo Monte Carlo per la diffusione quantica
MCI	microscopia a campo ionico
MCQ	Monte Carlo quantistico
MCS	<i>multichannel scaler</i>
MCSCF	<i>multiconfiguration self-consistent field (vedi CACMC)</i>
MDS	<i>metastable deexcitation spectroscopy (vedi SDEM)</i>
MEC	microscopio a emissione (di elettroni) di campo
MEED	<i>medium-energy electron diffraction (vedi DEME)</i>
MEIS	<i>medium-energy ion scattering (vedi DIME)</i>
MES	microscopio elettronico a scansione (in riflessione)
MEST	microscopia (elettronica) a scansione in trasmissione
MET	microscopia elettronica in trasmissione
MET	microscopia (elettronica a scansione) ad effetto tunnel
MF	modulazione di frequenza
MFA	microscopio a forza atomica

MFM	microscopia a forza magnetica
MINDO	<i>modified incomplete neglect of differential overlap</i>
MIR	medio infrarosso
MKS	metro-kilogrammo-secondo
MKSA	metro-kilogrammo-secondo-ampere
MM	meccanica molecolare
MO	<i>molecular orbital (vedi OM)</i>
MOCVD	<i>metal-organic chemical vapor deposition</i>
MOMBE	<i>metal-organic molecular beam epitaxy</i>
MORD	<i>magnetic optical rotatory dispersion (vedi DRMO)</i>
MOS	<i>metal oxide semiconductor</i>
mp	<i>melting point (vedi pf)</i>
MPPT	<i>Møller-Plesset perturbation theory (vedi TPMP)</i>
MP-SCF	<i>Møller-Plesset self-consistent field (vedi CAC-MP)</i>
MRI	<i>magnetic resonance imaging (vedi VRM)</i>
MS	microscopia con sonda a scansione
MS	<i>mass spectroscopy (vedi SM)</i>
MSCA	modello statistico del canale adiabatico
MT	media dei transitori (ottenuta mediante calcolatore)
MW	<i>microwave</i>
MW	<i>molecular weight (symbol: M_r) (vedi pm)</i>
Nd:YAG	YAG dopato Nd
NETD	<i>noise equivalent temperature difference</i>
NEXAFS	<i>near edge X-ray absorption fine structure</i>
NIR	<i>near-infrared (vedi VIR)</i>
NMR	<i>nuclear magnetic resonance (vedi RMN)</i>
NQR	<i>nuclear quadrupole resonance (vedi RQN)</i>
NTP	temperatura e pressione normale (normal temperature and pressure)
OA	orbitale atomico
OC	onde continue
OCDS	omissione completa del differenziale di sovrapposizione
od	<i>outside diameter (vedi de)</i>
ODMR	<i>optically detected magnetic resonance (vedi RMRO)</i>
OE	olografia elettronica
OFE	olografia fotoelettronica
OG	orbitale tipo Gaussiano
OGS	<i>opto-galvanic spectroscopy (vedi SOG)</i>
OM	orbitale molecolare
OMH	orbitale molecolare di Hückel
OMOM	orbitale molecolare occupato massimo
ORD	<i>optical rotatory dispersion (vedi DRO)</i>
OS	orbitali tipo Slater
OSX	onde stazionarie X
OTG	orbitale tipo Gaussiano
PAS	<i>photoacoustic spectroscopy (vedi SFA)</i>
PDG	Particle Data Group
pe	punto di ebollizione
PED	<i>photoelectron diffraction</i>

PEDCI	polarizzazione elettronica dinamica chimicamente indotta
PEH	<i>photoelectron holography (vedi OFE)</i>
PES	pompaggio di emissione stimolato
PES	<i>photoelectron spectroscopy (vedi SFE)</i>
pf	punto di fusione
PI	potenziale di ionizzazione (simbolo: E_i)
PIE	punto isoelettrico
PIES	<i>Penning ionization electron spectroscopy (vedi PIS)</i>
PIPECO	<i>photoion-photoelectron coincidence [spettroscopia]</i>
PIPn	<i>periodically poled lithium niobate</i>
PIS	<i>Penning ionization (electron) spectroscopy (vedi SIP)</i>
pm	peso molecolare
PMO	potenziale a mezz'onda
PNDCl	polarizzazione nucleare dinamica chimicamente indotta
ppb	parti per miliardo
pphm	parti per cento milioni
ppm	parti per milione
PPP	Pariser-Parr-Pople
PS	vedi PES
pzc	<i>point of zero charge (vedi cpz)</i>
QET	<i>quasi equilibrium theory (vedi TQE)</i>
QMC	<i>quantum Monte Carlo (vedi MCQ)</i>
QMS	<i>quadrupole mass spectrometer (vedi SQM)</i>
RADAR	<i>radiowave detection and ranging</i>
RAM	rotazione di angolo magico
RBS	<i>Rutherford (ion) back scattering (vedi RDR)</i>
RCE	rivelatore di cattura elettronica
RCT	rivelatore di conducibilità
RDR	retro diffusione (ionica) di Rutherford
REMPI	<i>resonance enhanced multiphoton ionization (vedi IMR)</i>
RF	radio frequenza
RFF	rivelatore di fiamma fotometrico
RFI	rivelatore di fiamma a ionizzazione
RFTI	rivelatore di fiamma termoionico
RHEED	<i>reflection high-energy electron diffraction (vedi DERAe)</i>
RHF	Hartree-Fock ristretto
RIC	risonanza ionica di ciclotrone
RIMS	<i>resonant ionization mass spectroscopy (vedi SIMR)</i>
RKR	Rydberg-Klein-Rees [potenziale]
RML	risonanza magnetica laser
RMN	risonanza magnetica nucleare
RMRO	risonanza magnetica rivelata otticamente
rms	<i>root-mean-square</i>
RNI	radiazione non ionizzante
ROS	radiazione orbitale di sincrotrone
RPE	risonanza paramagnetica elettronica
RPT	reazione programmata in temperatura
RQN	risonanza quadrupolare nucleare

RRK	Rice-Ramsperger-Kassel [teoria]
RRKM	Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus [teoria]
<i>RRS</i>	<i>resonance Raman spectroscopy (vedi SRR)</i>
RS	Raman spettroscopia
RS	radiazione di sincrotrone
RSE	risonanza di spin elettronico
<i>RSPT</i>	<i>Rayleigh-Schrödinger perturbation theory (vedi TP-RS)</i>
RTA	riflessione totale attenuata (interna)
RVIC	ridistribuzione vibrazionale intramolecolare classica
RVIC	rilassamento vibrazionale intramolecolare classico
S	singoletto
S_E	<i>substitution electrophilic</i>
S_N1	<i>substitution nucleophilic unimolecular</i>
S_N2	<i>substitution nucleophilic bimolecular</i>
S_Ni	<i>substitution nucleophilic intramolecular</i>
SA	Spettroscopia Auger
SAA	spettroscopia ad assorbimento atomico
SAC	spazio attivo completo
SAC-CAC	spazio attivo completo ? del campo autoconsistente
<i>SACM</i>	<i>statistical adiabatic channel model (vedi MSCA)</i>
SAIR	spettroscopia ad assorbimento infrarosso
<i>SAM</i>	<i>scanning Auger microscopy (vedi MAS)</i>
SAMC	spettroscopia di assorbimento a modulazione di concentrazione
SAP	spettroscopia di apparizione del potenziale
<i>SBS</i>	<i>stimulated Brillouin scattering (vedi DBS)</i>
<i>SBZ</i>	<i>surface Brillouin zone (vedi ZBS)</i>
SCE	elettrodo calomel saturo
<i>SCF</i>	<i>self-consistent field (vedi CAC)</i>
<i>SDCI</i>	<i>singly and doubly excited configuration interaction</i>
SDEM	spettroscopia a diseccitazione metastabile
SDI	spettroscopia a diffusione ionica
SDIIC	spettroscopia a diffusione ionica per impatto-collisione
SDT	spettroscopia a desorbimento termico
SEA	spettroscopia elettronica Auger
SEAC	spettroscopia elettronica per applicazioni (o analisi) chimiche
SEARA	spettroscopia elettronica Auger a risoluzione d'angolo
SEC	spettroscopia a emissione di campo
<i>SEELFS</i>	<i>surface extended energy-loss fine structure</i>
<i>SEFT</i>	<i>spin-echo Fourier transform (vedi TF-SE)</i>
SEIPS	spettroscopia elettronica a ionizzazione Penning superficiale
<i>SEM</i>	<i>scanning [reflection] electron microscopy</i>
SEPEAE	spettroscopia elettronica a perdita di energia ad alta energia
SEPEBE	spettroscopia elettronica a perdita di energia a bassa energia
SEPEV	spettroscopia elettronica a perdita di energia, vibrazionale
<i>SERS</i>	<i>surface-enhanced Raman spectroscopy (vedi SRSM)</i>
SES	spettroscopia ad elettroni secondari
<i>SESCA</i>	<i>scanning electron spectroscopy for chemical applications</i>
SET	spettroscopia elettronica ad effetto tunnel
<i>SEXAFS</i>	<i>surface extended X-ray absorption fine structure</i>

SF	fissione spontanea
SFA	spettroscopia fotoacustica
SFE	spettroscopia fotoelettronica
SFEI	spettroscopia fotoelettronica inversa
SFEUAI	spettroscopia fotoelettronica ultravioletta ad angolo integrato
SFEX	spettroscopia fotoelettronica X
SFFRA	Struttura fine fotoelettronica a risoluzione d'angolo
<i>SFG</i>	<i>sum-frequency generation</i>
<i>SHE</i>	<i>standard hydrogen electrode (vedi EIS)</i>
SI	Système International d'Unités
SI	spettroscopia a ionizzazione
SI	struttura iperfine (sdoppiamento iperfine)
SIB	Spettroscopia isocromatica di bremsstrahlung
SICM	spettroscopia a ionizzazione chimica di massa
SIE	spettroscopia a impatto elettronico
SIEC	spettroscopia ad impedenza elettrochimica
SIG	Sistema Internazionale delle Grandezze
SIMR	spettroscopia ionizzazione di massa risonante
<i>SIMS</i>	<i>secondary ion mass spectroscopy (vedi SMIS)</i>
SIP	spettroscopia a ionizzazione (elettronica) Penning
SIPT	Scala Internazionale Pratica di Temperatura
SIR	spettroscopia nell'infrarosso
SIRDFT	spettroscopia infrarosso a riflessione diffusa mediante trasformata di Fourier
SM	spettrometria di massa
SMCI	spettroscopia di massa a campo ionico
SMIS	spettrometria di massa a ioni secondari
SMISS	spettrometria di massa a ioni secondari statica
<i>SMOKE</i>	<i>surface magneto-optic Kerr effect</i>
SMQ	spettrometro di massa a quadrupolo
SMQD	spettrometro di massa a quadrupolo, doppio
SNI	spettroscopia a neutralizzazione ionica
<i>SOC</i>	<i>spin-orbit coupling (vedi ASO)</i>
SOG	spettroscopia opto-galvanica
<i>SOR</i>	<i>synchrotron orbital radiation (vedi ROS)</i>
SPCE	spettroscopia a perdita caratteristica di energia
SPCEE	spettroscopia a perdita caratteristica di energia degli elettroni
SPEE	spettroscopia a perdita di energia elettronica
<i>SPIES</i>	<i>surface Penning ionization electron spectroscopy (vedi SEIPS)</i>
<i>SPLEED</i>	<i>spin-polarized low-energy electron diffraction (vedi DEBESP)</i>
<i>SPM</i>	<i>scanning probe microscopy (vedi MS)</i>
SRCA	scattering Raman coerente anti-Stokes
SRR	spettroscopia risonante Raman
SRS	sorgente di radiazione di sincrotrone
SRSM	spettroscopia Raman a superficie migliorata
<i>SSIMS</i>	<i>static secondary ion mass spectroscopy (vedi SMISS)</i>
SSP	spettroscopia a scomparsa del potenziale
STEI	spettroscopia a effetto tunnel elettronico inelastico
<i>STEM</i>	<i>scanning transmission [electron] microscopy (vedi MEST)</i>
STH	spettroscopia a trasformata di Hadamard

STI	Scala di Temperatura Internazionale
STM	<i>scanning tunnelling (electron) microscopy (vedi MET)</i>
STO	<i>Slater-type orbital (vedi OS)</i>
STP	<i>standard temperature and pressure</i>
SUV	spettroscopia al ultravioletto
SVLF	<i>single vibronic level fluorescence</i>
T	tripletto
TC	trasferimento di carica
TCA	teoria del complesso attivato
TDMS	<i>tandem quadrupole mass spectroscopy (vedi SMQD)</i>
TDS	<i>thermal desorption spectroscopy (vedi SDT)</i>
TDV	tempo di volo [analisi]
TED	diffrazione elettronica in trasmissione
TER	(differenza di) temperatura equivalente di rumore
TF	trasformata di Fourier
TFD	teoria del funzionale di densità
TFI	trasformata di Fourier nell'infrarosso
TF-SE	trasformata di Fourier spin-eco
TG	termogravimetro
TGA	<i>thermogravimetric analysis (vedi ATG)</i>
THEED	<i>transmission high-energy electron diffraction</i>
tlc	<i>thin layer chromatography (vedi css)</i>
TLE	trasferimento lineare di energia
TOF	<i>time-of-flight [analysis] (vedi TDV)</i>
TPD	<i>temperature programmed desorption (vedi DPT)</i>
TPMC	teoria della perturbazione per molti corpi
TPMP	teoria della perturbazione di Møller-Plesset
TPR	<i>temperature programmed reaction (vedi RPT)</i>
TP-RS	teoria della perturbazione di Rayleigh-Schrödinger
TQE	teoria di quasi equilibrio
TR3	<i>time-resolved resonance Raman scattering</i>
TST	teoria dello stato di transizione
TVF	trasformata veloce di Fourier
UA	unità astronomica
ua	unità atomica
UAF	ultra alta frequenza
UAV	ultra alto vuoto
ue	unità di entropia
UHF	<i>ultra high frequency (vedi UAF)</i>
UHF	<i>unrestricted Hartree-Fock (vedi HF-NR)</i>
UHV	<i>ultra high vacuum (vedi UAV)</i>
uma	unità di massa atomica
UP[E]S	<i>ultraviolet photoelectron spectroscopy (SUV)</i>
UV	ultravioletto
VB	<i>valence bond (vedi LV)</i>
VCD	<i>vibrational circular dichroism (DCV)</i>
VEELS	<i>vibrational electron energy-loss spectroscopy (vedi SEPEV)</i>

VFL	variazione della funzione lavoro
VHF	<i>very high frequency (vedi VVF)</i>
VIR	vicino infrarosso
VIS	visibile
VLEED	<i>very-low-energy electron diffraction (vedi DEEB)</i>
VLSI	<i>very large scale integration</i>
VPC	<i>vapor-phase chromatography (vedi CFV)</i>
VRM	visualizzazione per risonanza magnetica
VSEPR	<i>valence shell electron pair repulsion</i>
VUV	<i>vacuum ultraviolet</i>
VVF	altissima frequenza
WFC	<i>work function change (vedi VFL)</i>
X	<i>halogen (alogeno)</i>
XAFS	struttura fine dell'assorbimento X
XANES	<i>X-ray absorption near-edge structure [spettroscopia]</i>
XAPS	<i>X-ray appearance potential spectroscopy</i>
XDE	analisi X a dispersione di energia
XPD	<i>X-ray photoelectron diffraction (vedi DFEX)</i>
XPES	<i>X-ray photoelectron spectroscopy (vedi SFEX)</i>
XPS	<i>X-ray photoelectron spectroscopy</i>
YAG	<i>yttrium aluminium garnet</i>
ZBS	zona di Brillouin superficiale
ZPE	<i>zero point energy (vedi EPZ)</i>

10 BIBLIOGRAFIA

10.1 FONTI PRIMARIE

- [1] Manuali di Simboli e Terminologia delle Grandezze ed Unità di Misura Fisco-Chimiche
- (a) 1st ed., M. L. McGlashan. *Pure Appl. Chem.*, 21:1–38, 1970.
 - (b) 2nd ed., M. A. Paul. Butterworths, London, 1975.
 - (c) 3rd ed., D. H. Whiffen. *Pure Appl. Chem.*, 51:1–36, 1979.
 - (d) D. H. Whiffen. Appendix I—Definitions of Activities and Related Quantities. *Pure Appl. Chem.*, 51:37–41, 1979.
 - (e) D. H. Everett. Appendix II—Definitions, Terminology and Symbols in Colloid and Surface Chemistry, Part I. *Pure Appl. Chem.*, 31:577–638, 1972.
 - (f) J. Lyklema and H. van Olphen. Appendix II—Definitions, Terminology and Symbols in Colloid and Surface Chemistry, Part 1.13: Selected Definitions, Terminology and Symbols for Rheological Properties. *Pure Appl. Chem.*, 51:1213–1218, 1979.
 - (g) M. Kerker and J. P. Kratochvil. Appendix II—Definitions, Terminology and Symbols in Colloid and Surface Chemistry, Part 1.14: Light Scattering. *Pure Appl. Chem.*, 55:931–941, 1983.
 - (h) R. L. Burwell Jr. Part II: Heterogeneous Catalysis. *Pure Appl. Chem.*, 46:71–90, 1976.
 - (i) R. Parsons. Appendix III—Electrochemical Nomenclature. *Pure Appl. Chem.*, 37:499–516, 1974.
 - (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.*, 54:1239–1250, 1982.
 - (k) K. J. Laidler. Appendix V—Symbolism and Terminology in Chemical Kinetics. *Pure Appl. Chem.*, 53:753–771, 1981.
- [2] (a) I. Mills, T. Cvitaš, K. Homann, N. Kallay and K. Kuchitsu. *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry*. Blackwell Science, Oxford, 1st edition, 1988.
- (b) I. Mills, T. Cvitaš, K. Homann, N. Kallay and K. Kuchitsu. *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry*. Blackwell Science, Oxford, 2nd edition, 1993.
- (c) *Nomenklaturniye Pravila IUPAC po Khimii, Vol. 6, Fizicheskaya Khimiya*, Nacionalnii Komitet Sovetskih Khimikov, Moscow, 1988.
- (d) M. Riedel. *A Fizikai-kémiai Definíciók és Jelölések*. Tankönyvkiadó, Budapest, 1990.
- (e) K. Kuchitsu. *Butsurikagaku de Mochiirareru Ryo, Tan-i, Kigo*. Kodansha, Tokyo, 1991.
- (f) K.-H. Homann, M. Hausmann. *Größen, Einheiten und Symbole in der Physikalischen Chemie*. VCH, Weinheim, 1996.
- (g) D. I. Marchidan. *Mărimi, Unități și Simboluri în Chimia Fizică*. Editura Academiei Române, Bucharest, 1996.
- (h) A. P. Masiá, J. M. Guil, J. E. Herrero, A. R. Paniego. *Magnitudes, Unidades y Símbolos en Química Física*. Fundació Ramón Areces & Real Sociedad Española de Química, Madrid, 1999.
- (i) J. M. Costa. *Magnituds, Unitats i Símbols en Química Física*. Institut d'Estudis Catalans, Barcelona, 2004.
- [3] Bureau International des Poids et Mesures. *Le Système International d'Unités (SI)*. 8th French and English Edition, BIPM, Sèvres, 2006.
- [4] E. R. Cohen and P. Giacomo. *Symbols, Units, Nomenclature and Fundamental Constants in Physics. 1987 Revision*, Document I.U.P.A.P.–25 (IUPAP-SUNAMCO 87–1) anche pubblicato in: *Physica*, 146A:1–67, 1987.

- [5] International Standards, ISO
International Organization for Standardization, Geneva, Switzerland
- (a) ISO 31-0: 1992, Quantities and units – Part 0: General principles
Amendment 1: 1998, Amendment 2: 2005
 - (b) ISO 80000-3: 2006, Quantities and units – Part 3: Space and time
 - (c) ISO 80000-4: 2006, Quantities and units – Part 4: Mechanics
 - (d) ISO 31-4: 1992, Quantities and units – Part 4: Heat
Amendment 1: 1998
 - (e) ISO 31-5: 1992, Quantities and units – Part 5: Electricity and magnetism
Amendment 1: 1998
 - (f) ISO 31-6: 1992, Quantities and units – Part 6: Light and related electromagnetic radiations
Amendment 1: 1998
 - (g) ISO 31-7: 1992, Quantities and units – Part 7: Acoustics
Amendment 1: 1998
 - (h) ISO 31-8: 1992, Quantities and units – Part 8: Physical chemistry and molecular physics
Amendment 1: 1998
 - (i) ISO 31-9: 1992, Quantities and units – Part 9: Atomic and nuclear physics
Amendment 1: 1998
 - (j) ISO 31-10: 1992, Quantities and units – Part 10: Nuclear reactions and ionizing radiations
Amendment 1: 1998
 - (k) ISO 31-11: 1992, Quantities and units – Part 11: Mathematical signs and symbols for use in the physical sciences and technology
 - (m) ISO 31-12: 1992, Quantities and units – Part 12: Characteristic numbers
Amendment 1: 1998
 - (n) ISO 31-13: 1992, Quantities and units – Part 13: Solid state physics
Amendment 1: 1998

Le varie parti della ISO 31 sono state successivamente sostituite dalla ISO/IEC 80000.

- [6] ISO 1000: 1992, SI Units and recommendations for the use of their multiples and of certain other units
Amendment 1: 1998

Tutte le norme qui elencate ([5] e [6]) sono raccolte nel ISO Standards Handbook 2, *Quantities and units*, ISO, Geneva, 1993.

- [7] International Standard, IEC International Electrotechnical Commission, Geneva.
IEC 60027–2, 2005.
- [8] Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement (GUM), BIPM, IEC, IFCC, ISO, IUPAC, IUPAP, OIML, International Organization for Standardization, Geneva.
1st edition, 1993; corrected and reprinted, 1995.
- [9] International Vocabulary of Metrology – Basic and General Concepts and Associated Terms (VIM), 3rd edition, 2007.

10.2 FONTI SECONDARIE

- [10] M. Quack. Commission I.1 at the IUPAC General Assembly 1995. Summary Minutes. *Chem. Int.*, 20:12, 1998.
- [11] E. A. Guggenheim. Units and Dimensions. *Phil. Mag.*, 33:479–496, 1942.
- [12] J. de Boer. On the History of Quantity Calculus and the International System. *Metrologia*, 31:405–429, 1994/95.
- [13] I. M. Mills. The Language of Science. *Metrologia*, 34:101–109, 1997.
- [14] J. C. Rigg, S. S. Brown, R. Dybkaer, and H. Olesen, editors. *Compendium of Terminology and Nomenclature of Properties in Clinical Laboratory Sciences*. Blackwell, Oxford, 1995.
- [15] J. Rigaudy and S. P. Klesney. *IUPAC Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A, B, C, D, E, F, and H*. Pergamon Press, Oxford, 4th edition, 1979.
- [16] A. D. McNaught and A. Wilkinson. *Compendium of Chemical Terminology – The Gold Book*, 2nd edition. Blackwell, Oxford, 1997.
- [17] P. Müller. Glossary of Terms Used in Physical Organic Chemistry. *Pure Appl. Chem.*, 66:1077–1184, 1994.
- [18] A. D. Jenkins, P. Kratochvíl, R. F. T. Stepto, and U. W. Suter. Glossary of Basic Terms in Polymer Science. *Pure Appl. Chem.*, 68:2287–2311, 1996.
- [19] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, editors. *Course of Theoretical Physics: Mechanics*. Butterworth-Heinemann, Oxford, 1998.
- [20] J. E. Boggs. Guidelines for Presentation of Methodological Choices in the Publication of Computational Results. A. *Ab Initio* Electronic Structure Calculations. *Pure Appl. Chem.*, 70:1015–1018, 1998.
- [21] R. D. Brown, J. E. Boggs, R. Hilderbrandt, K. Lim, I. M. Mills, E. Nikitin, and M. H. Palmer. Acronyms Used in Theoretical Chemistry. *Pure Appl. Chem.*, 68:387–456, 1996.
- [22] D. H. Whiffen. Expression of Results in Quantum Chemistry. *Pure Appl. Chem.*, 50:75–79, 1978.
- [23] P. J. Mohr, B. N. Taylor, and D. B. Newell. CODATA Recommended Values of the Fundamental Physical Constants: 2006. *Rev. Mod. Phys.*, 80:633–730, 2008. The 2006 CODATA recommended values are available at <http://physics.nist.gov/constants>.
- [24] J. Mullay. Estimation of Atomic and Group Electronegativities. *Struct. Bonding (Berlin)*, 66:1–25, 1987.
- [25] J. M. Brown, R. J. Buenker, A. Carrington, C. di Lauro, R. N. Dixon, R. W. Field, J. T. Hougen, W. Hüttner, K. Kuchitsu, M. Mehring, A. J. Merer, T. A. Miller, M. Quack, D. A. Ramsey, L. Veseth, and R. N. Zare. Remarks on the Signs of g -Factors in Atomic and Molecular Zeeman Spectroscopy. *Mol. Phys.*, 98:1597–1601, 2000.
- [26] M. Quack and J. Stohner. Combined Multidimensional Anharmonic and Parity Violating Effects in CDBrClF. *J. Chem. Phys.*, 119:11228–11240, 2003.

- [27] F. A. Jenkins. Report of Subcommittee *f* (Notation for the Spectra of Diatomic Molecules). *J. Opt. Soc. Amer.*, 43:425–426, 1953.
- [28] R. S. Mulliken. Report on Notation for the Spectra of Polyatomic Molecules. *J. Chem. Phys.*, 23:1997–2011, 1955. (Erratum) *J. Chem. Phys.*, 24:1118, 1956.
- [29] G. Herzberg. *Molecular Spectra and Molecular Structure Vol. II. Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules*. Van Nostrand, Princeton, 1946.
- [30] G. Herzberg. *Molecular Spectra and Molecular Structure Vol. I. Spectra of Diatomic Molecules*. Van Nostrand, Princeton, 1950.
- [31] G. Herzberg. *Molecular Spectra and Molecular Structure Vol. III. Electronic Spectra and Electronic Structure of Polyatomic Molecules*. Van Nostrand, Princeton, 1966.
- [32] E. D. Becker. Recommendations for the Presentation of Infrared Absorption Spectra in Data Collections – A. Condensed Phases. *Pure Appl. Chem.*, 50:231–236, 1978.
- [33] E. D. Becker, J. R. Durig, W. C. Harris, and G. J. Rosasco. Presentation of Raman Spectra in Data Collections. *Pure Appl. Chem.*, 53:1879–1885, 1981.
- [34] Physical Chemistry Division, Commission on Molecular Structure and Spectroscopy. Recommendations for the Presentation of NMR Data for Publication in Chemical Journals. *Pure Appl. Chem.*, 29:625–628, 1972.
- [35] Physical Chemistry Division, Commission on Molecular Structure and Spectroscopy. Presentation of NMR Data for Publication in Chemical Journals – B. Conventions Relating to Spectra from Nuclei other than Protons. *Pure Appl. Chem.*, 45:217–219, 1976.
- [36] Physical Chemistry Division, Commission on Molecular Structure and Spectroscopy. Nomenclature and Spectral Presentation in Electron Spectroscopy Resulting from Excitation by Photons. *Pure Appl. Chem.*, 45:221–224, 1976.
- [37] Physical Chemistry Division, Commission on Molecular Structure and Spectroscopy. Nomenclature and Conventions for Reporting Mössbauer Spectroscopic Data. *Pure Appl. Chem.*, 45:211–216, 1976.
- [38] J. H. Beynon. Recommendations for Symbolism and Nomenclature for Mass Spectroscopy. *Pure Appl. Chem.*, 50:65–73, 1978.
- [39] C. J. H. Schutte, J. E. Bertie, P. R. Bunker, J. T. Hougen, I. M. Mills, J. K. G. Watson, and B. P. Winnewisser. Notations and Conventions in Molecular Spectroscopy: Part 1. General Spectroscopic Notation. *Pure Appl. Chem.*, 69:1633–1639, 1997.
- [40] C. J. H. Schutte, J. E. Bertie, P. R. Bunker, J. T. Hougen, I. M. Mills, J. K. G. Watson, and B. P. Winnewisser. Notations and Conventions in Molecular Spectroscopy: Part 2. Symmetry Notation. *Pure Appl. Chem.*, 69:1641–1649, 1997.
- [41] P. R. Bunker, C. J. H. Schutte, J. T. Hougen, I. M. Mills, J. K. G. Watson, and B. P. Winnewisser. Notations and Conventions in Molecular Spectroscopy: Part 3. Permutation and Permutation-Inversion Symmetry Notation. *Pure Appl. Chem.*, 69:1651–1657, 1997.
- [42] R. K. Harris, E. D. Becker, S. M. Cabral de Menezes, R. Goodfellow, and P. Granger. Parameters and Symbols for Use in Nuclear Magnetic Resonance. *Pure Appl. Chem.*, 69:2489–2495, 1997.

- [43] J. L. Markley, A. Bax, Y. Arata, C. W. Hilbers, R. Kaptein, B. D. Sykes, P. E. Wright, and K. Wüthrich. Recommendations for the Presentation of NMR Structures of Proteins and Nucleic Acids. *Pure Appl. Chem.*, 70:117–142, 1998.
- [44] J. K. G. Watson. Aspects of Quartic and Sextic Centrifugal Effects on Rotational Energy Levels. In J. R. Durig, editor, *Vibrational Spectra and Structure, Vol. 6*, pages 1–89, Amsterdam, 1977. Elsevier.
- [45] G. Graner, E. Hirota, T. Iijima, K. Kuchitsu, D. A. Ramsay, J. Vogt, and N. Vogt. Structure Data of Free Polyatomic Molecules. In K. Kuchitsu, editor, *Landolt-Börnstein, New Series, II/25C*, pages 7–10, Berlin, 2000. Springer.
- [46] Y. Morino and T. Shimanouchi. Definition and Symbolism of Molecular Force Constants. *Pure Appl. Chem.*, 50:1707–1713, 1978.
- [47] R. K. Harris, E. D. Becker, S. M. Cabral de Menezes, R. Goodfellow, and P. Granger. NMR Nomenclature. Nuclear Spin Properties and Conventions for Chemical Shifts. *Pure Appl. Chem.*, 73:1795–1818, 2001.
- [48] P. R. Bunker and P. Jensen. *Molecular Symmetry and Spectroscopy*, 2nd edition. NRC Research Press, Ottawa, 1998.
- [49] J. M. Brown, J. T. Hougen, K.-P. Huber, J. W. C. Johns, I. Kopp, H. Lefebvre-Brion, A. J. Merer, D. A. Ramsay, J. Rostas, and R. N. Zare. The Labeling of Parity Doublet Levels in Linear Molecules. *J. Mol. Spectrosc.*, 55:500–503, 1975.
- [50] 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. Kleinermanns, 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, and R. N. Zare. A Nomenclature for Λ -doublet Levels in Rotating Linear Molecules. *J. Chem. Phys.*, 89:1749–1753, 1988.
- [51] M. Hamermesh. *Group Theory and Its Application to Physical Problems*. Addison-Wesley, Reading, 1962.
- [52] H. C. Longuet-Higgins. The Symmetry Groups of Non-Rigid Molecules. *Mol. Phys.*, 6:445–460, 1963.
- [53] I. M. Mills and M. Quack. Introduction to ‘The Symmetry Groups of Non-Rigid Molecules’ by H. C. Longuet-Higgins. *Mol. Phys.*, 100:9–10, 2002.
- [54] M. Quack. Detailed Symmetry Selection Rules for Reactive Collisions. *Mol. Phys.*, 34:477–504, 1977.
- [55] 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. N. Rao, E. W. Schlag, J. K. G. Watson, and R. N. Zare. The Vibrational Numbering of Bands in the Spectra of Polyatomic Molecules. *J. Mol. Spectrosc.*, 99:482–483, 1983.
- [56] M. Terazima, N. Hirota, S. E. Braslavsky, A. Mandelis, S. E. Bialkowski, G. J. Diebold, R. J. D. Miller, D. Fournier, R. A. Palmer, and A. Tam. Quantities, Terminology, and Symbols in Photothermal and Related Spectroscopies. *Pure Appl. Chem.*, 76:1083–1118, 2004.
- [57] N. Sheppard, H. A. Willis, and J. C. Rigg. Names, Symbols, Definitions and Units of Quantities in Optical Spectroscopy. *Pure Appl. Chem.*, 57:105–120, 1985.

- [58] V. A. Fassel. Nomenclature, Symbols, Units and their Usage in Spectrochemical Analysis. I. General Atomic Emission Spectroscopy. *Pure Appl. Chem.*, 30:651–679, 1972.
- [59] W. H. Melhuish. Nomenclature, Symbols, Units and their Usage in Spectrochemical Analysis. VI: Molecular Luminescence Spectroscopy. *Pure Appl. Chem.*, 56:231–245, 1984.
- [60] J. W. Verhoeven. Glossary of Terms Used in Photochemistry. *Pure Appl. Chem.*, 68:2223–2286, 1996.
- [61] A. A. Lamola and M. S. Wrighton. Recommended Standards for Reporting Photochemical Data. *Pure Appl. Chem.*, 56:939–944, 1984.
- [62] M. Quack. Spectra and Dynamics of Coupled Vibrations in Polyatomic Molecules. *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 41:839–874, 1990.
- [63] A. G. Maki and J. S. Wells. Wavenumber Calibration Tables from Heterodyne Frequency Measurements. *NIST Special Publication 821, U.S. Department of Commerce*, 1991.
- [64] L. A. Pugh and K. N. Rao. Intensities from Infrared Spectra. In K. N. Rao, editor, *Molecular Spectroscopy: Modern Research, Vol. 2*, New York, 1978. Academic Press.
- [65] M. A. Smith, C. P. Rinsland, B. Fridovich, and K. N. Rao. Intensities and Collision Broadening Parameters from Infrared Spectra. In K. N. Rao, editor, *Molecular Spectroscopy: Modern Research, Vol. 3*, New York, 1985. Academic Press.
- [66] M. Quack. Multiphoton Excitation. In P. von Ragué Schleyer, N. Allinger, T. Clark, J. Gasteiger, P. A. Kollman, H. F. Schaefer III, and P. R. Schreiner, editors, *Encyclopedia of Computational Chemistry, Vol. 3*, pages 1775–1791, Chichester, UK, 1998. John Wiley and Sons.
- [67] J. E. Bertie, S. L. Zhang, H. H. Eysel, S. Baluja, and M. K. Ahmed. Infrared Intensities of Liquids XI: Infrared Refractive Indices from 8000 to 2 cm^{-1} , Absolute Integrated Intensities, and Dipole Moment Derivatives of Methanol at $25\text{ }^\circ\text{C}$. *Appl. Spec.*, 47:1100–1114, 1993.
- [68] J. E. Bertie and C. Dale Keefe. Comparison of Infrared Absorption Intensities of Benzene in the Liquid and Gas Phases. *J. Chem. Phys.*, 101:4610–4616, 1994.
- [69] S. R. Polo and M. K. Wilson. Infrared Intensities in Liquid and Gas Phases. *J. Chem. Phys.*, 23:2376–2377, 1955.
- [70] Th. Hahn, editor. *International Tables for Crystallography, Vol. A: Space-Group Symmetry*. Reidel, Dordrecht, 2nd edition, 1983.
- [71] S. Trasatti and R. Parsons. Interphases in Systems of Conducting Phases. *Pure Appl. Chem.*, 58:437–454, 1986.
- [72] T. Cvitaš. Quantities Describing Compositions of Mixtures. *Metrologia*, 33:35–39, 1996.
- [73] H. P. Lehmann, X. Fuentes-Arderiu, and L. F. Bertello. Glossary of Terms in Quantities and Units in Clinical Chemistry. *Pure Appl. Chem.*, 68:957–1000, 1996.
- [74] N. G. Connelly, T. Damhus, R. M. Hartshorn, and A. T. Hutton, editors. *Nomenclature of Inorganic Chemistry – IUPAC Recommendations 2005*. The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2005.
- [75] W. H. Koppenol. Names for Muonium and Hydrogen Atoms and their Ions. *Pure Appl. Chem.*, 73:377–380, 2001.

- [76] W. H. Powell. Revised Nomenclature for Radicals, Ions, Radical Ions and Related Species. *Pure Appl. Chem.*, 65:1357–1455, 1993.
- [77] W. H. Koppenol. Names for Inorganic Radicals. *Pure Appl. Chem.*, 72:437–446, 2000.
- [78] J. Brecher. Graphical Representation of Stereochemical Configuration. *Pure Appl. Chem.*, 78:1897–1970, 2006.
- [79] G. P. Moss. Basic Terminology of Stereochemistry. *Pure Appl. Chem.*, 68:2193–2222, 1996.
- [80] R. A. Alberty. Chemical Equations are Actually Matrix Equations. *J. Chem. Educ.*, 68:984, 1991.
- [81] M. B. Ewing, T. H. Lilley, G. M. Olofsson, M. T. Rätzsch, and G. Somsen. Standard Quantities in Chemical Thermodynamics. Fugacities, Activities, and Equilibrium Constants for Pure and Mixed Phases. *Pure Appl. Chem.*, 66:533–552, 1994.
- [82] H. Preston-Thomas. The International Temperature Scale of 1990 (ITS-90). *Metrologia*, 27:3–10, 1990. BIPM “Echelle Internationale de Température” de 1990 (EIT90), ISO 31-4 1992 (E).
- [83] R. N. Goldberg and R. D. Weir. Conversion of Temperatures and Thermodynamic Properties to the Basis of the International Temperature Scale of 1990. *Pure Appl. Chem.*, 64:1545–1562, 1992.
- [84] F. Pavese. Recalculation on ITS-90 of Accurate Vapour-Pressure Equations for e-H₂, Ne, N₂, O₂, Ar, CH₄, and CO₂. *J. Chem. Thermodynamics*, 25:1351–1361, 1993.
- [85] Il link al documento CCT_05_33 è il seguente <http://www.bipm.org>.
- [86] E. S. Domalski. Selected Values of Heats of Combustion and Heats of Formation of Organic Compounds Containing the Elements C, H, N, O, P, and S. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1:221–277, 1972.
- [87] R. D. Freeman. Conversion of Standard (1 atm) Thermodynamic Data to the New Standard-State Pressure, 1 bar (10⁵ Pa). *Bull. Chem. Thermodyn.*, 25:523–530, 1982.
- [88] R. D. Freeman. Conversion of Standard (1 atm) Thermodynamic Data to the New Standard-State Pressure, 1 bar (10⁵ Pa). *J. Chem. Eng. Data*, 29:105–111, 1984.
- [89] R. D. Freeman. Conversion of Standard Thermodynamic Data to the New Standard-State Pressure. *J. Chem. Educ.*, 62:681–686, 1985.
- [90] I. Tinoco Jr., K. Sauer, and J. C. Wang. *Physical Chemistry*, 4th edition. Prentice-Hall, New Jersey, 2001.
- [91] R. A. Alberty. Recommendations for Nomenclature and Tables in Biochemical Thermodynamics. *Pure Appl. Chem.*, 66:1641–1666, 1994.
- [92] D. D. Wagman, W. H. Evans, V. B. Parker, R. H. Schumm, I. Halow, S. M. Bailey, K. L. Churney, and R. L. Nuttall. The NBS Tables of Chemical Thermodynamic Properties. *J. Phys. Chem. Ref. Data, Vol. 11, Suppl. 2*, 1982.
- [93] M. W. Chase Jr., C. A. Davies, J. R. Downey Jr., D. J. Frurip, R. A. McDonald, and A. N. Syverud. JANAF Thermochemical Tables, 3rd edition. *J. Phys. Chem. Ref. Data, Vol. 14, Suppl. 1*, 1985.

- [94] V. P. Glushko, editor. *Termodinamicheskie Svoistva Individualnykh Veshchestv, Vols. 1-4*. Nauka, Moscow, 1978-85.
- [95] I. Barin, editor. *Thermochemical Data of Pure Substances*, 3rd edition. VCH, Weinheim, 1995.
- [96] M. W. Chase Jr. NIST JANAF Thermochemical Tables, 4th edition. *J. Phys. Chem. Ref. Data, Monograph 9, Suppl.*, 1998.
- [97] J. P. Cali and K. N. Marsh. An Annotated Bibliography on Accuracy in Measurement. *Pure Appl. Chem.*, 55:907-930, 1983.
- [98] G. Olofsson. Assignment and Presentation of Uncertainties of the Numerical Results of Thermodynamic Measurements. *Pure Appl. Chem.*, 53:1805-1825, 1981.
- [99] CODATA Task Group on Data for Chemical Kinetics. The Presentation of Chemical Kinetics Data in the Primary Literature. *CODATA Bull.*, 13:1-7, 1974.
- [100] K. J. Laidler. A Glossary of Terms Used in Chemical Kinetics, Including Reaction Dynamics. *Pure Appl. Chem.*, 68:149-192, 1996.
- [101] M. L. Goldberger and K. M. Watson. *Collision Theory*. Krieger, Huntington (NY), 1975.
- [102] M. Quack and J. Troe. Statistical Adiabatic Channel Model. In P. von Ragué Schleyer, N. Allinger, T. Clark, J. Gasteiger, P. A. Kollman, H. F. Schaefer III, and P. R. Schreiner, editors, *Encyclopedia of Computational Chemistry, Vol. 4*, pages 2708-2726, Chichester, UK, 1998. John Wiley and Sons.
- [103] P. van Rysselberghe. Internationales Komitee für elektrochemische Thermodynamik und Kinetik CITCE. Bericht der Kommission für elektrochemische Nomenklatur und Definitionen. *Z. Elektrochem.*, 58:530-535, 1954.
- [104] R. Parsons. Electrode Reaction Orders, Transfer Coefficients and Rate Constants. Amplification of Definitions and Recommendations for Publication of Parameters. *Pure Appl. Chem.*, 52:233-240, 1980.
- [105] N. Ibl. Nomenclature for Transport Phenomena in Electrolytic Systems. *Pure Appl. Chem.*, 53:1827-1840, 1981.
- [106] S. Trasatti. The Absolute Electrode Potential: An Explanatory Note. *Pure Appl. Chem.*, 58:955-966, 1986.
- [107] A. J. Bard, R. Parsons, and J. Jordan, editors. *Standard Potentials in Aqueous Solutions*. Marcel Dekker Inc., New York, 1985.
- [108] G. Gritzner and G. Kreysa. Nomenclature, Symbols, and Definitions in Electrochemical Engineering. *Pure Appl. Chem.*, 65:1009-1020, 1993.
- [109] A. J. Bard, R. Memming, and B. Miller. Terminology in Semiconductor Electrochemistry and Photoelectrochemical Energy Conversion. *Pure Appl. Chem.*, 63:569-596, 1991.
- [110] K. E. Heusler, D. Landolt, and S. Trasatti. Electrochemical Corrosion Nomenclature. *Pure Appl. Chem.*, 61:19-22, 1989.
- [111] M. Sluyters-Rehbach. Impedances of Electrochemical Systems: Terminology, Nomenclature and Representation. Part 1: Cells with Metal Electrodes and Liquid Solutions. *Pure Appl. Chem.*, 66:1831-1891, 1994.

- [112] A. V. Delgado, F. González-Caballero, R. J. Hunter, L. K. Koopal, and J. Lyklema. Measurement and Interpretation of Electrokinetic Phenomena. *Pure Appl. Chem.*, 77:1753–1805, 2005.
- [113] D. R. Thévenot, K. Toth, R. A. Durst, and G. S. Wilson. Electrochemical Biosensors: Recommended Definitions and Classification. *Pure Appl. Chem.*, 71:2333–2348, 1999.
- [114] R. A. Durst, A. J. Bäumner, R. W. Murray, R. P. Buck, and C. P. Andrieux. Chemically Modified Electrodes: Recommended Terminology and Definitions. *Pure Appl. Chem.*, 69:1317–1323, 1997.
- [115] T. Cvitaš and I. M. Mills. Replacing Gram-Equivalents and Normalities. *Chem. Int.*, 16:123–124, 1994.
- [116] R. P. Buck, S. Rondinini, A. K. Covington, F. G. K. Baucke, C. M. A. Brett, M. F. Camões, M. J. T. Milton, T. Mussini, R. Naumann, K. W. Pratt, P. Spitzer, and G. S. Wilson. Measurement of pH. Definition, Standards, and Procedures. *Pure Appl. Chem.*, 74:2169–2200, 2002.
- [117] R. G. Bates and E. A. Guggenheim. Report on the Standardization of pH and Related Terminology. *Pure Appl. Chem.*, 1:163–168, 1960.
- [118] R. G. Bates, editor. *Determination of pH – Theory and Practice*. John Wiley, New York, 1973.
- [119] P. R. Mussini, T. Mussini, and S. Rondinini. Reference Value Standards and Primary Standards for pH Measurements in D₂O and Aqueous-Organic Solvent Mixtures: New Accessions and Assessments. *Pure Appl. Chem.*, 69:1007–1014, 1997.
- [120] K. S. W. Sing, D. H. Everett, R. A. W. Haul, L. Moscou, R. A. Pierotti, J. Rouquérol, and T. Siemieniewska. Reporting Physisorption Data for Gas/Solid Systems with Special Reference to the Determination of Surface Area and Porosity. *Pure Appl. Chem.*, 57:603–619, 1985.
- [121] L. Ter-Minassian-Saraga. Reporting Experimental Pressure-Area Data with Film Balances. *Pure Appl. Chem.*, 57:621–632, 1985.
- [122] D. H. Everett. Reporting Data on Adsorption from Solution at the Solid/Solution Interface. *Pure Appl. Chem.*, 58:967–984, 1986.
- [123] L. Ter-Minassian-Saraga. Thin Films Including Layers: Terminology in Relation to their Preparation and Characterization. *Pure Appl. Chem.*, 66:1667–1738, 1994.
- [124] J. Haber. Manual on Catalyst Characterization. *Pure Appl. Chem.*, 63:1227–1246, 1991.
- [125] W. V. Metanomski. *Compendium of Macromolecular Nomenclature*. Blackwell, Oxford, 1991.
- [126] M. A. Van Hove, W. H. Weinberg, and C.-M. Chan. *Low-Energy Electron Diffraction: Experiment, Theory, and Surface Structure Determination*. Springer, Berlin, 1986.
- [127] D. Kind and T. J. Quinn. Metrology: Quo Vadis? *Physics Today*, 52:13–15, 1999.
- [128] I. M. Mills, P. J. Mohr, T. J. Quinn, B. N. Taylor, and E. R. Williams. Redefinition of the Kilogram: A Decision whose Time has come. *Metrologia*, 42:71–80, 2005.
- [129] I. M. Mills. On Defining Base Units in Terms of Fundamental Constants. *Mol. Phys.*, 103:2989–2999, 2005.

- [130] R. Dybkaer. Unit “katal” for Catalytic Activity. *Pure Appl. Chem.*, 73:927–931, 2001.
- [131] I. Mills and C. Morfeý. On Logarithmic Ratio Quantities and their Units. *Metrologia*, 42:246–252, 2005.
- [132] H. G. Jerrard and D. B. McNeill. *A Dictionary of Scientific Units*. Chapman Hall, London, 3rd edition, 1980.
- [133] W.-M. Yao, C. Amsler, D. Asner, R. M. Barnett, J. Beringer, P. R. Burchat, C. D. Carone, C. Caso, O. Dahl, G. D’Ambrosio, A. DeGouvea, M. Doser, S. Eidelman, J. L. Feng, T. Gherghetta, M. Goodman, C. Grab, D. E. Groom, A. Gurtu, K. Hagiwara, K. G. Hayes, J. J. Hernández-Rey, K. Hikasa, H. Jawahery, C. Kolda, Kwon Y., M. L. Mangano, A. V. Manohar, A. Masoni, R. Miquel, K. Mönig, H. Murayama, K. Nakamura, S. Navas, K. A. Olive, L. Pape, C. Patrignani, A. Piepke, G. Punzi, G. Raffelt, J. G. Smith, M. Tanabashi, J. Terning, N. A. Törnqvist, T. G. Trippe, P. Vogel, T. Watari, C. G. Wohl, R. L. Workman, P. A. Zyla, B. Armstrong, G. Harper, V. S. Lugovsky, P. Schaffner, M. Artuso, K. S. Babu, H. R. Band, E. Barberio, M. Battaglia, H. Bichsel, O. Biebel, P. Bloch, E. Blucher, R. N. Cahn, D. Casper, A. Cattai, A. Ceccucci, D. Chakraborty, R. S. Chivukula, G. Cowan, T. Damour, T. DeGrand, K. Desler, M. A. Dobbs, M. Drees, A. Edwards, D. A. Edwards, V. D. Elvira, J. Erler, V. V. Ezhela, W. Fetscher, B. D. Fields, B. Foster, D. Froidevaux, T. K. Gaiser, L. Garren, H.-J. Gerber, G. Gerbier, L. Gibbons, F. J. Gilman, G. F. Giudice, A. V. Gritsan, M. Grünewald, H. E. Haber, C. Hagmann, I. Hinchliffe, A. Höcker, P. Igo-Kemenes, J. D. Jackson, K. F. Johnson, D. Karlen, B. Kayser, D. Kirkby, S. R. Klein, K. Kleinknecht, I. G. Knowles, R. V. Kowalewski, P. Kreitz, B. Krusche, Yu. V. Kuyanov, O. Lahav, P. Langacker, A. Liddle, Z. Ligeti, T. M. Liss, L. Littenberg, L. Liu, K. S. Lugovsky, S. B. Lugovsky, T. Mannel, D. M. Manley, W. J. Marciano, A. D. Martin, D. Milstead, M. Narain, P. Nason, Y. Nir, J. A. Peacock, S. A. Prell, A. Quadt, S. Raby, B. N. Ratcliff, E. A. Razuvaev, B. Renk, P. Richardson, S. Roesler, G. Rolandi, M. T. Ronan, L. J. Rosenberg, C. T. Sachrajda, S. Sarkar, M. Schmitt, O. Schneider, D. Scott, T. Sjöstrand, G. F. Smoot, P. Sokolsky, S. Spanier, H. Spieler, A. Stahl, T. Stanev, R. E. Streitmatter, T. Sumiyoshi, N. P. Tkachenko, G. H. Trilling, G. Valencia, K. van Bibber, M. G. Vincter, D. R. Ward, B. R. Webber, J. D. Wells, M. Whalley, L. Wolfenstein, J. Womersley, C. L. Woody, A. Yamamoto, O. V. Zenin, J. Zhang, and R.-Y. Zhu. Review of Particle Physics, Particle Data Group. *J. Phys.*, G33:1–1232, 2006. The Particle Data Group website is <http://pdg.lbl.gov>.
- [134] P. Seyfried and P. Becker. The Role of N_A in the SI: An Atomic Path to the Kilogram. *Metrologia*, 31:167–172, 1994.
- [135] N. E. Holden. Atomic Weights of the Elements 1979. *Pure Appl. Chem.*, 52:2349–2384, 1980.
- [136] P. De Bièvre and H. S. Peiser. ‘Atomic Weight’ – The Name, its History, Definition, and Units. *Pure Appl. Chem.*, 64:1535–1543, 1992.
- [137] 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, and H. G. Thode. Element by Element Review of their Atomic Weights. *Pure Appl. Chem.*, 56:695–768, 1984.
- [138] K. J. R. Rosman and P. D. P. Taylor. Inorganic Chemistry Division, Commission on Atomic Weights and Isotopic Abundances, Subcommittee for Isotopic Abundance Measurements. Isotopic Compositions of the Elements 1997. *Pure Appl. Chem.*, 70:217–235, 1998.
- [139] M. E. Wieser. Inorganic Chemistry Division, Commission on Isotopic Abundances and Atomic Weights. Atomic Weights of the Elements 2005. *Pure Appl. Chem.*, 78:2051–2066, 2006.

- [140] W. C. Martin and W. L. Wiese. Atomic Spectroscopy. In G. W. F. Drake, editor, *Atomic, Molecular, and Optical Physics Reference Book*. American Institute of Physics, 1995.
- [141] J. Corish and G. M. Rosenblatt. Name and Symbol of the Element with Atomic Number 110. *Pure Appl. Chem.*, 75:1613–1615, 2003.
- [142] J. Corish and G. M. Rosenblatt. Name and Symbol of the Element with Atomic Number 111. *Pure Appl. Chem.*, 76:2101–2103, 2004.
- [143] T. B. Coplen and H. S. Peiser. History of the Recommended Atomic-Weight Values from 1882 to 1997: A Comparison of Differences from Current Values to the Estimated Uncertainties of Earlier Values. *Pure Appl. Chem.*, 70:237–257, 1998.
- [144] G. Audi, O. Bersillon, J. Blachot, and A. H. Wapstra. The NUBASE Evaluation of Nuclear and Decay Properties. *Nucl. Phys. A*, 729:3–128, 2003.
- [145] A. H. Wapstra, G. Audi, and C. Thibault. The AME2003 Atomic Mass Evaluation. (I). Evaluation of Input Data, Adjustment Procedures. *Nucl. Phys. A*, 729:129–336, 2003.
- [146] G. Audi, A. H. Wapstra, and C. Thibault. The AME2003 Atomic Mass Evaluation. (II). Tables, Graphs and References. *Nucl. Phys. A*, 729:337–676, 2003.
- [147] J. K. Böhlke, J. R. de Laeter, P. de Bièvre, H. Hidaka, H. S. Peiser, K. J. R. Rosman, and P. D. P. Taylor. Inorganic Chemistry Division, Commission on Atomic Weights and Isotopic Abundances. Isotopic Compositions of the Elements, 2001. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 34:57–67, 2005.
- [148] G. Audi and A. H. Wapstra. The 1993 Atomic Mass Evaluation. I. Atomic Mass Table. *Nucl. Phys. A*, 565:1–65, 1993.
- [149] J. R. de Laeter, J. K. Böhlke, P. de Bièvre, H. Hidaka, H. S. Peiser, K. J. R. Rosman, and P. D. P. Taylor. Inorganic Chemistry Division, Commission on Atomic Weights and Isotopic Abundances. Atomic Weights of the Elements: Review 2000. *Pure Appl. Chem.*, 75:683–800, 2003.
- [150] T. B. Coplen, J. K. Böhlke, P. De Bièvre, T. Ding, N. E. Holden, J. A. Hopple, H. R. Krouse, A. Lamberty, H. S. Peiser, K. Révész, S. E. Rieder, K. J. R. Rosman, E. Roth, P. D. P. Taylor, R. D. Vocke Jr., and Y. K. Xiao. Inorganic Chemistry Division, Commission on Atomic Weights and Isotopic Abundances, Subcommittee on Natural Isotopic Fractionation. Isotope-Abundance Variations of Selected Elements. *Pure Appl. Chem.*, 74:1987–2017, 2002.
- [151] N. J. Stone. Table of Nuclear Magnetic Dipole and Electric Quadrupole Moments. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 90:75–176, 2005.
- [152] B. J. Jaramillo and R. Holdaway. *The Astronomical Almanac for the Year 2003*. U.S. Government Printing Office, Washington, 2003.
- [153] R. T. Birge. On Electric and Magnetic Units and Dimensions. *The American Physics Teacher*, 2:41–48, 1934.
- [154] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*, 2nd edition. John Wiley, New York, 1975.
- [155] E. A. Guggenheim. Names of Electrical Units. *Nature*, 148:751, 1941.
- [156] D. R. Lide Jr. Use of Abbreviations in the Chemical Literature. *Pure Appl. Chem.*, 52:2229–2232, 1980.

- [157] H. Q. Porter and D. W. Turner. A Descriptive Classification of the Electron Spectroscopies. *Pure Appl. Chem.*, 59:1343–1406, 1987.
- [158] N. Sheppard. English-Derived Abbreviations for Experimental Techniques in Surface Science and Chemical Spectroscopy. *Pure Appl. Chem.*, 63:887–893, 1991.
- [159] D. A. W. Wendisch. *Acronyms and Abbreviations in Molecular Spectroscopy*. Springer, Heidelberg, 1990.

11 ALFABETO GRECO

normale	corsivo	Nome	Pronuncia e equivalente latino	Note
A, α	A, α	alfa	A	
B, β	B, β	beta	B	
Γ, γ	Γ, γ	gamma	G	
Δ, δ	Δ, δ	delta	D	
E, ε	E, ε, ε	epsilon	E	
Z, ζ	Z, ζ	zeta	Z	
H, η	H, η	eta	Ee	1
Θ, ϑ, θ	Θ, ϑ, θ	teta	Th	2
I, ι	I, ι	iota	I	
K, κ, κ	K, κ, κ	kappa	K	2
Λ, λ	Λ, λ	lambda	L	
M, μ	M, μ	mu, (mi)	M	
N, ν	N, ν	nu, (ni)	N	
Ξ, ξ	Ξ, ξ	xi	X	
O, ο	O, ο	omicron	O	
Π, π	Π, π	pi	P	
P, ρ	P, ρ	ro	R	
Σ, σ, ς	Σ, σ, ς	sigma	S	2, 3
T, τ	T, τ	tau	T	
Y, υ	Y, υ	upsilon, ipsilon	U, Y	
Φ, φ, φ	Φ, φ, φ	fi	F	2
X, χ	X, χ	chi	C	
Ψ, ψ	Ψ, ψ	psi	Ps	
Ω, ω	Ω, ω	omega	Oo	4

(1) La pronuncia in greco moderno della lettera η è come una lunga e o un breve i.

(2) Per le lettere minuscole teta, kappa, sigma e fi ci sono due varianti di carattere stampato. Per esempio per teta è talora chiamata “varteta”.

(3) La seconda variante di carattere del sigma è usato in greco solo a fine parola.

(4) Mentre omicron è pronunciato breve, omega è pronunciato lungo.

12 INDICE DEI SIMBOLI

Questo indice riporta simboli per le grandezze fisiche, unità di misura alcuni operatori matematici, stati di aggregazione, processi e particelle. I simboli degli elementi chimici sono elencati nella Sez. 6.2, p. 117. Apici, pedici, ecc. sono generalmente omessi in questo indice, cosicché, per esempio, E_p per l'energia potenziale e E_{ea} per l'affinità elettronica sono qui riportati sotto E , energia. L'alfabeto latino è elencato prima dell'alfabeto greco, i caratteri minuscoli prima di quelli maiuscoli, quelli grassetto prima di quelli in corsivo e prima dei caratteri normali, ed i simboli con uan sola lettera prima di quelli con più lettere. Quando viene riportato il riferimento a più di una pagina, quello in grassetto indica il riferimento più generale (la definizione). La sottolineatura indica che viene fornito un valore numerico relativo al simbolo.

a	accelerazione, 13 , 90, 137	A	numero di nucleone, numero di massa, 22 , 49, 121
a	vettore di traslazione fondamentale, 42 , 79, 80	A	fattore pre-esponenziale, 63, 64
a*	vettore del reticolo reciproco, 42 , 80	A	costante rotazionale, 25–27
a	coefficiente di assorbimento, 6, 36, 37, 40, 41	A	costante di accoppiamento spin-orbita, 25
a	attività, 57–59 , 70, 71, 72, 74, 75	A	costante di van der Waals-Hamaker, 77
a	area per molecola, 77 , 78	A_H	coefficiente di Hall, 43
a	simbolo di Hermann-Mauguin, 44	Al	numero di Alfvén, 82
a	costante di accoppiamento iperfine, 27	A_r	massa atomica relativa, 47 , 117
a	area superficiale specifica, 77	A	ampere (unità SI), 4, 86, 87 , 139, 143
a	diffusività termica, 81	A	base-centrato (reticolo cristallino), 44
a	lunghezza di cella unitaria, 42	A	indice di simmetria, 31–33, 51
a	coefficiente di van der Waals, 57	Å	ångström (unità di lunghezza), 24, 27, 131 , <u>135</u>
a₀	bohr (unità di lunghezza), <u>135</u>	b	vettore di Burgers, 42
a₀	raggio di Bohr, 9, 18, 20, 22 , 24, 26, 95, 96, <u>111</u> , 132, <u>135</u> , 145	b	vettore di traslazione fondamentale, 42 , 79, 80
a	assorbito (pedice), 59	b*	vettore di reticolo reciproco, 42 , 80
a	ara (unità di area), <u>136</u>	b	larghezza, 13
a	atomo, 22 , 24	b	simbolo di Hermann-Mauguin, 44
a	atto (prefisso SI), 91	b	parametro di impatto, 65
a	indice di simmetria, 32, 33	b	rapporto di mobilità, 43
a	anno (unità di tempo), 24, <u>137</u>	b	molalità, 48 , 49, 59, 62 , 70, 75, 133
am	solido amorfo, 54 , 55	b	pendenza di Tafel, 72
aq	soluzione acquosa, 54 , 55, 57, 73, 74, 97	b	lunghezza della cella unitaria, 42
at	atomizzazione (pedice), 59 , 61	b	coefficiente di van der Waals, 57
ass	assorbito (pedice), 34	b	parametro di asimmetria di Wang, 25
ads, a	adsorbito (pedice), 54, 59	b	barn (unità di area), 121 , <u>136</u>
app	apparente (apice), 60	b	indice di simmetria, 32, 33
atm	atmosfera, 40, 62 , 131, <u>138</u>	bar	bar (unità di pressione), 48, 62, 131 , <u>138</u>
amagat	unità amagat, <u>139</u>	B	densità di flusso magnetico (induzione magnetica), 17 , 27, 81, 82, 141, 146–148
A	matrice di conservazione, matrice di formula, 53	B	fattore di Debye-Waller, 42
A	potenziale magnetico vettoriale, 17 , 146–148	B	coefficiente di Einstein, probabilità transizione di Einstein, 35 , 37, 39
A	assorbanza, 5, 36 , 37, 39, 40	B	assorbanza neperiana, 36 , 37
A	affinità elettronica, 22	B	costante di van der Waals ritardata, 77
A	coefficiente di assorbimento integrato, 37–41	B	costante rotazionale, 25–27
A	attività (radioattiva), 24 , 89, 139	B	secondo coefficiente del viriale, 57
A, A	affinità di reazione, 58 , 61	B	suscettanza, 17
A	area, 13 , 14–17, 24, 34–36, 48, 49, 56, 71, 72, 77, 78, 81, 90, 136, 146	B	base-centrato (reticolo cristallino), 44
A	coefficiente di Einstein, probabilità di transizione di Einstein, 35 , 37, 39	B	bel (unità di livello di potenza), 92 , 99
A	energia di Helmholtz, 56 , 57, 78	Bi	biot (unità di corrente elettrica), 135 , <u>139</u> , 144
A	costante di accoppiamento iperfine, 27	Bq	becquerel (unità SI), 89 , <u>139</u>
		Btu	British thermal unit (unità di energia), <u>137</u>
		c	vettore di traslazione fondamentale, 42
		c	velocità vettoriale, 13 , 45, 90, 148

c^*	vettore di reticolo reciproco, 42 , 80		
c	concentrazione di quantità di sostanza, 4, 37, 38, 48 , 54, 58, 59, 62–67, 70, 72, 81, 82, 90, 131	dil sp din	diluizione (pedice), 59 spostamento (pedice), 59 dina (unità di forza), 27, 134, <u>137</u> , 144
c	simbolo di Hermann-Mauguin, 44		
c_p	capacità termica (a pressione costante), 6 , 81, 82	D D	tensore di interazione dipolare, 28 spostamento elettrico, 16 , 141, 145, 146, 148
c	velocità scalare, 13 , 64, 81, 90, 93, 95	D	dose assorbita di radiazione, <u>139</u>
c	lunghezza di cella unitaria, 42	D	costante di distorsione centrifuga, 25
c	velocità della luce in un mezzo, 34,	D	fattore di Debye-Waller, 42
c_0	velocità della luce nel vuoto, 9, 13, 16, 22, 23, 25, 34 –39, 41, 43, 95, <u>111</u> , 112, 131, 134, 143, 145–148	D D D D^T D_{AB} D	coefficiente di diffusione, 43 , 44, 72, 81, 90 energia di dissociazione, 22 , 96 coefficiente di diffusione termica, 81 costante di accoppiamento dipolare, 28 debye (unità di momento di dipolo elettrico), 26 , 39, <u>141</u>
c_1	prima costante di radiazione, 36, <u>112</u>	Da	dalton (unità di massa), 9, 22, 47, 92 , 94, <u>136</u>
c_2	seconda costante di radiazione, 36, <u>112</u>		
c	superreticolo centrato, 79		
c	centi (prefisso SI), 91		
c	combustione (pedice), 59 , 61		
c	indice di simmetria, 32		
cd	candela (unità SI), 34, 86, 88		
cd	fase condensata, 40, 41, 48, 54 , 58	e	vettore unitario, 13 , 81
cr	cristallino (pedice), 54 , 55, 61	e	carica elementare, 9, 18–20, 22 –24, 26, 29, 37, 43, 70, 92, 94–96, <u>111</u> , 139, 145
cal	caloria (unità di energia), 58 , <u>137</u>	e	estensione (ottica), 35 , 36
ccc	concentrazione critica di coagulazione, 78	e	deformazione lineare, 15
ccm	concentrazione critica di micella, 78	e	base dei logaritmi naturali, 8 , 99, 103, 106, 112
C	tensore di interazione spin-rotazione, 28	e	eletttrone, 8, 50 , <u>115</u>
C	capacità, 16 , 140, 146	e	indice di simmetria, 33
C	capacità termica, 5, 6, 8, 43, 55–57, 90, 138	eV	elettronvolt (unità di energia) 9, 92, 94 , 132, <u>137</u>
C	coefficiente di assorbimento integrato (per fase codensata), 41	erg	erg (unità di energia), 134, 135, <u>137</u> , 138, 142, 144
C	concentrazione di numero, densità di numero, 43, 45 , 48, 63–65, 68, 69, 81	u.e.	unità di entropia, <u>139</u>
C	costante rotazionale, 25–27	E	intensità del campo elettrico, 7, 16 , 24, 26, 40, 43, 73, 90, 104, 134, 140, 146, 148
C	terzo coefficiente del viriale, 57	E	energia di attivazione, energia di soglia, 64 , 66, 67
C	costante vibrazionale di forza, 27	E	potenziale di cella, 71 , 74, 75
C_n	operatore di simmetria per una rotazione di n volte, 31, 32	E	differenza di potenziale elettrico, 16 , 44, 74
Co	numero di Cowling, 82	E	forza elettromotrice, potenziale di cella, 16 , 89
C	base-centrato (reticolo cristallino), 44	E	energia, 5, 14 , 15, 17, 19–23, 32, 33, 39, 43, 45, 56, 65, 67, 95, 132, 137, 140, 146, 147, 237
C	coulomb (unità SI), 89 , 134, 139	E	estensione (ottica), 35 , 36
Ci	curie (unità di radioattività), <u>139</u>	E	operatore di simmetria identità, 31
Cl	clausius (unità di entropia), <u>138</u>	E	irradianza, 35 , 90
$^{\circ}C$	grado Celsius (unità SI), 56, 89 , 138	E	modulo di elasticità, 15
d	costante di distorsione centrifuga, 25	E	potenziale (in elettrochimica), 71 , 72, 76
d	diametro di collisione, 64	E	ampiezza di diffusione, 42
d	degenerazione, peso statistico, 26, 39, 45	E	forza termoelettrica, 43 , 44
d	diametro, distanza, spessore, 13 , 15, 146	E^*	operatore di simmetria inversione riferito allo spazio, 31
d	distanza del piano reticolare, 42	E_h	energia di Hartree, 9, 18, 20, 22, 95 , 96, <u>111</u> , 132, 137, 139, 145, 147
d	densità relativa, 14	Eu	numero di Eulero, 82
d	giorno (unità di tempo), 92 , 136, <u>137</u>	$E[x]$	valore atteso di x , 151
d	deci (prefisso SI), 91		
d	deuterone, 50, <u>115</u>		
da	deca (prefisso SI), 91		
dB	decibel, <i>vedi</i> bel (unità di livello di		

E	exa (prefisso SI), 91	gon	gon (unità di angolo), <u>136</u>
E	quantità di eccesso (apice), 60	G	vettore del reticolo reciproco, 42 , 80
E	indice di simmetria, 31, 32	<i>G</i>	conduttanza (elettrica), 17 , 89
Ei	esabinario (prefisso binario), 91	<i>G</i>	energia di Gibbs, 5, 6, 56–58 , 60, 61, 65, 66, 71, 74, 77
<i>f</i>	coefficiente di attività, 59 , 61, 70, 75	<i>G</i>	costante gravitazionale, 14, <u>112</u>
<i>f</i>	fattore di diffusione atomica, 42	<i>G</i>	sezione d'urto di assorbimento integrata (netta), 37–40
<i>f</i>	finezza, 36	<i>G</i>	modulo di taglio, 15
<i>f</i>	frequenza, 13 , 28, 29, 34–36, 41, 68, 81, 82, 88, 89, 129	<i>G</i>	conduttanza termica, 81
<i>f</i>	fattore di frizione, 15	<i>G</i>	termine vibrazionale, 25
<i>f</i>	fugacità, 58 , 74	<i>G</i>	peso, 14
<i>f</i>	intensità di un oscillatore, 37	<i>G</i>	costante di accoppiamento di Fermi, <u>111</u>
<i>f</i>	costante vibrazionale della forza, 27	<i>G_F</i>	numero di Grashof (trasporto di massa), 82
<i>f</i> (<i>c_x</i>)	funzione distribuzione della velocità, 45	<i>Gr</i>	gauss (unità di densità di flusso magnetico), 27, <u>141</u> , 142
f	femto (prefisso SI), 91	<i>G</i>	giga (prefisso SI), 91
f	fermi (unità di lunghezza), <u>135</u>	<i>Gi</i>	gigabinario (prefisso binario), 91
f	reazione di formazione (pedice), 60 , 61	<i>Gy</i>	gray (unità SI), 89 , <u>139</u>
f	fase fluida, 54	<i>Gal</i>	gal (unità di accelerazione), <u>137</u>
ft	piede (unità di lunghezza), <u>135</u>	<i>h</i>	coefficiente di scambio termico, 81 , 82
fus	fusione (pedice), 60	<i>h</i>	spessore di film, 77
F	operatore di Fock, 20 , 21	<i>h</i>	altezza, 13
F	forza, 7, 14–17 , 87, 89, 95, 104, 137, 138, 143, 144, 146–148	<i>h</i>	indice di Miller, 44 , 79, 80
F	momento angolare, 30	<i>h, ħ</i>	costante di Planck ($\hbar = h/2\pi$), 7, 9, 18, 20, 22, 23, 25, 28–30, 34–36 , 38, 39, 41–43, 45, 65–68, 95, 96, <u>111</u> , 112, 131, 132, 145
<i>F</i>	costante di Faraday, 70–75 , <u>111</u>	<i>h</i>	ecto (prefisso SI), 91
<i>F</i>	fluenza, 35	<i>h</i>	elione, 50 , <u>115</u>
<i>F</i>	frequenza, 28	<i>h</i>	ora (unità di tempo), 92 , <u>137</u>
<i>F</i>	energia di Helmholtz, 56	<i>ha</i>	ettaro (unità di area), <u>136</u>
<i>F</i>	termine rotazionale, 25	<i>hp</i>	horse power (cavallo vapore) (unità di potenza), <u>138</u>
<i>F</i>	fattore di struttura, 42	<i>hk</i>	horse power (cavallo vapore) metrico (unità di potenza), <u>138</u>
<i>F</i>	costante di forza vibrazionale, 27	H	intensità di campo magnetico, 17 , 90, 142, 145, 147, 148
<i>F</i> (<i>c</i>)	funzione distribuzione di velocità, 45	<i>H</i>	integrale di coulomb, integrale di risonanza, 19
<i>F_o</i>	numero di Fourier (trasporto di massa), 82	<i>H</i>	equivalente della dose, <u>139</u>
<i>Fr</i>	numero di Froude, 82	<i>H</i>	entalpia, 5, 6, 8, 55–58, 60, 65, 66
<i>F</i>	faccia-centrato (reticolo cristallino), 44	<i>H</i>	fluenza, 35
<i>F</i>	farad (unità SI), 89 , 140	<i>H</i>	funzione di Hamilton, hamiltoniana, 14 , 18 , 20, 21
<i>F</i>	indice di simmetria, 31	<i>Ha</i>	numero di Hartmann, 82
°F	grado Fahrenheit (unità di temperatura), <u>138</u>	<i>H</i>	funzione di Heaviside, 45, 66, 67, 107
<i>Fr</i>	franklin (unità di carica elettrica), 134 , 135, <u>139</u> , 144	<i>H</i>	henry (unità SI), 89 , 142
g	vettore del reticolo reciproco, 80	<i>H</i>	hertz (unità SI), 6, 13, 29, 88, 89
<i>g</i>	accelerazione di caduta libera, 13, 78 , 81, 82, <u>112</u> , 137	<i>Hz</i>	
<i>g</i>	degenerazione, peso statistico, 26, 39, 45	<i>i</i>	vettore unitario, 13
<i>g</i>	densità (spettrale) dei modi vibrazionali, 43	<i>i</i>	corrente elettrica, 16 , 72, 85, 86, 95, 139, 143, 144
<i>g, g_e</i>	<i>g</i> -factor, 23, 27 , 28, <u>111</u>	<i>i</i>	operatore di simmetria inversione, 31, 32
<i>g</i>	costante vibrazionale di anarmonicità, 25	<i>i</i>	radice quadrata di -1 , 18, 32, 42, 43, 98, 103,
<i>g</i>	gas, 54 , 61, 73		
<i>g</i>	grammo (unità di massa), 91, <u>136</u>		
<i>g</i>	indice di simmetria gerade, 32, 33		
<i>gr</i>	grano (unità di massa), <u>136</u>		
<i>gal</i>	gallone (unità di volume), <u>136</u>		

	107		
id	ideale (apice), 60	kg	kilogrammo (unità SI), 4, 86, 87 , 91, <u>136</u> , 143
in	pollice (unità di lunghezza), <u>135</u> , 138	kp	kilopond (unità di forza), <u>137</u>
ir	irrazionale (apice), 145 , <i>vedi</i> non-razionalizzato	kat	katal, 89
imm	immersione (pedice), 60	kgf	kilogrammo-forza (unità di forza), <u>137</u>
I	momento angolare di spin nucleare, 23, 27– 30 , 121	K	operatore di scambio, 20 , 21
<i>I</i>	sezione d'urto differenziale, 65	K	matrice di (coefficiente) di velocità, 66 , 67
<i>I</i>	corrente elettrica, 4, 16 , 17, 72, 85, 86, 95, 139, 143, 146, 147	<i>K</i>	coefficiente di assorbimento, 36
<i>I</i>	intensità, 4, 34–37 , 85, 86, 88	<i>K</i>	numero quantico di momento angolare (componente), 30 , 31, 33
<i>I</i>	forza ionica, 59 , 70, 76	<i>K</i>	modulo di volume, 15
<i>I</i>	energia di ionizzazione, 22	<i>K</i>	coefficiente di trasporto di calore, 81
<i>I</i>	momento di inerzia, 14 , 25	<i>K</i>	costante di equilibrio, 58 , 59, 61
I	corpo-centrato (reticolo cristallino), 44	<i>K</i>	integrale di scambio, 20
j	momento angolare vibrazionale interno, 30	<i>K</i>	energia cinetica, 14 , 93, 94
j	densità di corrente elettrica, 16–18 , 43, 72, 73, 90, 146–148	K_M	costante di Michaelis, 66
j	densità di flusso di particelle, 43, 44	K_{AB}	costante di accoppiamento spin-spin ridotto nucleare, 28
j	vettore unitario, 13	K_n	numero di Knudsen, 82
J	momento angolare, 30, 138	K	kelvin (unità SI), 3, 5, 40, 56, 86, 87 , 89, 138
J	operatore di Coulomb, 20 , 21	Ki	kilobinario (prefisso binario), 91
J	densità di corrente elettrica, 16 , 18, 72, 90	l	momento angolare dell'orbitale elettronico, 30 , 31
J	vettore di flusso di calore, 43, 44	l	momento angolare vibrazionale interno, 30
<i>J</i>	numero quantico del momento angolare (componente), 31–33, 51, 66, 67, 95	<i>l</i>	lunghezza della cavità, lunghezza di cammino, 36, 37
<i>J</i>	integrale di coulomb, 20	<i>l</i>	lunghezza, 4, 13 , 20, 42, 45, 53, 81, 82, 85–87, 103, 131, 135, 136, 143–145, 147
<i>J</i>	densità di flusso, 81	<i>l</i>	cammino libero medio, 43, 44
<i>J</i>	funzione di Massieu, 56	<i>l</i>	indice di Miller, 44 , 79, 80
<i>J</i>	momento di inerzia, 14	<i>l</i>	numero quantico vibrazionale, 26, 30
J_{AB}	costante di accoppiamento, 28	l	liquido, 54, 55, 61
J	joule (unità SI), 6, 9, 29, 89 , 93, 137	l	litro (unità di volume), 6, 92, <u>136</u>
k	vettore unitario, 13	lb	libbra (unità di massa), <u>136</u>
k	vettore angolare d'onda, 43	lc	cristallo liquido, 54
<i>k</i>	indice di assorbimento, 37 , 40, 41	lm	lumen (unità SI), 89
<i>k</i>	numero quantico di momento angolare (componente), 30	lx	lux (unità SI), 89
k, k_B	costante di Boltzmann, 36, 38, 39, 45 , 46, 64–67, 81, <u>111</u> , 112, 133	l.y.	anno luce (unità di lunghezza), <u>136</u>
<i>k</i>	coefficiente di trasporto di calore, 81	l atm	litro atmosfera (unità di energia), <u>137</u>
<i>k</i>	fattore di copertura, 151–154	L	momento angolare, 14, 25, 30 , 32, 138
k_D	numero d'onda angolare di Debye, 43	<i>L</i>	costante di Avogadro, 9, 45 , 47, 53, 65, 68, 78, <u>111</u> , 112, 132
<i>k</i>	costante di decadimento, 24	<i>L</i>	numero quantico del momento angolare, 30, 32
<i>k</i>	indice di Miller, 44 , 79, 80	L_D	lunghezza di Debye, 77
<i>k</i>	coefficiente di velocità, costante di velocità, 63–69, 72	<i>L</i>	lunghezza di diffusione, 49
<i>k</i>	conducibilità termica, 81 , 82, 90	<i>L</i>	livello di campo, livello di potenza, 98 , 99
k_d	coefficiente di trasporto di massa, 72 , 81, 82	<i>L</i>	induttanza, 17 , 89, 142, 147
k_H	costante della legge di Henry, 58 , 59	<i>L</i>	funzione Lagrangiana, Lagrangiano, 14 , 45
k_{rst}	costante di forza vibrazionale, 27	<i>L</i>	lunghezza, 3, 4, 6, 13 , 20, 42, 45, 53, 81, 85–87, 92, 94, 95, 131, 135, 136, 143–145, 147
k	kilo (prefisso SI), 91	<i>L</i>	coefficiente di Lorenz, 43
		<i>L</i>	radianza, 35

<i>L</i>	simbolo di termine, 117–120		
<i>Le</i>	numero di Lewis, 82	<i>n</i>	quantità di sostanza,
<i>L</i>	langmuir (unità del prodotto pressione-tempo), 81		4–7, 45, 47, 48, 51, 53 , 56, 63, 71, 77, 78, 85, 86, 88, 89
<i>L</i>	litro (unità di volume), 6, 92 , <u>136</u>	<i>n</i>	numero di carica della reazione di cella, 71 , 72
<i>m</i>	momento di dipolo magnetico, 17, 23 , 95, 121, 133, 142, 147	<i>n</i>	densità di numero, concentrazione di numero, 43– 45 , 48, 49, 53, 54, 67, 71, 81, 133
<i>m</i>	numero quantico di momento angolare (componente), 28, 30	<i>n</i>	numero di elettroni, 20
<i>m</i> [*]	massa effettiva, 43	<i>n</i>	ordine della riflessione (di Bragg), 42
<i>m</i>	mobilità elettrica, 73	<i>n</i>	ordine di reazione, 63, 66 , 72
<i>m</i>	massa, 4, 6, 7, 9, 14 , 18, 22, 28, 45, 47 , 48, 64, 77, 81, 92, 93, 111, 115, 116, 133, 136, 143, 144	<i>n</i>	numero quantico principale, 23
<i>m</i>	simbolo di Hermann-Mauguin, 44	<i>n</i>	indice di rifrazione, 34 , 37, 40, 41
<i>m</i>	molalità, 48 , 49, 58, 59, 62, 70, 75, 133	<i>n</i>	nano (prefisso SI), 91
<i>m</i>	ordine di reazione, 63, 66 , 72	<i>n</i>	fase nematica, 54
<i>m_u</i>	costante atomica di massa, 22 , 47, 94, <u>111</u> , 117	<i>N</i>	neutrone, 8, 22, 50 , <u>115</u>
<i>m_e</i>	massa dell'elettrone, 9, 18, 20, 22, 23, 29, 37, 94, 95 , 96, <u>111</u> , 132, 136	<i>N</i>	momento angolare, 30
<i>m_n</i>	massa del neutrone, <u>111</u>	<i>N</i>	numero di neutroni, 22 , 24
<i>m_p</i>	massa del protone, 29, <u>111</u>	<i>N</i>	numero di entità, 6, 24, 42, 45 , 47, 77, 78, 89
<i>m_W</i>	massa del bosone W, <u>111</u>	<i>N</i>	numero di eventi, 13, 35
<i>m_Z</i>	massa del bosone Z, <u>111</u>	<i>N</i>	numero di misure, 151
<i>m</i>	metro (unità SI), 3, 6, 26, 29, 40, 53, 86, 87 , <u>135</u> , 143	<i>N_A</i>	numero di stati, 44, 45, 66 , 67
<i>m</i>	milli (prefisso SI), 91	<i>N_E</i>	costante (numero) di Avogadro, 9, 17, 37, 41, 43, 45 , 47, 53, 92, <u>111</u> , 112, 117, 133
<i>mi</i>	miglio (unità di lunghezza), <u>135</u>	<i>N_u</i>	densità di stati, 43, 45 , 66, 67
<i>min</i>	minuto (unità di tempo), 92 , <u>137</u>	<i>N_ω</i>	numero di Nusselt (trasporto di massa), 82
<i>mix</i>	mescolamento (pedice), 60	<i>N</i>	densità (spettrale) dei modi vibrazionali, 43 , 44
<i>mol</i>	mole (unità SI), 4, 6, 40, 43, 47, 53, 59, 86, 88 , 98	<i>N</i>	newton (unità SI), 89 , <u>137</u>
<i>mon</i>	forma monomeric, 54	<i>N</i>	nucleo, 22
<i>mmHg</i>	millimetro di mercurio (unità di pressione), <u>138</u>	<i>N_p</i>	neper, 8, 92 , 98, 99
<i>M</i>	magnetizzazione, 17 , 28, 142, 147	<i>Oz</i>	oncia (unità di massa), <u>136</u>
<i>M</i>	coppia, 14	<i>Oe</i>	oerstedt (unità di intensità di campo magnetico), <u>142</u>
<i>M</i>	momento del dipolo di transizione, 26	<i>p</i>	momento di dipolo elettrico, 17, 23, 26 , 39, 41, 95, 134, 141, 146
<i>M</i>	numero quantico del momento angolare (componente), 30	<i>p</i>	momento, 14 , 18, 45
<i>M</i>	matrice per notazione del superreticolo, 79 , 80	<i>p</i>	ordine di legame, 19 , 21
<i>M</i>	massa molare, 47 , 54, 59, 117, 133	<i>p</i>	frazione di popolazione, 38 , 39, 46
<i>M_u</i>	costante di massa molare, 47 , 117	<i>p</i>	densità di numero, concentrazione di numero, 43, 44
<i>M</i>	mutua induttanza, 17	<i>p</i>	operatore di simmetria permutazione, 31
<i>M</i>	eccitanza radiante, 34 , 35	<i>p</i>	pressione, 3, 5–8, 14 , 15, 37–39, 48, 54, 56–58, 61–63, 72, 77, 81, 82, 89, 99, 131, 138
<i>M</i>	costante di Madelung, 43	<i>p</i>	probabilità, 45
<i>M_r</i>	massa molecolare relativa, 47	<i>p</i> [*]	operatore di simmetria permutazione -inversione, 31
<i>Ma</i>	numero di Mach, 82	<i>p</i>	pico (prefisso SI), 91
<i>M</i>	mega (prefisso SI), 91	<i>p</i>	superreticolo primitivo, 79
<i>M</i>	miglio nautico (unità di lunghezza), 92	<i>p</i>	protone, 8, 22, 50 , <u>115</u>
<i>M</i>	molare (unità di concentrazione), 48 , 49		
<i>Mi</i>	megabinario (prefisso binario), 91		
<i>Mx</i>	maxwell (unità di flusso magnetico), <u>142</u>		

pc	parsec (unità di lunghezza), 136	<i>Q</i>	fattore di qualità, 36
pH	pH, 5 , 70 , 75 , 76	<i>Q</i>	energia radiante, 34
pie	punto isoelettrico, 78	<i>Q</i>	quoziente di reazione, 58 , 61
pol	forma polimerica, 54	<i>Q</i>	coordinata vibrazionale normale, 27
ppb	parti per miliardo, 98	<i>Q</i>	indice di riga <i>Q</i> , 33
pph	parti per cento, 98		
ppm	parti per milione, 98	<i>r</i>	vettore di posizione, 13 , 16 , 23 , 42 , 45 , 95 , 104 , 143 , 145 , 146
ppq	parti per quadrilione, 98	<i>r</i>	distanza interatomica, 27 , 28 , 96
ppt	parti per mille, parti per trilione, 98	<i>r</i>	coordinata vibrazionale interna, 27
psi	libbre per pollice quadrato (unità di pressione), 138	<i>r</i>	raggio, 13 , 64 , 70
pzc	carica di punto zero, 78	<i>r</i>	cambio di velocità di concentrazione, 63
pphm	parti per cento milioni, 98	<i>r</i>	coordinata sferica, 13 , 18 , 20 , 21 , 96
P	matrice di densità, 21 , 46	<i>r</i>	reazione (pedice), 60
P	polarizzazione dielettrica, 16 , 40 , 146	rad	rad (unità di dose di radiazione), 139
<i>P</i>	flusso di calore, potenza termica, 57 , 81	rad	radiante (unità SI), 8 , 13 , 29 , 89 , 98 , 136
<i>P</i>	operatore di simmetria permutazione, 31	rem	rem (unità di dose equivalente), 139
<i>P</i>	potenza, 14 , 22 , 98 , 99 , 138	rifl	riflesso (pedice), 34
<i>P</i>	pressione, 14 , 39 , 48 , 58 , 81 , 89 , 131 , 138	R	vettore di reticolo, 42
<i>P</i>	probabilità, 45 , 46 , 65 , 153 , 154	R	momento angolare di orbitale nucleare, 30
<i>P</i>	densità di probabilità, 18 , 151	R	vettore di posizione di particella, 42
<i>P</i>	potenza radiante, 34 – 36	R	momento di dipolo di transizione, 26
<i>P</i>	flusso di energia sonora, 15	<i>R</i>	resistenza elettrica, 17 , 89 , 140
<i>P</i>	probabilità di transizione, 65	<i>R</i>	costante dei gas, 7 , 38 , 45 , 46 , 54 , 57 – 59 , 61 , 62 , 64 , 65 , 71 , 72 , 74 , 75 , 111
<i>P</i>	polarizzazione (di volume), 141	<i>R_H</i>	coefficiente di Hall, 43
<i>P</i>	peso, 14	<i>R</i>	coordinata vibrazionale interna, 27
<i>P*</i>	operatore di simmetria permutazione-inversione, 31	<i>R</i>	rifrazione molare, 37
<i>Pe</i>	numero di Péclet (trasporto di massa), 82	<i>R</i>	vettore di posizione, 42 , 43
<i>Pr</i>	numero di Prandtl, 82	<i>R</i>	riflettenza, 36
<i>P</i>	peta (prefisso SI), 91	<i>R</i>	potere di risoluzione, 36
<i>P</i>	poise (unità di viscosità dinamica), 138	<i>R_∞</i>	costante di Rydberg, 22 , 23 , 111
<i>P</i>	primitivo (reticolo cristallino), 44	<i>R</i>	resistenza termica, 81
<i>P</i>	indice di simmetria, 51	<i>Ra</i>	numero di Rayleigh, 82
<i>Pa</i>	pascal (unità SI), 40 , 48 , 62 , 89 , 138	<i>Re</i>	numero di Reynolds, 5 , 82
<i>Pi</i>	petabinario (prefisso binario), 91	<i>Rm, R_m</i>	numero di Reynolds magnetico, 82
q	gradiente di campo elettrico, 24 , 29 , 141	<i>R</i>	romboedrico (reticolo cristallino), 44
q	vettore angolare d'onda, 42 , 43	<i>R</i>	röntgen (unità di esposizione), 139
<i>q_D</i>	numero d'onda angolare di Debye, 43	<i>Ry</i>	rydberg (unità di energia), 137
<i>q</i>	densità di carica, 16 , 18 , 23 , 43 , 44 , 140	°R	grado Rankine (unità di temperatura termodinamica), 138
<i>q</i>	ordine di carica, 19		
<i>q</i>	flusso di massa, 81	s	momento angolare di spin elettronico, 30
<i>q</i>	coordinata generalizzata, 13 , 14 , 45	<i>s</i>	lunghezza di cammino, di arco, 13
<i>q</i>	calore, 56 , 73 , 89	<i>s</i>	parametro d'ordine, 42
<i>q</i>	funzione di partizione, 39 , 45 , 46 , 66 , 67	<i>s</i>	coefficiente di sedimentazione, 13 , 77
<i>q</i>	coordinata vibrazionale normale, 27	<i>s</i>	solubilità, 48 , 49
Q	momento di quadrupolo, 23 , 24 , 28 , 29 , 141	<i>s</i>	deviazione tipo, 151 , 152
<i>Q</i>	energia di disintegrazione, 24	<i>s</i> ²	numero di simmetria, 46
<i>Q</i>	carica elettrica, 4 , 16 , 17 , 50 , 70 – 72 , 89 , 95 , 134 , 139 , 143 , 145 , 146 , 148	<i>s</i>	stima della varianza, 151 , 152
<i>Q_W</i>	carica elettrodebole, 24	<i>s</i>	secondo (unità SI), 6 , 29 , 30 , 34 , 86 , 87 , 92 , 98 , 137 , 143 , 144
<i>Q</i>	calore, 56 , 57 , 73 , 81 , 89	<i>s</i>	solido, 54 , 73
<i>Q</i>	funzione di partizione, 39 , 45 , 46 , 67	sr	steradiante (unità SI), 13 , 89
		sln	soluzione, 54

sol	soluzione (pedice), 60	T	termine totale, termine elettronico, 25, 131
sub	sublimazione (pedice), 60	T	trasmissione, 36
S	vettore di Poynting, 17, 148	$T_{1/2}$	semivita, 24, 64, 116
S	densità corrente di probabilità, 18	T	tera (prefisso SI), 91
S	matrice di diffusione, 65	T	tesla (unità SI), 27, 89, 141
S	momento angolare di spin elettronico, 25, 27, 30, 32	Ti	terabinario (prefisso binario), 91
S	operatore di spin nucleare, 28, 29	Torr	torr (unità di pressione), 81, 131, 138
S	coefficiente di assorbimento integrato, 37, 39, 40	u	vettore spostamento, 42
S	azione, 14	u	velocità vettoriale, 13, 45, 90, 148
S	area, 13, 24, 34, 36, 78, 81, 90, 136	u	funzione di Bloch, 43
S	entropia, 5, 55–58, 60, 61, 63, 65, 66, 78, 90, 138, 139	u	mobilità elettrica, 73
S	integrale di sovrapposizione, 19, 21	u	incertezza tipo stimata, 151–154
S	entropia statistica, 46	u	indice della direzione del reticolo, 44
S	coordinata di simmetria vibrazionale, 27	u	velocità scalare, 13, 81, 90, 93, 95
Sc	numero di Schmidt, 82	u	indice di simmetria ungerade, 32, 33
Sh	numero di Sherwood, 82	u	unità di massa atomica unificata, 9, 22, 47, 92, 94, 111, 112, 116, 117, 121, 136
S_n	operatore di simmetria di rotazione-riflessione, 31	ua	unità astronomica (unità di lunghezza), 9, 92, 94, 136
Sr	numero di Strouhal, 82	U	potenziale di cella, 71
St	numero di Stanton (trasporto di massa), 82	U	differenza di potenziale elettrico, 16, 17, 44, 74
S	siemens (unità SI), 89, 132	U	potenziale di elettrodo, 71
St	stokes (unità di viscosità cinematica), 138	U	incertezza espansa, 151–154
Sv	sievert (unità SI), 89, 139	U	energia interna, 55–57, 61, 65
Sv	svedberg (unità di tempo), 137	U	“unità enzimatica”, 89
t	temperatura Celsius, 38, 46, 56, 89, 111, 138	v	velocità vettoriale, 13–16, 43, 45, 73, 90, 148
t	spessore del film, dello strato, 77	v	indice di direzione del reticolo, 44
t	tempo, 4, 8, 13, 15, 16, 24, 29, 34–36, 57, 63, 66–69, 72, 81, 82, 85–87, 92, 95, 98, 137, 143, 144	v	velocità di reazione, 63, 64, 68, 69
t	numero di trasporto, 73	v	volume specifico, volume, 6, 13, 14, 90
$t_{1/2}$	semivita, 24, 64, 116	v	velocità scalare, 13, 81, 82, 93, 95
t	tonnellata (unità di massa), 92, 136	vap	numero quantico vibrazionale, 25, 26, 33, 51
t	tritone, 50, 115, 116	vit	vaporizzazione (pedice), 60
tr	transmesso (pedice), 34	V	sostanza vitrea, 54
tr	punto triplo (pedice), 60	V	potenziale elettrico, 16, 75, 89, 140
trs	transizione (pedice), 60	V	energia potenziale, 14, 18, 23, 27, 29, 66, 96
T	costante di accoppiamento iperfine (tensore), 27	V	volume, 5–8, 13–17, 23, 34, 37, 41, 43, 45, 47, 48, 54–57, 63, 65, 66, 81, 90, 92, 111, 133, 136, 139, 146, 147
T	coppia, 14	V	volt (unità SI), 9, 89, 94, 134, 140
T_C	temperatura di Curie, 43	w	velocità vettoriale, 13, 90, 148
T	energia cinetica, 14, 18, 93, 94	w	indice della direzione del reticolo, 44
T_N	temperatura di Néel, 43	w	frazione di massa, 47, 49, 97, 98
T	periodo, intervallo di tempo caratteristico, 13	w	densità di energia radiante, 34
T	tempo di rilassamento, 13, 23, 29, 43	w	velocità scalare, 13, 81, 90, 93, 95
T	temperatura termodinamica, 3, 4, 6, 7, 35, 37, 39, 40, 43, 46, 54, 56–59, 61, 62, 64–67, 71, 72, 74, 75, 77, 81, 82, 87, 89, 133, 138	w	lavoro, 14, 56, 70, 89
		W	degenerazione, peso statistico, 26, 45
		W	numero di canali adiabatici aperti, 66, 67
		W	numero di stati, 45, 66, 67

W	energia radiante, 34 , 36	α	coefficiente di diffusione termica, 81
W	peso, 14	α	integrale di Coulomb, 19 , 20
W	lavoro, 14 , 56 , 70, 89	α	grado di reazione, 48
We	numero di Weber, 82	α	coefficiente di trasferimento elettrochimico, 72
W	watt (unità SI), 34, 88, 89 , <u>138</u>	α	coefficiente di espansione, 43, 56 , 81, 82
W	bosone W, 111 , <u>115</u>	α	costante di struttura fine, 22 , 95, <u>111</u> , 144, 145
Wb	weber (unità SI), 89 , <u>142</u>	α	costante di Madelung, 43
x	coordinata cartesiana, 13 , 18, 21	α	potere rotatorio ottico, 37
x	parametro di energia, 19	α	angolo piano, 13 , 38, 89, 92, 136
x	coordinata frazionale, 42	α	polarizzabilità, 17, 24 , 41, 95, 134, 135, 140, 141
\bar{x}	media, 151	α	funzione d'onda di spin, 19 , 20, 29
x	frazione di mole, frazione di quantità di sostanza, 48 , 58, 59, 62, 81, 97, 121, 133	α	coefficiente di trasporto, 72
x	costante vibrazionale di anarmonicità, 25	α	lunghezza di cella unitaria, 42
X	reattanza, 17	α_p	coefficiente di pressione relativa, 56
X	unità x, <u>135</u>	α	particella α , 8, 50 , <u>115</u>
		α	fase, 55, 70, 71, 78
y	coordinata cartesiana, 13 , 18, 21	β	iper-polarizzabilità, 17, 24 , 95
y	coordinata frazionale, 42	β	degenerazione, peso statistico, 26, 45
y	frazione di mole (gas), 48 , 61	β	angolo piano, 13 , 38, 89, 92, 136
y	yocto (prefisso SI), 91	β	coefficiente di pressione, 56
yd	iarda (unità di lunghezza), <u>135</u>	β	parametro reciproco dell'energia, 46
Y	ammettenza (complessa), 17	β	integrale di risonanza, 19
Y	funzione di Planck, 56	β	costante di van der Waals ritardata, 77
Y	funzione armonica sferica, 18 , 21	β	funzione d'onda di spin, 19 , 20, 29
Y	yotta (prefisso SI), 91	β	lunghezza di cella unitaria, 42
Yi	yottabinario (prefisso binario), 91	β	particella β , 50 , <u>115</u>
		β	fase, 55, 70, 71, 78
z	coordinata cartesiana, 13 , 15, 18, 21	γ	iper-polarizzabilità, 17, 24 , 95
z	numero di carica, 20, 43, 49–51, 59, 70–74,	γ	coefficiente di attività, 59 , 62, 70, 75, 76
z	frequenza di collisione, fattore di frequenza di collisione, 64, 65	γ	conducibilità, 17 , 73, 90, 132, 140, 147
z	coordinata cilindrica, 13	γ	coefficiente di espansione cubica, 43, 56 , 81
z	coordinata frazionale, 42	γ	parametro di Grüneisen, 43
z	funzione di partizione, 39, 45 , 46, 67	γ	rapporto giromagnetico, 23 , 27–29
z	zepto (prefisso SI), 91	γ	concentrazione di massa, 38, 48 , 97
Z	densità di collisione, numero di collisioni, 65	γ	angolo piano, 13 , 38, 89, 92, 136
Z	fattore di compressione, 57	γ	rapporto delle capacità termiche, 57
Z	impedenza, 17 , 70, <u>111</u>	γ	deformazione di taglio, 15
Z	funzione di partizione, 39, 45 , 46, 67	γ	tensione superficiale, 14 , 56, 77, 78, 81, 82, 90
Z	numero di protoni, numero atomico, 20, 22–24 , 49, 121	γ_p	coefficiente di trasmissione, 66
Z	bosone Z, 111 , <u>115</u>	γ	lunghezza di cella unitaria, 42
Z	zetta (prefisso SI), 91	γ	rapporto giromagnetico del protone, <u>112</u>
Zi	zettabinario (prefisso binario), 91	γ	gamma (unità di massa), <u>136</u>
		γ	fase, 78
α	polarizzabilità elettrica, 24 , 95, 146	γ	fotone, 50 , 67, 88, <u>115</u>
α	assorbanza, 36 , 37	Γ	coefficiente di assorbimento integrato, 37 , 39, 40
α	coefficiente di assorbimento, 6, 36–38, 41	Γ	parametro di Grüneisen, 43
α	fattore acustico (di assorbimento), 15	Γ	ampiezza di livello, larghezza di riga, 24, 66, 67
α	angolo di rotazione ottica, 37 , 38	Γ	concentrazione superficiale, 48, 63, 77 , 78
		Γ	funzione gamma, 107

δ	fattore acustico (di dissipazione), 15	θ_W	angolo di miscelamento debole, angolo di Weinberg, 24 , <u>111</u> , 112
δ	costante di distorsione centrifuga, 25		
δ	spostamento chimico, 29		
δ	coefficiente di decadimento, 8, 98	Θ	momento di quadrupolo, 23, 24 , 141
δ	angolo di perdita, 17	Θ	temperatura caratteristica, 46
δ	spessore, 13 , 72, 77	Θ_D	temperatura di Debye, 43 , 80
δ	funzione delta di Dirac, delta di Kronecker, 21, 23, 42, 106	Θ	angolo piano, 35
δ	variazione infinitesima, 8	Θ	temperatura, 56
Δ	costante di distorsione centrifuga, 25	κ	parametro di asimmetria, 25
Δ	difetto inerziale, 25	κ	viscosità di volume, 81
Δ	eccesso di massa, 22	κ	compressibilità, 43, 56
Δ	cambiamento di una grandezza estensiva, 60	κ	conducibilità, 6, 17 , 73, 81, 82, 90, 132, 140, 147
Δ	cambiamento finito, 15, 33, 106	κ	suscettività magnetica, 17 , 133, 142, 145, 147
Δ	indice di simmetria, 31	κ	coefficiente di assorbimento molare neperiano, 36 , 37
ε	emissività, 35	κ	rapporto delle capacità termiche, 57
ε_F	energia di Fermi, 43	κ	coefficienti di trasmissione, 65, 66
ε	deformazione lineare, 15		
ε	coefficiente di assorbimento molare decadico, 6, 36, 37	λ	tensore di conducibilità termica, 43
ε	energia orbitale, 20	λ	attività assoluta, 46, 57 , 58
ε	permittività, 16 , 40, 41, 90	λ	numero quantico di momento angolare (componente), 30
ε_0	permittività del vuoto, costante elettrica, 16 , 17, 24, 35, 37, 39–41, 43, 70, 95, <u>111</u> , 134, 143–146	λ	costante di decadimento, 24
ε	simbolo di Levi-Civita, 106	λ	cammino libero medio, 44, 65 , 80, 81
ε	funzione gradino unitario, funzione di Heaviside, 45, 67, 107	λ	conducibilità molare di uno ione, 54, 73
		λ	conducibilità termica, 43, 44, 81 , 90
		λ	costante di van der Waals, 77
		λ	lunghezza d'onda, 3, 34–38, 42–44, 131
		λ	lambda (unità di volume), <u>136</u>
ζ	costante ζ di Coriolis, 26 , 30	Λ	numero quantico di momento (componente), 30–32
ζ	potenziale elettrocinetico, 73	Λ	conducibilità molare, 6, 54, 73 , 90, 132
ζ	magnetizzabilità, 23		
ζ	parametro di schermo, 21		
η	incremento nucleare di Overhauser, 29	μ	momento di dipolo elettrico, 17, 23, 26 , 35, 39, 41, 95, 141, 146
η	sovrapotenziale, 72	μ	potenziale chimico, 5, 6, 8, 43, 44, 46, 57 , 58, 60–62
η	viscosità, 15 , 81, 82, 138	μ	mobilità elettrica, 73
ϑ	coordinata cilindrica, 13	$\tilde{\mu}$	potenziale elettrochimico, 71
ϑ	angolo piano, 13 , 38, 89, 92, 136	μ	fattore di frizione dinamica, 15
ϑ	sforzo di volume, 15	μ	coefficiente di Joule-Thomson, 57
θ	angolo di Bragg, 42	μ	momento di dipolo magnetico, 17, 23 , 95, 115, 121, 133, 142
θ	temperatura Celsius, 38, 39, 41, 46, 56 , 61–64, 87, 129, 133	μ	media, 151
θ	temperatura caratteristica, 46	μ	mobilità, 43
θ	temperatura caratteristica (di Weiss), 43	μ	permeabilità, 5, 17 , 81, 90
θ	angolo di contatto, 77	μ	massa ridotta, 14 , 64–66, 95
θ	angolo di diffusione, 65	μ	coefficiente di Thomson, 43
θ	coordinata sferica polare, 13 , 18, 21, 96	μ	viscosità, 15 , 81
θ	copertura superficiale, 77, 80	$\tilde{\mu}$	potenziale elettrochimico, 71
θ	coordinata vibrazionale interna, 27	μ_0	permeabilità del vuoto, costante magnetica, 16, 17 , 28, <u>111</u> , 133, 143, 144, 147
θ_W	temperatura caratteristica (di Weiss), 43		

μ_B	magnetone di Bohr, 23 , 27, 29, 95, <u>111</u> , 112, 115, 133, 142	ρ	6, 14 , 15, 38, 48 , 51, 54, 81, 82, 97
μ_e	momento magnetico dell'elettrone, 23 , <u>111</u>	ρ	riflettenza, 36
μ_N	magnetone nucleare, 23 , 29, <u>111</u> , 115, 116, 121, 142	ρ_A	resistività, resistività residua, 17, 43
μ_p	momento magnetico del protone, <u>112</u> , 116	σ	densità superficiale, 14
μ	micro (prefisso SI), 91	σ	tensore conducibilità, 43
μ	micron (unità di lunghezza), <u>135</u>	σ	tensore di schermo, 29
μ	muone, 8, 50 , <u>115</u> , 116	σ	sezione d'urto di assorbimento, 37, 38
ν	matrice del numero stechiometrico, 53	σ	area per molecola, 77
ν	numero di carica della reazione di cella, 71	σ	sezione d'urto, 24, 38, 64–66
ν_D	frequenza di Debye, 43	σ	conducibilità, conducibilità elettrica, 17 , 43, 44 , 73, 140
ν	frequenza, 13 , 23, 25, 28, 29, 33–36, 41, 68, 81, 88, 89, 129	σ	operatore densità, 46
ν	viscosità cinematica, 15 , 90, 138	σ	sforzo normale, 15
ν	numero stechiometrico, 53 , 58, 61, 63, 71–74	σ	operatore di simmetria riflessione, 31, 32
$\tilde{\nu}_D$	numero d'onda di Debye, 43	σ	costante di schermo, 29
$\tilde{\nu}$	numero d'onda (nel vuoto), 25 , 26, 34–39, 131	σ	parametro di ordine, 42
ν	simbolo di stato vibrazionale, 33	σ	numero quantico di spin (componente), 30
ν_e	neutrino elettronico, 50 , <u>115</u>	σ	deviazione tipo, 103, 151
ξ	costante di accoppiamento di Coriolis, 26	σ	numero quantico di spin (componente), 30
ξ	grado di reazione, avanzamento, 48 , 49, <u>53</u> , 58, 60, 63, 67	σ	costante di Stefan-Boltzmann, 35, <u>112</u>
ξ	magnetizzabilità, 23 , 95, 142, 147	σ	densità di carica superficiale, 6, 16, 71
Ξ	funzione di partizione (insieme gran canonico), 46	σ	tensione superficiale, 14 , 56, 77, 78, 81, 90
Ξ	frequenza di risonanza standardizzata, 29	σ	numero di simmetria, 46
π	momento angolare vibrazionale interno, 30	σ^2	varianza, 151
π	pressione superficiale, 77	σ	numero d'onda, 34
π	indice di simmetria, 32, 33	σ	indice di simmetria, 32, 33
π	rapporto tra la circonferenza ed il diametro, 32, 34–37, 42, 43, 45, 64, 65, 70, 95, 103, <u>112</u> , 134	Σ	numero quantico di spin (componente), 30, 32
π	pione, <u>115</u>	Σ	tensione del film, 77
Π	pressione osmotica, 59	Σ	segno di somma, 105
Π	coefficiente di Peltier, 43	Σ	
Π	segno di prodotto, 105	Σ	
Π	indice di simmetria, 31–33	τ	fattore acustico (trasmissione), 15
ρ	matrice di densità, 46	τ	intervallo di tempo caratteristico, tempo di rilassamento, 13, 43, 64
ρ	tensore resistività, 43	τ	tempo di correlazione, 29
ρ	fattore acustico (riflessione), 15	τ	vita media, tempo di vita, 24 , 43, 44, 64, 66, 115, 116
ρ	densità di carica, 16 , 18, 23, 43, 44, 140, 146–148	τ	sforzo di taglio, 15 , 81
ρ	coordinata cilindrica, 13	τ	spessore dello strato, 77
ρ	densità di stati, 43, 45 , 66, 67	τ	coefficiente di Thomson, 43
ρ	operatore densità, 46	τ	trasmittanza, 36
ρ	densità di energia radiante, 34 , 90	φ	fluidità, 15
ρ	densità di massa, concentrazione di massa, ϕ_{rst}	φ	angolo piano, 13 , 38, 89, 92, 136
		φ	frazione di volume, 97, 98
		ϕ	potenziale elettrico, 16 , 75, 89, 140, 146, 147
		ϕ	coefficiente di fugacità, 58
		ϕ	potenziale elettrico interno, 70, 71
		ϕ	orbitale molecolare, 19–21
		ϕ	coefficiente osmotico, 59
		ϕ	resa quantica, 66 , 67
		ϕ	coordinata polare sferica, 13 , 18, 21, 96
		ϕ_{rst}	costante di forza vibrazionale, 27

ϕ	frazione di volume, 48 , 97, 98		
ϕ	funzione d'onda, 18, 46	∞	stato di transizione (apice), 60
ϕ_W	funzione lavoro, 80	e	diluizione infinita (apice), 60
		o	indice di simmetria per parità pari, 32
Φ	flusso termico, potenza termica, 57 , 81		indice di simmetria per parità dispari, 32
Φ	flusso magnetico, 17 , 89, 142	[B]	concentrazione di quantità di sostanza,
Φ	energia potenziale, 14 , 23		concentrazione di B, 48 , 54, 69
Φ	resa quantica, 66	Δ_r	derivata rispetto al grado di reazione,
Φ	potere radiante, 34		58 , 60, 74
Φ	funzione lavoro, 43 , 80	$\dim(Q)$	dimensione della grandezza Q , 4
		∇	nabla, 16–18, 20, 43, 81, 96, 107 , 146, 147
χ	tensore energia dell'interazione	$[\alpha]_\lambda^\theta$	potere rotatorio ottico specifico, 37 , 38
	quadrupolare, 24 , 29	$[Q]$	unità della grandezza Q , 4
χ	orbitale atomico, 19 , 21		
χ	elettronegatività, 22		
χ	suscettività magnetica, 17 , 133, 142, 145,		
	147		
χ	potenziale elettrico superficiale, 70		
χ_e	suscettività elettrica, 16 , 145, 146		
χ_m	suscettività magnetica molare, 17 , 133,		
	142		
ψ	potenziale elettrico esterno, 70		
ψ	funzione d'onda, 18, 20, 30, 43, 96		
Ψ	flusso elettrico, 16		
Ψ	funzione d'onda, 18, 46		
ω	frequenza angolare, velocità angolare, 8,		
	13 , 23, 34, 89, 98		
ω_D	frequenza angolare di Debye, 43		
ω	degenerazione, peso statistico, 26, 45		
ω	numero d'onda armonico (vibrazionale),		
	25, 26		
ω	angolo solido, 13 , 34, 36, 65, 89		
Ω	numero quantico di momento		
	angolare (componente), 30, 32		
Ω	frequenza angolare di nutazione, 28		
Ω	funzione di partizione, 46		
Ω	angolo solido, 13 , 34–36, 65, 89		
Ω	volume nello spazio della fase, 45		
Ω	ohm, 89 , <u>140</u>		

Simboli speciali

%	per cento, 97, 98
‰	per mille, 97, 98
°	grado (unità di arco), 38, 92 , <u>136</u>
°, °	standard (apice), 60 , 71
'	minuto (unità di arco), 92 , <u>136</u>
''	secondo (unità di arco), 92 , <u>136</u>
*	complesso coniugato, 107
*	eccitazione, 50
*	sostanza pura (apice), 60
‡, ≠	complesso attivato (apice),

13 SUBJECT INDEX

Quando un riferimento bibliografico si riferisce a più di una pagina, quella in grassetto è usata per indicare il riferimento generale (la definizione) del termine. Il sottolineato è usato per indicare che in quella pagina viene fornito un valore numerico della grandezza. Le lettere greche sono ordinate secondo l'ordine che deriva dal loro nome e gli accenti sono ignorati nell'ordine alfabetico. Le forme plurali sono indicate al singolare, quando possibile.

- “amount concentration”, 4
 “chemical amount”, 4, 47, 53
- ab initio, 20
 abbondanza isotopica, 121
 abbreviazione, 159–170
 abcoulomb, 139
 accelerazione, **13**, 90, 137
 accelerazione di caduta libera, 13, **78**, 81
 standard, 112, 137
 accettori, 44
 accoppiamento dipolare, costante di, 28
 accoppiamento indiretto di spin, tensore di, 28
 accoppiamento iperfino
 costante di, 27
 hamiltoniana di, 27
 accoppiamento quadrupolare
 costante di, 29
 nucleare, costante di, 29
 acquosa
 soluzione, 97
 acquosa, soluzione, 54, **54**, 57, 74, 97
 acquoso, sistema, 74
 acro, 136
 acronimo, 159–170
 acustica, 14, 15, 98, 99
 acustico, fattore, 15
 adimensionato, 13, 82
 adsorbimento, 78
 (pedice), 59
 relativo, 78
 ridotto, 78
 affinità, 58
 di reazione, **58**
 elettronica, 22
 alfabeto greco, 185
 Alfvén, numero di, 82
 allungamento, coordinata di, 27
 alta energia, 34
 altezza, 13
 amagat, 139
 ammettenza (complessa), 17
 amorfo, solido, 54, **54**
 Ampère, legge di, 148
 ampere, 4, 85, 86, **87**, 139, 143
 ampiezza, 9, 98
 di diffusione, 42
 di livello, 24
 funzione, 18
- amplificatore di potenza, 99
 analisi della varianza, 154
 angolare
 frequenza, **13**, 89, 98
 momento, 30
 velocità, **13**, 89, 90
 angolo, 34
 di Bragg, 42
 di cella unitaria, 42
 di cella unitaria reciproca, 42
 di contatto, 77
 di diffusione, 65
 di interazione debole, **24**
 di miscelazione debole, 111
 di perdita, 17
 di rotazione, 79
 di rotazione ottica, 38
 piano, **13**, 38, 89
 piano (grado), 92
 piano (minuto), **92**
 piano (secondo), **92**
 solido, **13**, 34, 36, 65, 89
 angolo piano, **13**, 38, 89, 92, 136
 (grado), 92
 (minuto), **92**, 136
 (secondo), **92**, 136
 ångström, **131**, 135
 anno, 24, 137
 Giuliano, 136, 137
 Gregoriano, 137
 luce, 136
 Maiano, 137
 tropico, 137
 anodo, 75
 ANOVA, 154
 anticommutatore, 19
 antineutrino, 115
 antineutrino elettronico, 50
 antineutrone, 50
 antiparticelle, 115
 antiprotone, 50
 apparente (apice), 60
 approssimazione di doppia armonicità, 41
 ara, 136
 arco, lunghezza di, 13
 area, 6, **13**, 24, 34, 36, 78, 81, 90, 136
 di quadrupolo nucleare, 26
 del momento di quadrupolo elettrico, 121
 di quadrupolo, 141

elemento vettoriale di, 16
 infinitesimale, 13
 per molecola, 77
 superficiale, 48, 71, **77**, 78
 superficiale specifica, 77
 area superficiale, 48, 71, **77**, 78
 specifica, 77
 areico, 6
 Arrhenius, energia di attivazione di, 64
 asimmetria, parametro di, 25
 asimmetrica, superficie, 31, 33
 asse
 cartesiano riferito allo spazio, **35**, 39
 del cristallo, 40
 di quantizzazione, 30
 di simmetria, 30
 primario di simmetria, 32
 assorbanza, **36**, 37, **37**, 39, 40
 decadica, 5, **36**, 37
 interna, 37
 neperiana, **36**, 37
 assorbente solido, 77
 assorbimento, 33, 35, **37**, 38, 41
 acustico, 15
 acustico, fattore di, 15
 atomico, spettroscopia a, 97
 banda di, 37, 41
 coefficiente di, 6, 35–37, 40, 41
 coefficiente neperiano di, 38
 del fotone, velocità di, 67
 della radiazione, 15
 della radiazione, fattore di, 15
 fattore di, 36
 intensità di, 38–40
 netto, 38
 netto, sezione d'urto, 37
 sezione d'urto integrata, 37, 38
 spettrale, 38
 spettro di, 36
 assorbimento dei fotoni, velocità di, 67
 assorbimento di specie, 77
 assorbimento spettroscopico, intensità di, 40
 assorbita, quantità, 77
 astronomia, 94
 astronomica, unità, 9, **92**, 94, 136
 atmosfera, 131
 litro, 137
 standard, **62**, 111, 138
 atomi, numero di, 49, 50
 atomica
 massa, **22**, 47
 massa relativa, **47**
 spettroscopia, 14
 unità, 4, 18, 20, 24, 26, **94**, 95, 96, 129, 132, 135,
 143, 144, 146
 atomico
 numero, 23, 49
 standard, 137
 atomizzazione, 61
 (pedice), 59
 energia di, 61
 atomo idrogenoide, 23
 attivazione
 energia interna standard di, 65
 entalpia standard di, 65
 entropia standard di, 65
 volume di, 65
 attività, **57**, 58, 70, 72
 assoluta, 46, **57**
 catalitica, 89
 coefficiente di, 58, **59**, 61, 70, 75
 dei ioni idrogeno, 75
 di un elettrolita, 70
 ionica media, 70
 radioattiva, **24**, 89, 139
 relativa, **57**, 71
 unitaria, 74
 atto, 91
 autofunzione, 21
 autofunzione di energia, 45
 autoinduttanza, **17**, 142, 148
 avanzamento, di reazione, **48**
 Avogadro
 costante di, 4, 9, **45**, 47, 53, 111, 112
 avoirdupois, 136
 azione, **14**, 95, 138
 ua di, 138
 banda
 di assorbimento, 37, 41
 integrato netto, intensità, 39
 molecolare, 41
 intensità, 38–40
 proibita, energia di, 43
 rotazionale, 33
 transizione di, 41
 bar, 48, **131**, 138, 239
 barile (USA), 136
 barn, **121**, 136
 barriera di energia, elettronica, 64
 base dei logaritmi naturali, 8
 becquerel, **89**, 139
 Beer-Lambert, legge di, **35**, 36
 bel, **92**, 98, 99
 bilancio di incertezza, 151, **154**
 bilione, 98
 biochimica, stato standard in, 62
 biosensori elettrochimici, 70
 biot, **135**, 139, 144
 Biot-Savart, legge di, 147
 Bloch, funzione di, 43
 Bohr
 magnetone di, **23**, 29, 95, 111, 115, 133, 142

raggio di, **22**
 bohr, **135**, 146
 Boltzmann
 costante di, **36**, **45**, 46, 64, **111**
 bosone
 W, 112, **115**
 Z, 112, **115**
 Bragg, angolo di, 42
 Bravais, vettore di reticolo di, 42
 British thermal unit, **137**
 budget di incertezza, 151
 Bureau International des Poids et Mesures, 5
 Burgers, vettore di, 42

 calcolo per grandezze, 3, 129, 131–133
 calore, **56**, 73, 89
 flusso di, 81
 specifico (a pressione costante), **6**
 specifico (a volume costante), 8
 caloria
 a 15 °C, **137**
 internazionale, **137**
 termochimica, **58**, **137**
 cambiamento della grandezza, velocità di, 63
 cammino libero medio, 80
 dell'elettrone, 80
 campo, 98
 centrale di Coulomb, 23
 elettrico, **24**, 95, 104, 147
 locale di Lorentz, 40
 magnetico, **17**, 29, 141
 scalare, gradiente di, 107
 spettrale libero, 36
 campo elettrico, **24**, 95, 104, 147
 gradiente di, **29**, 141
 intensità, 8, **16**, 24, 26, 73, 90, 134, 140, 146–148
 intensità, vettore, 73
 campo magnetico, 29, 141
 vedi densità di flusso magnetico, 17
 intensità, **17**, 90, 142, 148
 campo vettoriale
 divergenza di, 107
 rotazione di, 107
 candela, 34, 85, 86, **88**
 canonico, insieme, **45**
 capacità, **16**, **140**, 147
 di raccolta della luce, **35**
 elettrica, 89
 termica (a pressione costante), **56**
 termica (a volume costante), 43, 54, **56**
 capacità termica, 5, **56**, 90, 138
 molare, 90, **139**
 specifico, 90
 capacità termica (a pressione costante), 5, 6, 8
 specifico, **6**, 81
 capacità termica (a volume costante), 8
 capacità termiche, rapporto, 57

 carattere dei simboli, 7
 caratteristico, numero, 5
 carica, **16**, 18, 20, 43, 71, 72, 95, 115, 116
 areica, 6
 del protone, 70
 dell'elettrone, 18
 densità di, **16**, 18, 23, 43, 44, 140
 effettiva, 21
 elementare, 8, 9, **22**, 24, 26, 70, 94–96, 146
 elettrica, 4, **16**, 50, 70, 89, 133, 135, 139, 144
 elettrica, densità di, 90
 elettrodebole, 24
 elettronica, 19
 ionica, 73
 ionica, numero di, 49
 numero di, 20, 49, 50, 70, 71, 73
 protonica, **22**
 puntuale, 17
 ridotta, 95
 superficiale, densità di, 6, **71**
 unità elettrostatica di, 135
 carica (ua), del protone, 139
 carica elementare, 8, 9, **22**, 24, 70, 94–96, **111**, 146
 carica elettrica, 4, **16**, 50, 70, 89, 133, 135, 139, 144
 debole, 24
 carica spaziale, 78
 catalisi enzimatica, 67
 catodo, 75
 cavallo vapore, **138**
 metrico, **138**
 cavità, 36
 Fabry-Perot, 36
 laser, 36
 CAWIA, 117, 121
 CEI, **91**
 cella
 di Harned, 76
 elettrochimica, 52, 71, 73–75
 elettrochimica, reazione in, 52
 elettrolitica, **73**, 75
 galvanica, **73**, 75
 potenziale di, 16, **71**, 89
 senza transferenza, 75
 standard, potenziale della, 74
 cella unitaria
 angolo di, 42
 lunghezza di, 42
 Celsius, grado, 138
 Celsius, temperatura, 38, 46, **56**, 89, 111, 138, **138**
 centi, 91
 centimetro, 133, **135**, 144
 centipoise, **138**
 centrifugazione, accelerazione di, 78
 centro di massa, 31
 CGPM, xi, **85**, 87, 88, 92
 chimica

cinetica, **63**, 68
 dei colloidi, **77**
 delle superfici, 77
 energia, 73
 equazione, 49
 formula, 50
 generale, 47–55
 nucleare, 34, 89, 116
 quantistica, 94
 termodinamica, 62
 chimica termodinamica, convenzioni in, 59
 chimico, potenziale, 5, 6, 8
 cicli per secondo, 89
 cinetica, 33, 50, **63**
 chimica, **63**, 68
 generalizzata, del primo ordine, 67
 CIPM, 9, 56, 94
 circolare, frequenza, 44
 circonferenza, 112
 clausius, 138
 Clausius-Mossotti, formula di, 40
 coagulazione, concentrazione critica di, 78
 CODATA, **95**, 111, 115
 coefficiente
 binomiale, 105
 complesso, 46
 del viriale, 57
 di assorbimento, 6, 35–37, 40, 41
 di assorbimento integrato, 39
 di assorbimento molare, 6
 di attività, 58, **59**, 61, 70, 75
 di decadimento, 9, **98**
 di diffusione, **43**, 72, 81
 di diffusione termica, 81
 di Einstein, **35**, 37, 39
 di espansione cubica, 43, 81
 di espansione termica, 57
 di espansività, 57
 di estinzione, 37
 di fugacità, 58
 di Hall, 43
 di Joule-Thomson, 57
 di Lorentz, 43
 di Peltier, 43
 di pressione, 56
 di scambio termico, 81
 di sedimentazione, **77**, 78
 di sedimentazione ridotta limite, 78
 di Thomson, 43
 di trasferimento anodico, 72
 di trasferimento catodico, 72
 di trasferimento di massa, **72**, 81
 di trasferimento elettrochimico, 72
 di trasmissione, 66
 di van der Waals, 57
 di velocità di variazione, 63
 neperiano di assorbimento, 38
 osmotico, 59
 osmotico (in termini di molalità), 59
 relativo di pressione, 56
 viriale di pressione, 57
 coefficiente di assorbimento, 6, 35, 37
 decadico, 36
 integrato, **37**, 39–41
 lineare decadico, 36
 lineare neperiano, 36
 molare, 6
 molare decadico, **36**, 37
 molare neperiano, 36
 neperiano, **36**, 38
 netto, 37
 coefficiente di attività
 (in termini di concentrazione), 59
 (in termini di frazione molare), 59
 (in termini di molalità), 59
 (legge di Henry), 59
 (legge di Raoult), 59
 ionica media, 70
 coefficiente di espansione
 cubica, **56**
 lineare, 56
 termica, 57
 coefficiente osmotico
 (in termini di frazione molare), 59
 coerente, unità, 93
 collisione, 65
 di tre corpi, 65
 diametro di, 64
 energia di, 66
 frequenza di, 65
 individuale, 65
 membro di, 64
 sezione d'urto, 64
 sezione d'urto media, 64, **65**
 collisioni
 densità di, 65
 numero di, 65
 numero totale di, 65
 combinazione lineare di funzioni di base, 21
 combustione, 61
 (pedice) reazione di, 59
 entalpia standard di, 61
 commutatore, 19
 complessa coniugata, matrice, 107
 complesso attivato (apice), 60
 complesso coniugato, 18, **107**
 complesso enzima-substrato, 67
 componente
 cartesiano, 107
 del momento angolare, 30
 del numero quantico, 30
 riferita allo spazio, **30**, 35

componenti principali, 29
 composito, meccanismo, 68
 composizione chimica, 47, **51**, 71
 composizione isotopica, **51**, 120
 composizione isotopica degli elementi, **117**, 122–128
 composizione isotopica terrestre tipica, 117, 120
 composto chimico, nome di, 8
 compressibilità
 fattore di, 57
 isoentropica, 56
 isoterma, 43, **56**
 compressione
 fattore di, 57
 modulo di, 15
 concentrazione, 38, **48**, 59, 62, 64, 67, 70, 72, 90, 132
 all'interfaccia tra fasi, 72
 critica di coagulazione, 78
 critica di micella, 78
 dello stato eccitato, 67
 di eccesso superficiale, 77
 di eccesso superficiale totale, 77
 di numero, 43, 63, 64
 di numero di entità, 48
 di quantità di sostanza, 4, 6, 37, **48**, 54, 62, 63, 81, 90
 in massa, 38, **48**, 97
 in quantità, 4
 in quantità di sostanza, 38
 ionica media, 70
 relativa dell'eccesso superficiale, 78
 ridotta dell'eccesso superficiale, 78
 standard, **62**, 72
 superficiale, 48, 63, **77**
 velocità di variazione della, 63
 condizione standard, **61**, 71
 conducibilità, 6, **17**, 73, 90, 132, 140, 148
 elettrica, 44, 81
 equivalente, 73
 ionica, 54, **73**
 molare, 6, 54, **73**, 90, 132
 molare di un ione, 73
 molecolare, 73
 molecolare (di entità equivalenti), 73
 termica, 44, **81**, 90
 termica, tensore di, 43
 conducibilità, tensore, 43
 conduttanza, 17
 elettrica, 89
 specifica, 73
 termica, 81
 conduttore, 87
 elemento di, 143
 elettrico, 73
 ionico, 73
 metallico, 74
 confidenza
 intervallo di, **156**
 livello di, 153, **155**
 configurazione elettronica, 8, **32**, 51
 connessione, formula di, **51**
 connettività, formula di, 52
 conservazione, matrice di, 53
 contatto
 angolo di, 77
 differenza di potenziale di, 74
 convenzione di Bates-Guggenheim, 75
 convenzione di Stoccolma, 73
 convenzioni in chimica termodinamica, 59
 convenzioni in elettrochimica, 73
 convenzioni per intensità di assorbimento, 40
 conversione di unità di misura, 129
 conversione fotoelettrochimica dell'energia, 70
 conversione, velocità di, **63**, 67, 89
 convoluzione di funzioni, 107
 coordinata, 42
 adimensionata normale, 27
 dell'elettrone, **20**, 96
 di allungamento, 27
 di flessione, 27
 di simmetria, 27
 interna, 27
 normale, 27
 normale adimensionata, 27
 per molecola fissa, 32
 perpendicolare alla superficie, 80
 riferita allo spazio, 31
 sferica polare, 21
 vibrazionale
 adimensionata, 27
 aggiustata per la massa, 27
 di simmetria, 27
 interna, 27
 normale, 27
 coordinate
 (spaziali) cartesiane, **13**, 21
 cilindriche, 13
 frazionarie, 42
 generalizzate, **13**, 14, 45
 sferiche polari, **13**
 copertura superficiale, **77**, 80
 coppia, 14
 Coriolis, costante di, **26**
 Coriolis, costante di accoppiamento di, 26
 corpo nero, 35
 correlazione, tempo di, 29
 corrente, **87**, 146
 anodica parziale, 72
 catodica, 70
 catodica parziale, 72
 di Faraday, 72
 di particella, 65
 di scambio, 72

di scambio, densità di, 72
 elettrica, 4, **16**, 72, 85, 86, 95, 139, 143, 144
 elettrica, densità di, **16**, 90
 unità elettromagnetica di, 135
 zero, 71

corrente elettrica, 4, **16**, 72, 85, 86, 95, 139, 143, 144
 densità di, **16**, 18, 72, **72**, 148

corrente termica, densità di, 44

corsivo, 7

costante

- (di velocità) di disintegrazione, 24
- di Planck, 8
- del primo ordine di velocità di variazione, **65**
- della legge di Henry, **58**, 59
- di accoppiamento di Coriolis, 26, 30
- di accoppiamento iperfino, 27
- di anarmonicità vibrazionale, 25
- di Avogadro, 4, 9, **45**, 47, 53, 111, 112
- di Boltzmann, 36, **45**, 46, 64, 111
- di Coriolis, **26**
- di decadimento, 24
- di distorsione centrifuga, 25
- di Faraday, **70**, 111
- di forza, 27
- di forza vibrazionale, 27
- di Loschmidt, 45
- di Madelung, 43
- di massa atomica, **22**, 47, 111, 117
- di massa molare, **47**
- di Michaelis, **66**, 67
- di moto, 67
- di Planck, 9, 22, **34**, 95, 111
- di radiazione, **36**, 112
- di Rydberg, 22, 111
- di schermo, 29
- di Stefan-Boltzmann, **35**, 112
- di struttura fine, **22**, 95, 111, 144, 146
- di tempo, 13
- di van der Waals, 77
- di van der Waals, ritardata, 77
- di van der Waals-Hamaker, 77
- di variazione della fluorescenza, **66**
- di velocità di decadimento, 24
- di velocità di ossidazione, 72
- di velocità di riduzione, 72
- di velocità di variazione, 63–65, 67–69
 - del primo ordine, 67
- di velocità di variazione della predissociazione, 67
- dielettrica, 16
- elettrica, **16**, 111, 143
- fisica fondamentale, 9, 95, 96, 111–133
- gravitazionale, 14
- hamiltoniana effettiva, 26
- magnetica, **17**, 111, 143
- matematica, 7, 103, **112**
- microscopica, 87
- molare dei gas, 45, 111
- reticolare, 42
- ridotta di accoppiamento, 28
- rotazionale, 25–27

costante dei gas, 45
 molare, 45, 111

costante di accoppiamento, 25

- di Coriolis, 26
- di Fermi, 111
- dipolare, 28
- iperfino, 27
- quadrupolare, 29
- ridotta, 28
- ridotta di spin-spin nucleare, 28
- spin-orbita, 25
- spin-rotazione, 28
- spin-spin nucleare, 28

costante di equilibrio, 58

- (di dissoluzione), 58
- (dissociazione di acido), 58
- (dissociazione di acqua), 58
- (idrolisi di una base)), 58
- (in termini di concentrazione), 58
- (in termini di fugacità), 58
- (in termini di molalità), 58
- (in termini di pressione), 58
- standard, **57**, 61
- termodinamico, 58

costante di massa

- atomica, **22**, 47, 111, 117
- molare, **47**, 117

costante di Planck divisa per 2π , 22, **34**, 111, 146

costante di velocità

- di ossidazione, 72
- di riduzione, 72

costante fisica, fondamentale, 111–112, 133

costante gravitazionale, 14

- eliocentrica, **92**, **94**

costante rotazionale, 25–27

- (in frequenza), 25
- (in numeri d'onda), 25

Coulomb

- campo centrale di, 23
- integrale di, **19**, 20
- modulo di, 15
- operatore di, **20**, 21

coulomb, **89**, 133, 134, 139

Coulomb, legge di, 147

covarianza, 154

Cowling, numero di, 82

cristallino, **54**, 61

- solido, 54

cristallo liquido, **54**

cristallo, asse, 40

Curie

relazione di, 133
 temperatura di, 43
 curie, 139
 curl di un campo vettoriale, 107
 dalton, 9, 22, 47, **92**, 94, 136
 Debye
 frequenza angolare di, 43
 frequenza di, 43
 lunghezza d'onda di taglio, 43
 lunghezza di, 77
 numero d'onda angolare di, 43
 numero d'onda di, 43
 temperatura di, **43**, 46, 80
 debye, **26**, 39, 141
 Debye-Hückel, teoria di, 75
 Debye-Waller, fattore di, 42
 deca, 91
 decadimento, 36
 coefficiente di, 9, **98**
 costante di, 24
 esponenziale, 67
 radioattivo, 64
 velocità di, 36
 deci, 91
 decibel, 98, **99**
 deformazione
 di taglio, 15
 di volume, 15
 lineare, 15
 degenerazione, 38, **45**
 di spin nucleare, 26
 vibrazionale, 26
 delta di Kronecker, 106
 densità, **14**, 81, 90
 corrente di probabilità, 18
 di carica, **16**, 18, 23, 43, 44, 140
 di carica elettrica, 90
 di carica superficiale, 6, **71**
 di collisioni, 65
 di corrente di scambio, 72
 di corrente elettrica, **16**, 18, 72, **72**, 90, 148
 di corrente termica, 44
 di energia, **35**, 90
 di energia della radiazione spettrale, 35
 di energia di radiazione, 149
 di energia radiante, 34
 di energia radiante spettrale, **34**
 di flusso, 81
 di flusso di massa, 81
 di flusso di numero, 81
 di flusso di particelle, 44
 di flusso magnetico, **17**, 28, 81, 89, 95, 141, 146–148
 di flusso magnetico a radiofrequenza, 28
 di flusso magnetico effettiva, 29
 di flusso magnetico statico, 28
 di flusso termico, **81**, 90
 di ioni, 43
 di massa, 6, 38
 di numero, 43, 44, 81
 di numero di entità, 45, 48
 di probabilità, **18**, **153**
 di quantità di sostanza, 139
 di stati, 43, **45**, 66, 67
 di stati di uno stato di transizione, 66
 elemento matriciale di, 21, **46**
 in massa, 48, 51, 54, 90, 97
 intrinseca di numero, 44
 massica, 6, **14**
 matrice di, 46
 operatore, 46
 relativa, 14
 specificata di numero, 44
 spettrale, dei modi vibrazionali, 43
 superficiale, 14
 superficiale di carica, 16
 deposizione di specie, 77
 determinante di Slater, 20
 determinante di una matrice quadrata, 107
 determinante secolare di Hückel, 19
 deutrone, 50, 115
 deviazione
 standard, 111, 121, 154
 standard della media, 153
 diagramma di cella, 71, **73**, 74
 diametro, **13**, 112
 di collisione, 64
 dielettrica, costante, 16
 dielettrico, spostamento, 141, 147
 difetto inerziale, 25
 differenza di potenziale, 94
 (cella elettrochimica), 74
 di Galvani, **71**, 72
 di Volta, 70
 elettrico, **16**
 elettrochimico, 71
 fase della, 17
 differenza interna, di potenziale, 71
 differenziale inesatto, 56
 diffusione, **36**, 37
 ampiezza di, 42
 angolo di, 65
 atomica, fattore di, 42
 coefficiente di, **43**, 44, 72, 81, 90
 di neutroni, 42
 elastica, 65
 lunghezza di, 43
 matrice di, 65
 velocità di, 74
 diffusività termica, 81
 diluita, soluzione, **58**, 97
 diluizione (pedice), 59

diluizione infinita, 54, **54**, 62
 (apice), 60
 soluzione acquosa a, 54

dimensione, 4
 simbolo, 4
 temporale (RMN), 29

dimensione uno, 36, 97–99

din, 133

dina, 137

dipendenza dalla pressione, 64

dipendenza dalla pressione (dell'attività), 58

dipendenza dalla temperatura, 64

dipolo, **17**, 26, 147
 magnetico, 148
 momento elettrico di, 141, 147
 momento magnetico di, 17, 142
 vettore, 17

dipolo elettrico
 lunghezza di, 26
 momento di, 17, 23, **26**, 39, 41, 95
 momento di volume di, 16
 transizione di, **35**, 39

dipolo magnetico, 148
 molecolare, momento di, 133
 momento di, 95, 133
 volumico, momento di, 17

Dirac, funzione delta di, 106

direzione del reticolo, 44

disintegrazione, energia di, 24

dispersione, attesa, 151

disposizione strutturale, 51

dissipazione acustica, 15
 fattore di, 15

dissociazione
 (potenziale minimo), energia di, 22
 (stato base), energia di, 22
 di legame, energia di, 22
 energia di, **22**
 grado di, **49**, 98

dissociazione di acido, costante di equilibrio, 58

dissoluzione, 58

distanza, **13**, 15, 17, 18, 20, 26, 44, 65
 base media, 27
 dalla struttura di sostituzione, 27
 dallo stato base, 27
 di equilibrio, 27
 effettiva, parametro di, 27
 fra i piani reticolari, 42
 interatomica, 27
 interatomica (internucleare), 27
 interatomica di equilibrio, 27
 media Terra-Sole, 92
 ridotta, 95

distorsione centrifuga, costante di, 25

distribuzione di massa, 14

distribuzione di probabilità, **153**, 156

Gaussiana, **153**, 156
 normale, **153**, 155
 rettangolare, **153**, 155
 Student-*t*, 153, **156**
 triangolare, 153

divergenza, di campo vettoriale, 107

donatori, 44

doppia armonicità, approssimazione, 41

dose
 assorbita, velocità di, 90
 di radiazione assorbita, **89**, 139
 equivalente, **89**, 139

durata, 13
 di vita, 64
 naturale, di vita, 66

eccesso
 di massa, 22
 quantità in, 77
 superficiale, **77**
 totale, 78

eccesso superficiale, 78
 concentrazione relativa, 78
 concentrazione ridotta, 78
 quantità in, **77**, 78

eccitanza radiante, **34**, 35

eccitazione, 50

eccitazione, simbolo di, 50

effetto dielettrico, **40**, 41

effetto nucleare di Overhauser, 29

effetto termico mediato, 42

efficienza, 90, **97**

effusione, velocità di, 81

Einstein
 coefficiente di, **35**, 37, 39
 probabilità di transizione di, **37**, 39
 temperatura di, 46

einstein, 67

elasticità, modulo di, 15

elementare, entità, **53**, 88, 89

elemento
 chimico, simbolo di, 50
 composizione isotopica, **117**, 122–128
 di conduttore, 143
 di corrente nel vuoto, 147
 massa atomica relativa, 117–120
 peso atomico standard, 117–120
 simbolo di, 113, 117–120

elemento chimico, 49
 simbolo di, 8, 9, **49**, 50, 113, 117–120

elemento di area, 34

elemento di integrazione, 18

elemento di matrice, 19, 21, 67, 79, **107**
 dell'operatore di Fock, 21
 di densità, **46**
 di sovrapposizione, 21

elemento matriciale di densità, 21

elettrica, conduttanza, 89
 elettrica, costante, **16**, 111, 143
 elettricità, 16–17
 quantità di, 16
 elettrico
 conduttore, 73
 spostamento, **16**
 elettrochimica, 70–73
 cella, 52, 71, 73–75
 convenzioni in, 73
 reazione, 71, 72
 reazione in cella, **74**
 elettrochimica dei semiconduttori, 70
 elettrochimico
 coefficiente di trasferimento, 72
 differenza di potenziale, 71
 potenziale, 71
 elettrocinetico, potenziale, 73
 elettrodebole, carica, 24
 elettrodi chimicamente modificati, 70
 elettrodo, 73
 negativo, 75
 positivo, 75
 potenziale di equilibrio, 72
 potenziale assoluto, 71
 potenziale di, **71**, 74, 75
 potenziale standard di, 74
 reazione di, 71
 elettrodo standard di idrogeno (EIS), 71, **74**
 elettrolitica, cella, **73**, 75
 elettromagnetica
 forza, **143**, 144
 grandezza, 144
 unità, 129, **144**
 elettromagnetico
 potenziale, **148**, 149
 sistema di unità, 143
 elettrone, 8, **50**, 115
 carica del, 18
 coordinata del, **20**, 96
 energia del, 44
 energia orbitale di un, 20
 funzione lavoro del, 43
 massa del, 9, 22, 29, 94, **95**, 111, 136
 momento magnetico del, **23**, 111
 velocità del, 44
 elettrone singolo, funzione d'onda, 44
 elettronegatività, 22
 elettroni
 di valenza, 52
 numero di, 71
 elettronico
 numero, **52**
 potenziale, **23**
 termine, 25
 elettronvolt, 9, 92, **94**, 132, 137
 elettrostatica
 classica, 70
 forza, **143**, 144
 unità, 144
 elettrostatico
 potenziale, **70**, 147
 sistema di unità, 143
 elione, **50**, 115
 schermato, momento magnetico del, 116
 elongazione relativa, 15
 emf, 16
 emissione, **33**, 38
 indotta, **35**, 37, 38
 spontanea, **35**, 67
 stimolata, 35
 emissività, 35
 emu, **135**, 139, 141–144, 146
 non razionalizzato, 133
 sistema di unità, 143
 energia, **14**, 19, 20, 22, 32, 33, 36, 45, 56, 67, 88, 89,
 92, 94, 95, 132, 137, 147, 148, 240
 autofunzione di, 45
 barriera di, 64
 chimica, 73
 cinetica, 5, **14**, 93, 94
 dell'elettrone, 44
 densità di, **35**
 di Arrhenius, 64
 di atomizzazione, 61
 di attivazione, 64
 di attivazione di Arrhenius, 64
 di banda proibita, 43
 di collisione, 66
 di disintegrazione, 24
 di dissociazione, **22**, 96
 di dissociazione di legame, 22
 di eccitazione, **131**, 132
 di Fermi, 43
 di Gibbs, 6, **56**, 74
 di Gibbs parziale molare, 6
 di Hartree, 22, **95**, 111
 di Helmholtz, **56**, 78
 di interazione elettrostatica, 43
 di interazione quadrupolare nucleare, tensore, 24
 di ionizzazione, 22
 di ionizzazione di accettore, 43
 di ionizzazione di donatore, 43
 di radiazione, densità, 149
 di soglia, **64**, 67
 elettrica, 73
 elettronica, 44
 elettronica totale, **20**, 21
 fattori di conversione, 240
 interna, 54, **56**
 interna standard di atomizzazione, 61
 interna standard di attivazione, 65

molare, 90, **129**, 240
 molare di eccitazione, 132
 molare di Gibbs, parziale, **57**, 71
 orbitale di un elettrone, 20
 parametro di, 19
 parametro reciproco del, 46
 parziale molare di Gibbs, 6, **57**, 71
 per unità d'area, 35
 potenziale, **14**, 23
 potenziale (dipolare), 26
 radiante, 34
 radiante, densità di, 34
 reazione standard di Gibbs, 58
 ridotta, 95
 sonora, flusso di, 15
 specifica, 90
 spettrale della radiazione, densità di, 35
 standard di Gibbs, 71
 totale, 65
 traslazionale di collisione, 65
 unità di, 129
 unità relativa alla, 129
 energia cinetica, 5, **14**, 93, 94
 operatore, 18
 energia della radiazione, densità spettrale di, 35
 energia di attivazione, 64
 di Arrhenius, 64
 interna standard, 65
 standard di Gibbs, 66
 energia di dissociazione, 96
 di legame, 22
 energia di eccitazione, **131**, 132
 molare, 132
 energia di Gibbs, 6
 parziale molare, **57**, 71
 standard, 71
 energia di ionizzazione, 22
 di accettore, 43
 di donatore, 43
 energia elettronica, 44
 totale, **20**, 21
 energia potenziale, **14**, 23
 differenza, 14
 energia radiante, 34
 densità spettrale di, **34**
 enpletia, **4**, 6, 45
 enpletico, 6
 entalpia, 4, 6, 8, **56**
 della reazione standard, **58**
 di formazione molare standard, 58
 di reazione, 69
 di vaporizzazione molare, 60
 molare, **6**, 8
 molare di reazione, 60
 parziale standard molare, 57
 standard di attivazione, 65
 standard di combustione, 61
 standard di formazione, 54
 standard di reazione, 5
 entalpia molare, **6**, 8
 di vaporizzazione, 60
 parziale standard, 57
 entitico, 6
 entità, 44, **47**, 50, 51, 53, 54, 72, 73, 88
 concentrazione di numero di, 48
 densità di numero di, 45, 48
 di formula, 54
 elementare, 4, **53**, 88, 89
 massa di una, 47
 prodotto, 53
 reagente, 53
 entropia, 4, **56**, 90, 138
 (massima) di equilibrio, 46
 della reazione standard, 58
 di attivazione standard, 65
 di formazione standard, 61
 interfacciale per unità di area, 78
 molare, **55**, 90, 139
 molare di reazione, 60
 parziale standard molare, 57
 specifica, 90
 statistica, 46
 unità di, **139**
 velocità di variazione della, 63
 enzima, 67
 enzimatica, unità, 89
 equazione
 chimica, 49, **53**
 chimica generica, 53
 chimica stechiometrica, **60**, 68, 69
 d'onda, 149
 di autovalore del momento angolare, 30
 di Hartree-Fock, 21
 di misura, 155
 di Nernst, **72**, 75
 di Polo-Wilson, 41
 di reazione, **52**, 61, 63, 69
 di reazione chimica, 52
 di Schrödinger, 96
 di stato di van der Waals, 57
 di velocità di variazione, 67
 matriciale, 67
 stechiometrica, 49, **52**, 60, 63, 68, 69
 stechiometrica di reazione, 60
 equazione chimica
 generica, 53
 notazione matriciale, 53
 reazione elementare, **68**, 69
 reazione elementare bimolecolare, 68
 reazione elementare unimolecolare, 68
 stechiometrica, **52**, 63, 68, 69
 equazione di misura, 155

equazioni
 della teoria elettromagnetica, **143**, 147
 di Maxwell, 144, 146, 148
 equilibrio, 52, 58, 71, **74**, 75
 chimico, 71, **74**
 chimico locale, 71
 distanza di, 27
 entropia (massima) di, 46
 potenziale di, **71**, 72, 74
 potenziale di elettrodo di, 71, **72**
 termico, 38
 equilibrio standard, costante di, **57**, 61
 equilibrio termodinamico, costante di, 58
 erg, 133, 135, 137, 138, 142, 144
 espansione
 cubica, coefficiente di, 43, **56**, 81
 lineare, coefficiente di, 56
 termica, coefficiente di, 57
 espansività, coefficiente di, 57
 esposizione, 90
 esposizione della radiazione, 35
 estensione ottica, **35**
 estensiva, grandezza, **6**, 57, 60, 81
 estensivo, 6
 estesa, incertezza, 153–155
 estinzione, 37
 estinzione, coefficiente di, 37
 esu, 133, 134, **135**, 139–141, 144–146
 non razionalizzato, 133
 sistema di unità, 143
 ettaro, 136
 ettopascal, 48
 Eulero, numero di, 82
 evaporazione (pedice), 60
 exa, 91
 exabinario, 91
 exbi, 91

 Fabry-Perot, cavità, 36
 faccia del cristallo, 44
 Fahrenheit, temperatura, 138
 farad, 89
 Faraday
 corrente di, 72
 costante di, **70**, 111
 legge di, 148
 fase, 77
 condensata, **40**, 41, 48, 54, 58
 della corrente, 17
 fluida, 54
 gassosa, **40**, 41, 55, 61
 liquida, 41, 55
 massiva, 71
 nematica, 54
 pura, 38, 59, **61**
 solida, 55, 58, **61**
 fattore
 g di Landé, 111
 g di Landé, **23**, **27**, 28
 acustico, 15
 acustico di assorbimento, 15
 acustico di dissipazione, 15
 acustico di riflessione, 15
 acustico di trasmissione, 15
 di assorbimento, 36
 di assorbimento della radiazione, 15
 di compressibilità, 57
 di compressione, 57
 di conversione, 129, 133, 134, **135**, 146
 di copertura, **154**, 155
 di Debye-Waller, 42
 di diffusione atomica, 42
 di dissipazione acustica, 15
 di frequenza, 64
 di frequenza di collisione, 65
 di normalizzazione, **18**, 20, 21
 di qualità, 36
 di riflessione, 36
 di risposta, 76
 di simmetria, 72
 di struttura, 42
 di trasmissione, 36
 dinamico di frizione, 15
 pre-esponenziale, 63, **64**
 fattore *g* nucleare, 23
 fattore di conversione della pressione, 239
 fattori di conversione dell'energia, 240
 fattoriale, 105
 femto, 91
 femtometro, 121
 fenomeni elettrocinetici, 70
 Fermi
 costante di accoppiamento di, 111
 energia di, 43
 sfera di, 44
 fermi, 135
 film, 78
 spessore di, 77
 finezza, 36
 Fischer, proiezione di, **51**, 52
 fisica atomica, 22
 fisica dei laser, 34
 fisica dei plasmi, 22
 fisica nucleare, 22, 116
 flessione, coordinata di, 27
 flow rate, 81
 fluenza, 35
 fluidità, 15
 fluorescenza, 67
 costante di variazione della, **66**
 costante di velocità di variazione della, 67
 flusso, 72, 81
 densità di, 81

di calore, 81
 di energia sonora, 15
 di massa, 81
 di probabilità, 18
 elettrico, 16
 luminoso, 89
 magnetico, **17**, 89, 142
 magnetico a radiofrequenza, densità di, 28
 magnetico, densità di, **17**, 28, 81, 89, 141, 146–148
 magnetico, densità effettiva di, 29
 radiante, 89
 riflesso, 15
 termico, densità di, **81**
 termico, vettore di, 44
 trasmesso, 15
 flusso di energia, velocità di radiazione, 149
 Fock, operatore di, **20**, 21
 fondamentale, costante fisica, 9, 95, 96, 111–112, 133
 fonone, 44
 forma della linea, 36
 forma monomerica, 54
 forma polimerica, 54
 formazione, 52, 54, 58, **61**
 (pedice) reazione di, 60
 entalpia molare standard di, 58
 entalpia standard di, 54
 entropia standard di, 61
 formula, **50**, 51
 chimica, 49–51
 del termine vibrazionale, 26
 di Clausius-Mossotti, 40
 di connessione, **51**
 di connettività, 52
 di Lorentz-Lorentz, 40
 di struttura di risonanza, **51**, 52
 empirica, 51
 entità di, 54
 matrice di, 53
 molecolare, 51
 simbolo di, 54
 stereochimica, **51**, 52
 strutturale, 51
 unità di, **47**, 51, 70
 forza, **14**, 87, 89, 95, 104, 133, 137, 144, 147–149
 costante di, 27
 di Lorentz, 149
 elettromagnetica, **143**, 144
 elettromagnetica infinitesima, 143
 elettromotrice
 vedi potenziale di cella, 16
 elettrostatica, 144
 ionica, **59**, 70, 76
 ionica (in termini di concentrazione), **59**, 70
 ionica (in termini di molalità), **59**, 70
 lineica, 144
 momento della, **14**, 90
 termoelettrica, **43**, 44
 ua di, 137
 fotochimica, 34, 35, 63–67
 fotodissociazione, 31
 fotone, 50, 67, 88, 115
 fotonica
 grandezza, 34
 intensità, 34
 Fourier, numero di, 82
 Fourier, numero di (trasporto di massa), 82
 franklin, **133**, 135, 139, 144, 145
 frazione, 97
 di massa, **47**, 48
 di mole, 121
 di popolazione, **38**
 di quantità di sostanza, 48, **48**, 97, 121, 132
 in massa, 97, 98
 in volume, **48**, 97, 98
 molare, **48**, 59, 62, 81
 molare (di gas), 48
 frazione molare, **48**, 59, 62, 81
 frequenza, **13**, 29, 34–36, 41, 67, 81, 88, 89, 129
 angolare, 9, **13**, 34, 89, 98
 angolare, unità di, 28
 circolare, 44
 circolare di Larmor, 23
 di collisione, **64**, 65
 fattore di, 65
 di Debye, 43
 di Larmor, 23
 di risonanza, 29
 di risonanza standardizzata, 29
 di transizione, 25
 di transizione radiativa cinetica, 40
 fattore di, 64
 unità di, **25**, 26
 frequenza angolare, 9, 34
 di Debye, 43
 di Larmor, 23
 di nutazione, 28
 unità di, 28
 frizione, fattore dinamico di, 15
 Froude, numero di, 82
 fugacità, **58**, 74
 coefficiente di, 58
 funzione
 a gradino unitario, 107
 ampiezza, 18
 armonica sferica, 18
 d'onda, 18
 delta di Dirac, 106
 di arco, 106
 di base dell'orbitale atomico, 21
 di Bloch, 43
 di distribuzione della velocità, 45

di Gibbs, 56
 di Hamilton, 14
 di Heaviside, 45, 67, **107**
 di Helmholtz, 56
 di Lagrange, 14
 di Legendre, 18
 di Massieu, 56
 di partizione, 38, **45**, 46, 67
 di partizione (per unità di volume), 67
 molecolare, 66
 di partizione (stato di transizione)
 molecolare, 66
 di Planck, 56
 di stato, 18
 dipendente dal tempo, 18
 esponenziale, 106
 gamma, 107
 iperbolica, 106
 lavoro, **43**, 80
 variazione della, 80
 lavoro dell'elettrone, 43
 logaritmica, 106
 matematica, 103, **105**
 settore iperbolico, 106
 trigonometrica, 105
 funzione d'onda, 18
 di elettrone, 18
 di elettrone singolo, 44
 di spin, **19**, 29
 di spin dell'elettrone, 19
 idrogenoide, 18
 normalizzata, 18
 totale, 20
 fusione (pedice), 60
 FWHM, 67

 gal, 136, 137
 gallone (UK), 136
 gallone (USA), 136
 Galvani, differenza di potenziale di, **71**, 72
 gamma, 136
 gas, **38**, 39, 54, 74, 81, 139
 di van der Waals, 57
 ideale, 39, **61**, 65
 reale, **48**, 139
 gas ideale, 39, **61**, 65
 volume molare del, 111
 gas reale, **48**, 139
 gauss, 141, 142
 Gauss, legge di, 147
 Gaussiana, 139
 distribuzione di probabilità, **153**, 156
 Gaussiano, 141
 orbitale, 21
 sistema, 41, 133, 135, 143, **144**
 sistema di unità, 143
 Gibbs
 energia di, **56**, 74
 energia di attivazione standard di, 66
 energia di reazione standard di, 58
 energia parziale molare di, 6, **57**, 71
 energia standard di, 71
 funzione di, 56
 quantità superficiale di, 78
 superficie di, **77**, 78
 superficie di separazione di, **77**, 78
 gibi, 91
 giga, 91
 gigabinario, 91
 giorno, **92**, 137
 astronomico, 137
 Giuliano, anno, 136
 giunzione liquida, 73
 giunzione liquida, potenziale della, 72, **74**, 76
 gon, 136
 gradiente, 44
 di campo elettrico, **29**, 141
 di campo elettrico, tensore, 24
 di campo scalare, 107
 di campo, tensore, 29
 gradiente di campo elettrico, **29**
 gradini, superficie a, 79
 grado, **92**, 136
 Celsius, **89**
 di angolo piano, 38
 di degenerazione, 26
 di dissociazione, **49**, 98
 di ionizzazione, 49
 di libertà, 153, **154**
 di reazione, 48, 60
 Rankine, 138
 grammo, 91, 136
 grandezza, 151, 153, 156
 adimensionata, 5, 11, 18, 99
 algebrica, 18
 base, **4**, 85, 86
 derivata, 4
 di dimensione uno, 97
 di reazione standard, 60
 elettromagnetica, 144
 estensiva, **6**, 57, 81
 estensiva (diviso area), 81
 estensiva (diviso volume), 81
 fotonica, 34
 intensiva, 81
 logaritmica, 98, 99
 luminosa, 34
 misurata, 153
 molare, 6, **56**
 molare parziale, 6
 molecolare, 37
 parziale molare, 6, **57**
 ridotta, 96

specifica, **6**, 56
 standard, 57
 tensoriale, 14, 15, 28, **104**
 grandezza base, **4**, 85, 86
 simbolo di, 4
 grandezza fisica, **3**, 4, 8, 85, 92–94, 96, 131, 135, 140, 143
 adimensionata, 97
 estensiva, 81
 intensiva, 81
 nome di, **3**, **5**, 53
 simbolo, **5**, 7–9, 11, 70, 97, 131
 unità di misura di, **3**, 18, 19
 unità SI di, 85
 valore, **3**, 129
 valore numerico, **3**, 133
 grandezza termodinamica
 estensiva, 60
 intensiva, 81
 grandezze
 adimensionate, 97
 base, 16
 derivate, 4
 matriciali, 65
 microscopiche, 16
 non-razionalizzate, 146
 grandezze fisiche
 in unità SI, 143
 prodotto di, 7
 quoziente di, 7
 tabella delle, 11
 grano, 136
 Grashof, numero di (trasporto di massa), 82
 gravitazione, costante di Newton, 112
 gray, **89**, 139
 Gregoriano, anno, 137
 gruppo
 di permutazione, 31
 molecolare puntuale, 32
 puntuale, 103
 simmetrico, 31
 Grüneisen, parametro di, 43
 guscio
 chiuso, sistema a, 20
 chiuso, specie, 21
 interno, hamiltoniana del, 20
 Hückel, teoria molecolare orbitale, 19
 Hall, coefficiente di, 43
 Hamilton, funzione di, 14
 hamiltoniana, 31
 del guscio interno, 20
 di accoppiamento iperfino, 27
 effettiva, 19
 rotazionale, 25
 vibrazionale effettiva, 26
 hamiltoniano, **18**
 Harned, cella di, **75**, 76
 Hartmann, numero di, 82
 hartree, 9, 132, 137, 146
 Hartree, energia di, 22, **95**, 111
 Hartree-Fock, 20
 Hartree-Fock, equazione di, 21
 Hartree-Fock, teoria di, 19
 Hartree-Fock-Roothaan, 21
 Heaviside, funzione di, 45, 67, **107**
 hecto, 91
 Helmholtz
 energia di, **56**, 78
 funzione di, 56
 Henry
 costante della legge di, 59
 legge di, 59
 legge di, costante, 58
 henry, 89
 Hermann-Mauguin, simbolo di, 31, **44**
 hermitiano coniugato, **19**
 hertz, 6, 88, **89**
 horse power, imperial, 138
 ideale (apice), 60
 idrocarburi planari coniugati, 19
 idrolisi di una base, 58
 illuminanza, 89
 immersione (pedice), 60
 impatto, parametro di, 65
 impedenza, **17**, 70, 98
 caratteristica, 111
 complessa, 17
 imperial horse power, 138
 incertezza, 75, 76, 115, 117, 135, 151, 153
 bilancio di, 151
 dei dati termodinamici, 62
 estesa, 153–155
 propagazione della, 155
 relativa, 97
 semi-intervallo, 103
 standard, 154
 standard composta, 154
 standard relativa, 154
 stima della, 156
 tipo, 153, **154**
 tipo composta, 154
 tipo relativa, 154
 tipo relativa composta, 154
 valutazione della, 155
 incremento di Overhauser, nucleare, 29
 indice
 dello stato base, 33
 dello stato eccitato, 33
 di assorbimento, 37
 di dose equivalente, 89
 di Miller, 79
 di Miller, vettore del, 79

di reazione, 53
 di rifrazione, 34, **34**, 40, 41
 di rifrazione complesso, **37**, 40
 di rifrazione immaginario, **37**, 40
 di Wood (notazione), 79
 per tipo di simmetria, 31
 indici di Miller, **44**, 80
 induttanza, **17**, 89, 142
 auto, **17**, 142, 148
 mutua, 17
 induzione magnetica, **17**, 27
 inerzia, momento principale, 25
 ingegneria elettrochimica, 70
 insieme, 45, **46**, 67
 canonico, **45**, 46
 gran canonico, 46
 microcanonico, 46
 insieme completo delle unità SI, 85
 integrale
 nel tempo, 14
 nel tempo dell'irradianza, 35
 nel tempo della velocità di fluensa, 35
 per due elettroni, 21
 per un elettrone, **20**, 21
 integrale di
 Coulomb, **19**, 20
 repulsione interelettronica, 20
 repulsione tra due elettroni, 19, **20**
 risonanza, 19
 scambio, 20
 sovrapposizione, 19
 integrato, 38
 intensità, 26, 34–36, 38
 del segnale, 29
 del segnale di equilibrio, 29
 dell'oscillatore, 37
 della radiazione, 35
 della radiazione elettromagnetica, 35
 di assorbimento, 38–40
 di assorbimento spettroscopico, 40
 di banda, 26, 38–40
 di banda di assorbimento integrato netto, 39
 di campo elettrico, 8, **16**, 24, 26, 73, 90, 134, 140, 146–148
 di campo magnetico, **17**, 90, 142, 148
 di linea, 26, 38, **38**, 39, 40
 fotonica, 34
 incidente, 38
 luminosa, 4, **34**, 85, 86, 88
 radiante, **34**, 88
 spettrale, **35**, 36
 trasmessa, 38
 intensiva
 grandezza fisica, 81
 intensivo, **6**
 interazione
 allungamento-flessione, 27
 di antilegame, 19
 di legame, 19
 dipolare, tensore di, 28
 elettrostatica, energia di, 43
 spin-rotazione, tensore di, 28
 interazione debole
 angolo di, **24**
 nucleare, 24
 interfaccia, 71
 tensione di, **77**
 interfacciale, entropia per unità di area, 78
 intervallo di confidenza, 153, 156
 intervallo di tempo, 35, **64**
 caratteristico, 13
 inversa di una matrice quadrata, 107
 inversione della permutazione, 31
 inversione fissa nello spazio, operatore di, 31
 inversione, operatore di, 32
 ione, 50
 carica dello, 73
 conducibilità molare di un, 73
 ione complesso, 50
 ioni, densità di, 43
 ionica
 conducibilità, 54, **73**
 forza, **59**, 70, 76
 ionico, conduttore, 73
 ionizzazione
 energia di, 22
 gradi di, 49
 potenziale di, 22
 ionizzazione di accettore, energia di, 43
 ionizzazione di donatore, energia di, 43
 iper-polarizzabilità, 95
 iper-suscettività, 16
 irradianza, 34, **35**, 90
 spettrale, 35
 irrazionale (ir), 146
 ISO, 6, **11**, 13, 14, 16, 17, 22, 25, 34, 42, 45, 47, 56, 58, 81, 97
 ISO 1000, 7
 ISO 31, **7**, 48
 ISO/IEC 80000, 7
 ISO/TC 12, xi
 isobaro, 49
 isoentropica, compressibilità, 56
 isomero di isotopo, 51
 isoterma, compressibilità, 43, **56**
 isotopica, abbondanza, 121
 isotopo, **49**, 117, 120
 isotopologi, 51
 isotopomeri, 51
 isotropo, mezzo, 16
 IUPAC, ix, **xi**, 4, 6, 11, 18, 25, 29, 34, 48, 58, 62, 63, 77, 117

IUPAP, **xi**, 11, 13, 14, 16, 18, 22, 25, 34, 42, 45, 47, 56, 81

joule, 6, **89**, 93, 137

Joule-Thomson, coefficiente di, 57

kat, 89

katal, 89

kelvin, 56, 85, 86, **87**, 89, 138

kerma, 89

kibi, 91

kilo, 91

kilobinario, 91

kilodalton, 94

kilogrammo, 4, 85, 86, **87**, 88, 91, 136, 143

kilogrammo forza, 137

kilometro, 91

kilotonnellata, 92

kilovolt, 6

Knudsen, numero di, 82

Kronecker, delta di, 106

Lagrange, funzione di, 14

Lagrangiano, 45

lambda, 136

Landé, fattore g , 111

Landé, fattore g , 23, **27**, 28

langmuir, 81

Laplaciano, operatore, 107

larghezza, 13

larghezza di riga, 36, **36**, 67

- a metà altezza, 36
- in predissociazione, 66
- naturale, 66

Larmor

- frequenza angolare di, 23
- frequenza circolare di, 23

laser, cavità, 36

lavoro, 14, **56**, 70, 89

- funzione, 80

legame all'equilibrio, lunghezza di, 96

legame, ordine di, 21

Legendre, funzione di, 18

legge di Ampère, 148

legge di Beer-Lambert, **35**, 36

legge di Biot-Savart, 147

legge di Coulomb, 147

legge di Faraday, 148

legge di Gauss, 147

legge di Henry, 59

- costante della, **58**

legge di Raoult, 59

legge di velocità, 69

legge di velocità di variazione, **68**

lettera greca, **8**, 9, 19, 32, 55

lettera latina, 32

Levi-Civita, simbolo di, 106

Lewis, numero di, 82

libbra, 136

libbra (avoirdupois), 136

libbra (metrica), 136

libbra per pollice quadrato, 138

libero cammino medio, **65**

limite per alta pressione, 66

linea di assorbimento, 37

- lorenziana, 67

linea spettrale, 37

linea, intensità, 38, **38**, 39, 40

lineica, forza, 144

lineico, 6

liquido, 16, 28, 38, 40, 41, 54, 73

- stato, 61

litro, 6, 92, 136

- atmosfera, 137

livello, 45

- ampiezza di, 24
- di ampiezza del segnale, 98
- di base (reagenti), 67
- di base (stato di transizione), 67
- di campo, **98**, 99, **99**
- di confidenza, 103, 117, 153, **155**
- di energia, 38, **38**
- di energia dell'orbitale, 19
- di intensità di campo, 92
- di potenza, 92, 99, **99**
 - sonora, 99
- di potenza del segnale, 98
- di pressione sonora, 99
- di sdoppiamento Λ , 31
- iperfino, 87
- macroscopico, **49**, 51, 52
- microscopico, **49**, 50, 52
- quantico, 46
- rotazionale, 30

logaritmo

- in base 10, 63, **98**, 99
- neperiano, 98

Lorentz

- campo locale di, 40
- coefficiente di, 43
- forza di, 149
- scelta di, 149

Lorentz-Lorentz, formula di, 40

lorenziana

- linea di assorbimento, 67

luce, 35, **87**

- anno, 136
- capacità di raccolta della, **35**
- lunghezza d'onda, 38
- velocità della, 13, 16, 25, 43, 95, 111, 143, 144, 146
- velocità nel vuoto, 9

luce trasmessa, 37

lumen, 89
 luminescenza, **36**, 37
 luminosa
 grandezza, 34
 intensità, 4, **34**, 85, 86
 luminoso, flusso, 89
 lunghezza, 3, 4, 6, **13**, 20, 42, 45, 53, 81, 85–87, 92, 94, 95, 131, 135, 136, 143, 144, 146, 148
 caratteristica di Debye, 78
 d'onda, 3, 34–36, 42, 44, 131
 d'onda della luce, 38
 d'onda della transizione, 37
 d'onda di taglio di Debye, 43
 d'onda reciproca, **25**, 90
 del cammino, 36
 del cammino di assorbimento, 37
 del dipolo, 141
 della cella unitaria reciproca, 42
 di arco, 13
 di cella unitaria, 42
 di Debye, 77
 di diffusione, 43
 di dipolo, **26**
 di dipolo elettrico, 26
 di legame all'equilibrio, 96
 di percorso, 13
 di schermo di Debye, 78
 lunghezza caratteristica di Debye, 78
 lunghezza di Debye
 caratteristica, 78
 lunghezza di schermo di Debye, 78
 lux, 89

 Mach, numero di, 82
 macroscopico, livello, **49**, 51, 52
 Madelung, costante di, 43
 magnetica nucleare, risonanza, 28
 magnetico
 campo, **17**
 flusso, **17**, 89, 142
 magnetico, vettore di potenziale, 147, 148
 magnetismo, 16–17
 magnetizzabilità, **23**, 95, 142
 magnetizzazione, **17**, 28, 148
 (di volume), 142
 magnetizzazione macroscopica di equilibrio, 28
 magnetone
 di Bohr, **23**, 29, 95, 111, 115, 133, 142
 nucleare, **23**, 29, 111, 121, 142
 Maiano, anno, 137
 massa, 4, 6, 8, **14**, 18, 20, 28, 45, 48, 77, 81, 85–89, 92–96, 112, 115, 116, 132, 135, 136, 143, 144
 atomica, **22**, 47, 117–121
 atomica relativa, 47, 117–120
 atomica, costante di, 22, 47
 centro di, 31
 concentrazione in, 38, **48**, 97
 del neutrone, 111
 del protone, 111
 dell'elettrone, 9, 22, 29, 94, **95**, 111, 136
 densità di, 6, 38
 densità di flusso di, 81
 densità in, 48, 51, 54, 90, 97
 di un atomo, 47
 di una entità, 47
 distribuzione di, 14
 eccesso di, 22
 effettiva, 43
 flusso di, 81
 frazione di, **47**, 48, 97, 98
 media, **49**, 117
 molare, **47**, 54, 117, 133
 molare media, 47, 77
 molare media (media z), 77
 molare media (media di numero), 77
 molare media (media in massa), 77
 molare relativa, 47
 molare, costante di, **47**, 117
 molecolare, 51
 molecolare relativa, 47
 numero di, **22**, 49, 50
 privo di, 70
 protonica, 29
 ridotta, 8, **14**, 64, 65, 95
 unità base SI, 91
 massa atomica, 121
 costante di, 117
 relativa, 117
 relativa degli elementi, 117–120
 relativa media, 120
 massa atomica unificata
 unità di, 9, 22, 47, **92**, 94, 111, 116, 117, 121, 136
 massa molare, 117
 massico, 6
 Massieu, funzione di, 56
 matematico
 simbolo, 7, 8, 104–108
 matrice, 5, 7, 79, 104, **107**
 complessa coniugata, 107
 coniugata hermitiana, 107
 coniugata trasposta, 107
 dei numeri stechiometrici, 53
 dell'operatore, elemento di, 18
 di conservazione, 53
 di densità, 46
 di diffusione, 65
 di formula, 53
 di sovrapposizione, 21
 di velocità di variazione (coefficiente), 66
 elemento di, 19, 21, 67, 79, **107**
 nulla, 53
 per notazione di super-reticolo, 80

quadrata inversa, 107
 quadrata, determinante di, 107
 quadrata, traccia di, 107
 trasposta, 107
 unitaria, 65, 107

Maxwell
 equazioni di, 144
 relazione di, **143**

maxwell, 142

mebi, 91

meccanica
 classica, 14–15
 quantistica, 18
 statistica, 66

meccanismo
 complesso, 68
 composito, 68
 di reazione a catena, 68
 di reazione catalitica, 68
 indiretto, 68
 multipasso, 68

media, 41, **153**, 154
 deviazione standard della, 153

mega, 91

megabinario, 91

megadalton, 94

megaelettronvolt, **92**, 116

megahertz, 6

membro di collisione, 64

metro, 3, 6, 53, 85, 86, **87**, 135, 143
 cubico (cubo), 136
 quadrato, 136

mezzo dielettrico, 16

mezzo isotropo, 16

micella, concentrazione critica di, 78

Michaelis, costante di, **66**, 67

micro, 91

microfacette, 79

microgrammo, 8

micromolare, 48

micron, 135

microscopico, livello, **49**, 50, 52

miglio, 135
 nautico, **92**, 135

miglior stima, 151

milione, parte per, 98

Miller
 indici di, 79
 vettore dell'indice di, 79

milli, 91

millibar, 48

millilitro, 92

millimetro di mercurio, 138

millimicron, 135

millimolare, 48

minuto, **92**, 137

minuto (angolo piano), **92**, 136

mione, neutrino, 115

miscela, 8, 46, **59**
 di gas, 48, **61**, 88
 di solvente acquoso organico, 76
 di solventi, 76
 isotopica, 88

miscelazione debole, angolo di, 111

miscelazione di fluidi (pedice), 60

misurando, 155

misure non correlate, 155

misure, numero di, 153

mobilità, 43
 elettrica, 73

modello di collisione a sfera rigida, 64

modi degeneri, 26

modi vibrazionali, 25
 densità spettrale di, 43
 numero di, 44

modo longitudinale di cavità, 36

modo normale, 33

modulo di
 compressione, 15
 Coulomb, 15
 elasticità, 15
 taglio, 15
 volume, 15
 Young, 15

molale, soluzione, 48

molalità, 48, **48**, 59, 62, 70, 75, 132
 ionica media, 70
 standard, 62, **62**, 75

molare, **6**, 47, 48
 conducibilità, **73**, 90
 grandezza, 6, **56**
 grandezza parziale, **57**
 massa, **47**, 54, 133
 massa media, 47, 77
 massa relativa, 47
 parziale, 57
 volume, 5, 6, 17, 41, 47, **47**, 54, 55, 57, 90, 139
 volume, parziale, 57

molarità, 48

mole, 4, 6, 43, 53, 59, 85, 86, **88**, 98

molecola
 area, 77
 polarizzabilità elettrica, 24
 top simmetrica, 33

molecola lineare, 30–32

molecolare
 formula, 51
 massa, 51
 massa relativa, 47
 momento dipolare, 26
 momento quadrupolare, 24
 orbitale, spin, 20

spettroscopia, 14
 molarità, 68
 molecole adsorbite
 numero di, 78
 molteplicità
 di spin, 32
 di spin elettronico, 32
 momento, **14**, 45
 angolare, **14**, 18, 20, 23, 28, 30, 67, 95, 121, 138
 angolare di orbitale, 32
 angolare di orbitale elettronico, 30
 angolare di orbitale elettronico più spin, 30
 angolare di orbitale nucleare, 30
 angolare di spin, **19**, 28, 116
 angolare di spin elettronico, 30
 angolare di spin nucleare, 30
 angolare ridotto, 95
 angolare totale, 32
 angolare vibrazionale interno, 30
 angolare, componente del, 30
 angolare, del numero quantico, 23
 angolare, di spin, **19**
 angolare, equazione di autovalore del, 30
 angolare, numero quantico del, **30**, 67
 angolare, operatore di, 28, **30**
 della forza, **14**, 90
 dipolare, 26
 dipolare magnetico, 17, **23**
 dipolare molecolare di transizione, 26
 dipolare, operatore di, 35
 dipolare, vettore di, 16
 elettrico di dipolo, 141, 147
 generalizzato, 14, **45**
 lineare, 95
 magnetico, **23**, 115, 116
 magnetico del protone, 112
 magnetico del protone schermato, 112, 116
 magnetico dell'elione schermato, **23**, 111
 magnetico dell'elione schermato, 116
 magnetico di dipolo, 142
 magnetico nucleare, **29**, 122–128
 molecolare, vettore di, 45
 operatore, 18
 quadrupolare, 122–128
 quadrupolare (di una molecola), 23
 quadrupolare (nucleare), 24
 quadrupolare molecolare, 24
 quadrupolare nucleare, **24**, 28
 trasferimento di, **42**, 112
 momento angolare, **14**, 18, 20, 23, 28, 30, 95, 121, 138
 numero quantico di, 26
 operatore di, 19
 momento di
 dipolo, **17**, 24, 28, 134
 dipolo (molecolare) elettrico, 26
 dipolo elettrico, 16, 17, 23, **26**, 39, 41, 95
 dipolo magnetico, 95, 121, 133
 dipolo magnetico molecolare, 133
 dipolo magnetico, unità atomica del, 95
 dipolo molecolare, 26
 dipolo volumico magnetico, 17
 inerzia, 14
 inerzia principale, 25
 quadrupolo, 121
 quadrupolo elettrico, **95**
 quadrupolo elettrico, 141
 quadrupolo elettrico, area del, 121
 transizione, 39
 multipasso, meccanismo, 68
 multiplo binario, 91
 multiplo decimale di unità, 6, 85, **91**
 muone, 8, **50**, 115
 muonio, **50**, 116
 mutua induttanza, 17

 nabla, **107**
 nano, 91
 nanometro, **3**, 6
 neper, 9, **92**, 98, 99
 Nernst
 equazione di, **72**, 75
 pendenza di, 76
 potenziale di, 72
 neutrino, 115
 elettronico, 50, **115**
 elettronico anti, 50
 mione, 115
 tau, 115
 neutrone, 8, 23, 49, 50, 115
 diffusione di, 42
 massa del, 111
 neutroni, numero di, **22**, 24
 newton, 87, **89**, 137
 Newton, costante gravitazionale, 112
 nome di composto chimico, 8
 nome di grandezza fisica, 3, **5**, 53
 nomenclatura in corrosione, 70
 non acquoso, sistema, 74
 non razionalizzata, unità, 129
 non razionalizzato, 146
 non SI, unità accettate, 92
 normale, distribuzione di probabilità, **153**
 normalizzazione, fattore di, **18**, 20, 21
 notazione matriciale, **33**, **79**
 notazione simbolica (equazione chimica), 53
 nucleare
 magnetone, **23**, 29, 111, 121, 142
 momento magnetico, **29**, 122–128
 momento quadrupolare, **24**, 28
 reazione, 50
 spin, 29
 nucleoni, numero di, **22**, 49

nuclide, **49**, 50, 113, 121
 isobaro, 49
 isotopico, 49
 proprietà del, 121–128
 numero, **8**, 24, 63
 atomico, **22**, 23, 49, 50, 117, 121
 caratteristico, 5
 complesso, 107
 concentrazione di, 43, 63, 64
 cumulativo di stati, 45
 d'onda, 36, 90, 129, 131
 densità di, 43, 81
 densità di flusso di, 81
 densità intrinseca di, 44
 densità specifica di, 44
 di Alfvén, 82
 di anioni, 70
 di atomi, 42, 50, **53**
 di canali aperti di transizione adiabatica, 66
 di carica, 20, 49, 50, 70, 71, 73
 di carica di una reazione in cella, 71
 di carica ionica, 49
 di cationi, 70
 di collisioni, 65
 di Cowling, 82
 di elettroni, 19, 20, 71, **71**, 72
 di elettroni (di una reazione elettrochimica), 71
 di entità, 6, **45**, 47, 89
 di Eulero, 82
 di eventi definiti, 67
 di fotoni assorbiti, 67
 di Fourier, 82
 di Fourier (trasporto di massa), 82
 di Froude, 82
 di Grashof, 82
 di Grashof (trasporto di massa), 82
 di Hartmann, 82
 di Knudsen, 82
 di Lewis, 82
 di Mach, 82
 di massa, **22**, 49, 50, 120, 121
 di modi vibrazionali, 44
 di moli, **4**, 53
 di neutroni, **22**, 24
 di nucleoni, **22**, 49
 di Nusselt, 82
 di Nusselt (trasporto di massa), 82
 di ossidazione, 49, 50
 di Péclet (trasporto di massa), 82
 di particelle, 68
 di Peclet, 82
 di Prandtl, 82
 di protoni, 20, **22**, 24, 49, 121
 di Rayleigh, 82
 di Reynolds, 5, **82**
 di Schmidt, 82
 di Sherwood, 82
 di simmetria, 46
 di Stanton, 82
 di Stanton (trasporto di massa), 82
 di stati, **66**, 67
 di stati (stato di transizione), **66**, 67
 di stati quantici, 45
 di Strouhal, 82
 di trasporto, 73
 di trasporto (caratteristico), 82
 di Weber, 82
 elettronico, **52**
 magnetico di Reynolds, 82
 quantico, 21, 27, **30**, 32, 33, 51, 67, 103
 quantico di momento angolare, 23, 26, **30**
 quantico di spin della particella, 115
 quantico di spin nucleare, 121
 quantico vibrazionale, 33
 scrittura di, 103
 stechiometrico, 48, 49, 52, **53**, 60, 61, 71, 72, 74
 stechiometrico, matrice, 53
 totale di collisioni, 65
 uno, 98
 numero (di entità), concentrazione di, 48
 numero d'onda, **25**, 27, 34–36, 39, 41
 angolare di Debye, 43
 armonico (vibrazionale), **25**, 26
 centrale, 39, 41
 della transizione, 25
 di Debye, 43
 in un mezzo, 34
 nel vuoto, 34
 vibrazionale
 fondamentale, 26
 numero di molecole adsorbite, 78
 numero quantico, 21, 27, 28, **30**, 32, 33, 51, 67
 azimutale, 30
 componente, 30
 del momento angolare, 67
 magnetico, 30
 principale, 23
 vibrazionale, **26**, 33
 numero stechiometrico, 52, **53**, 60, 61, 71, 72, 74
 Nusselt, numero di, 82
 Nusselt, numero di (trasporto di massa), 82
 nutazione, frequenza angolare di, 28
 Néel, temperatura di, 43

 oersted, 142
 ohm, **89**, 140
 internazionale medio, 140
 internazionale USA, 140
 oncia, 136
 oncia (avoirdupois), 136
 oncia (troy), 136
 onda di reticolo, 43
 onda, vettore angolare di, 43

operatore, 18, 96, **103**
 densità, 46
 divergenza, 18
 elemento di matrice del, 18
 energia cinetica, 18
 hamiltoniano, 18
 hermitiano coniugato del, 19
 identità, 31
 inverso, 106
 Laplaciano, 107
 logico, 107
 matematico, 7, 8, **105**
 matematico, simbolo di, 7, **8**
 momento, 18
 nabla, **107**
 simbolo di, 30
 valore atteso del, 18
 vettore, 30

operatore di
 Coulomb, **20**, 21
 Fock, **20**, 21
 Fock, elemento matriciale di, 21
 identità, 32
 inversione, 32
 inversione fissa nello spazio, 31
 momento angolare, 19, 28, **30**
 momento angolare, simbolo del, 30
 momento dipolare, 35
 orbitale elettronico, 25
 parità, 31
 permutazione, 31
 permutazione-inversione, 31
 riflessione, 32
 rotazione, 32
 rotazione-riflessione, 32
 scambio, **20**, 21
 simmetria, 31, 32
 spin elettronico, 25, **27**
 spin nucleare, 28

operazione di inversione, **31**, 44
 operazione di riflessione, 44
 operazione di riflessione con traslazione (slittopiano),
 44
 operazione di rotazione, 44
 operazione di rototraslazione (elicogira), 44
 operazione di simmetria, **31**
 operazioni di simmetria, 44
 ora, **92**, **137**

orbitale
 di singolo elettrone, 33
 di spin molecolare, 20
 di tipo Gaussiano, 21
 di tipo Slater, 21
 di un elettrone, 32
 molecolare, 19-21
 molecolare occupato, 21
 spin molecolare, 20

orbitale atomico, 19
 funzione di base del, 21

orbitale elettronico, 28
 momento angolare di, 30
 operatore di, 25
 più spin, momento angolare di, 30

orbitale nucleare
 (rotazionale), momento angolare di, 30

orbitali atomici, funzione di base degli, **19**, 21

ordine
 di carica, 19
 di legame, **19**, 21
 di reazione, 72
 di riflessione, 42
 parametro di, 42

ordine (Legendre
 funzione di), 18

ordine di reazione, **63**, 65, **65**
 complessivo, 63
 parziale, **63**, 64

origine fissa nello spazio, 31

oscillatore lineare smorzato, 9

osmole, 59

osmotica, pressione, 59

osmotico, coefficiente, 59

ossidazione
 costante di velocità di, 72
 numero di, 49, 50

ottica, spettroscopia, 32, 36

Overhauser
 effetto nucleare di, 29
 incremento nucleare di, 29

Péclet, numero di (trasporto di massa), 82

paramagnetica elettronica, risonanza, 27

parametro
 di asimmetria, 25
 di asimmetria di Wang, 25
 di distanza effettiva, 27
 di energia, 19
 di Grüneisen, 43
 di impatto, 65
 di ordine, 42
 di schermo, 21
 di Weinberg, 112
 effettivo, 112
 reciproco dell'energia, 46

parità, 31, **32**, 121
 operatore di, 31

parsec, **136**

parte per cento, 98

parte per cento milioni, 98

parte per migliaio, 98

parte per miliardo, 98

parte per milione, 98

parte per mille, 98

parte per quadrilione, 98
 parte per trilione, 98
 particella, 22, 42, 45, 54, 65, 115
 α , 8, 50, 115
 β , 50, 115
 corrente di, 65
 entrante, 50
 numero quantico di spin della, 115
 proprietà della, 115
 simbolo di, 8
 traettoria della, 65
 uscente, 50
 particella elementare
 simbolo di, 8, 22, **50**, 113, 115
 particelle, 88
 densità di flusso di, 44
 proprietà delle, 116
 partizione, 31
 partizione di carica di equilibrio, 74
 partizione molecolare (stato di transizione)
 funzione di, 66
 parziale molare, 57
 grandezza, 6
 parziale, pressione, 5, 38, **48**, 63
 pascal, **89**, 138
 passo elementare, 52
 Pauling, elettronegatività, 22
 PDG, **111**
 pebi, 91
 Peltier, coefficiente di, 43
 pendenza di Nernst, 76
 pendenza di Tafel, 72
 per mille, 98
 percento, **97**, 121
 percorso di accoppiamento, 28
 percorso libero medio, 44, 81
 percorso, lunghezza di, 13
 perdita
 angolo di, 17
 di riflessione, 36
 periodico, 13
 periodo, 13
 permeabilità, 8, **17**, 81, 90
 magnetica, 146
 relativa, 5, **17**, 146, 148
 permeabilità del vuoto, 143
 permille, **97**, 98
 permittività, **16**, 41, 90
 del vuoto, **16**, 143
 elettrica, 146
 relativa, **16**, 40, 146, 147
 relativa complessa, 40
 permutazione, 31
 gruppo di, 31
 operatore di, 31
 permutazione-inversione, 31
 operatore di, 31
 perturbazione della concentrazione, 64
 peso, 14
 atomico, **47**, 117–120
 atomico standard, 47, 117–120
 molecolare, 47
 statistico, 26, **45**
 statistico di spin, 45
 peta, 91
 petabinario, 91
 pH, 5, 70, **75**, 76
 definizione di, 70, **75**
 grandezza, 75
 misura di, **75**, 76
 simbolo, **70**, 75
 pH standard, 75
 piano di polarizzazione, 38
 piano di rotazione, 13
 pico, 91
 picomole, 98
 piede, 135
 pione, 115
 Planck
 costante di, 8, 9, 22, **34**, 95, 111
 funzione di, 56
 poise, 138
 polarizzabilità, **24**, 134, 135, 140, 141
 elettrica, 95
 elettrica della molecola, 24
 iper-, 16, **24**
 molare, **17**, 41
 molare complessa, 41
 polarizzato, volume, 141
 polarizzazione, 141
 di volume, 141
 dielettrica, **16**, 40, 147
 elettrica, 16
 piano di, 38
 politropia, 45
 pollice, 135, 138
 Polo-Wilson, equazione di, 41
 ponte di sale, 74
 popolazione media, 46
 popolazione, frazione di, 38
 portata, 81
 positrone, **50**, 115
 positronio, 116
 posizione della particella
 simbolo di vettore di, 42
 posizione molecolare, vettore di, 45
 posizione, vettore di, 13
 potenza, **14**, 98, 138
 radiante, 34
 radiante per unità di tempo, 34
 termica, **57**, 81
 trasmessa, 36

potenza di radiazione per unità d'area, 35
 potenziale
 (di reazione di cella) standard, 74
 (di reazione in cella) standard, 74
 assoluto di elettrodo, 71
 chimico, 5, 6, 8, 44, 46, **57**, 62
 chimico standard, **57**, 61, 62
 contatto, differenza di, 74
 del canale adiabatico, 67
 del vettore magnetico, **17**
 della cella standard, 74
 della giunzione liquida, 72
 di cella, 16, **71**, 89
 di elettrodo, **71**, 74, 75
 di elettrodo, di equilibrio, **71**, **72**
 di equilibrio, **71**, 72, 74
 di giunzione liquida, **74**, 76
 di ionizzazione, 22
 di Nernst, 72
 di reazione in cella elettrochimica, 74
 differenza di, 94
 differenza di Galvani, **71**, 72
 differenza di Volta, 70
 differenza interna di, 71
 elettrico, **16**, 70, 75, 89, 140
 elettrochimico, 71
 elettrocinetico, 73
 elettromagnetico, **148**, 149
 elettronico, **23**, 64
 elettrostatico, 147
 elettrostatico (di una fase), **70**
 esterno, differenza di, 70
 formale, 72
 interno, 71
 magnetico, vettore di, 147, 148
 reversibile, 72
 sovra-, 72
 standard, **74**, 75
 standard (della reazione di cella), **71**
 standard di elettrodo, **71**, 74
 superficiale, 70
 potenziale elettrico, **16**, 70, 75, 89, 140
 differenza di, **16**, 44, 74
 esterno, 70
 interno, 70
 superficiale, 70
 potere, 22
 di raccolta della luce, 36
 risolvente, 36
 rotatorio molare, 38
 rotatorio ottico molare, **37**
 rotatorio ottico specifico, **37**
 rotatorio specifico, 38
 Poynting, modulo del vettore di, 35
 Poynting, vettore di, **17**, 149
 Poynting-Umov, vettore di, 17
 ppb, 98
 pph, 98
 pphm, 98
 ppm, 97, **98**
 ppq, 98
 ppt, 98
 Prandtl, numero di, 82
 pre-esponenziale, fattore, 63, **64**
 predissociazione
 costante di velocità di variazione della, 67
 prefissi decimali, 85
 prefisso SI, 85, **91**, 92, 94
 prefisso, simbolo di, 91
 pressione, 6, **14**, 39, 48, 81, 89, 131, 138
 atmosferica, 58
 bassa, 58
 coefficiente di, 56
 coefficiente relativo di, 56
 coefficiente viriale di, 57
 costante di equilibrio in termini di, 58
 di riferimento, 99
 di stato standard, 62
 di vapore, 131
 dipendenza dalla, 64
 fattore di conversione, 239
 osmotica, 59
 parziale, 5, 38, **48**, 63
 sonora, 99
 standard, 48, 61, 62, **62**, 74
 superficiale, 77
 totale, 48
 unità di, 129
 variazione della, 9
 velocità di variazione della, 63
 privo di massa, 70
 probabilità, **45**, 46, 65, **153**, 155, 156
 densità corrente di, 18
 densità di, **18**, **153**
 di transizione, 65
 di transizione di Einstein, **37**, 39
 distribuzione normale, 155
 flusso di, 18
 media, 46
 stimata, 156
 processo, 60
 di trasporto, 63
 simbolo di, 59
 prodotto anti-simmetrizzato, 20
 prodotto di solubilità, 58
 prodotto di unità di misura, 7
 prodotto scalare, 107
 prodotto vettoriale, 107
 prodotto, entità, 53
 proiezione di Fischer, **51**, 52
 propagazione dell'incertezza, 155
 propagazione, vettore di, 43

proprietà degli elementi chimici, 117–120
 proprietà dei nuclidi, 121–128
 proprietà delle particelle, 115–116
 proprietà di trasporto, 81–82
 proprietà macroscopica, **40**
 protone, 8, 23, 29, 49, 50, 115
 carica del, 70
 carica del (ua), 139
 massa del, 29, 111
 momento magnetico del, 112
 protone schermato
 momento magnetico del, 112, 116
 protoni, numero di, 20, **22**, 24
 protonica, carica, **22**
 prototipo internazionale del kilogrammo, 87
 pulsazione, 34
 punto a carica nulla, 78
 punto isoelettrico, 78
 punto triplo (pedice), 60
 Pécelet, numero di, 82

quadrupolo elettrico, momento di, **95**, 141
 quadrupolo nucleare, area, 26
 quadrupolo, area del, 141
 qualità, fattore di, 36
 quantico, livello, 46
 quantistica, meccanica, 21
 quantità, 4, 47, **53**, 54, 59, 89
 assorbita, 77
 concentrazione di, 4
 di elettricità, 16
 di sostanza, 4, 45, 47, 48, 51, **53**, 57, 63, 71
 in eccesso, 77
 in eccesso (apice), 60
 in eccesso superficiale, **77**, 78
 superficiale, 77
 superficiale di Gibbs, 78
 quantità di sostanza, 45, 85, 86, 88, 89
 adsorbita, 78
 concentrazione di, 4, 6, 37, 38, **48**, 54, 62, 63, 81, 90
 densità di, 139
 fotone, 67
 frazione di, 48, **48**, 97, 121, 132
 quanto, 50
 quoziente di reazione, **58**, 61
 quoziente di unità di misura, 7

raccolta della luce, potere di, 36
 rad (dose assorbita di radiazione), 139
 radiante, 9, 13, **89**, 98, 136
 flusso, 89
 intensità, **34**, 88
 potenza, 34
 radianza, 34–36
 radiazione
 assorbimento della, 15
 costante di, **36**, 112
 densità di energia spettrale della, 35
 radiazione di corpo nero, 87
 radiazione elettromagnetica, 34–41
 intensità di, 35
 radicale, 50
 radioattiva, attività, 139
 radioattivo, decadimento, 64
 raggio, **13**, 70
 della sfera rigida, 64
 di Bohr, 9, **22**, 95, 111
 rango del tensore, 16
 rango due, tensore di, **5**, 16, 17
 Rankine, temperatura, 138
 Raoult, legge di, 59
 rapporto delle capacità termiche, 57
 rapporto di mobilità, 43
 rapporto giromagnetico, **23**, 27, 29
 del protone, 112
 del protone schermato, 112
 rapporto logaritmico, 92
 rapporto tra circonferenza e diametro, 112
 rappresentazione per coordinate, 18
 Rayleigh, numero di, 82
 razionalizzato, 146
 sistema, non-, 133
 reagente, entità, 53
 reagenti, livello di base, 67
 reattanza, 17
 reazione, 52
 a catena, meccanismo di, 68
 affinità di, **58**, 61
 avanzamento di, **48**
 bimolecolare, **68**, 69
 catalitica, meccanismo di, 68
 chimica, **53**, 60, 63
 chimica, equazione, 52
 del primo ordine, 72
 di cella, potenziale standard di, **71**, 74
 di combustione (pedice), 59
 di elettrodo, 71, 72, **74**
 di formazione (pedice), 60
 di ossidazione, 72
 di riduzione, 72
 diretta netta, 52
 elementare, 52, 65, **68**, 69
 elementare bimolecolare, equazione chimica, 68
 elettrochimica, 71, 72, **74**, 75
 entalpia di, 69
 entalpia molare di, 60
 entalpia standard di, 5
 entropia molare di, 60
 equazione di, **52**, 61, 63, 69
 equazione stechiometrica di, 60
 fotochimica, 67
 grado di, 48, 60

in cella elettrochimica, 52, **74**
 in cella, numero di carica di, 71
 in cella, potenziale standard di, 74
 in generale (pedice), **58**, 60
 indice di, 53
 monomolecolare, 68, **68**
 netta, 68
 nucleare, 50
 ordine complessivo, 63
 ordine di, **63**, **65**, 72
 ordine parziale di, **63**, 64
 quoziente di, **58**, 61
 sezione d'urto, 65
 simbolo di, 58, **60**
 standard, energia di Gibbs, 58
 standard, entalpia della, **58**
 standard, entropia della, 58
 standard, grandezza di, 60
 trimolecolare, **68**, 69
 unimolecolare, 68, **68**, 69
 velocità di, 63, 68, **68**, 69
 reazione chimica, **53**, 60, 63, 73
 equazione, 52
 teoria dello stato di transizione, 65
 reazione elementare, equazione chimica, 69
 reazione elettrochimica, numero di elettroni, 71
 reazione monomolecolare
 costante di velocità di variazione, 64
 reciproco della lunghezza d'onda, **25**
 regole generali per i simboli di grandezze, 5
 relazione di Curie, 133
 relazione di Maxwell, **143**, 144
 rem, 139
 repulsione tra due elettroni, integrale di, 19, 20, **20**
 resa fotochimica, 66
 resa quantica, **66**, 67
 resistenza
 elettrica, **17**, 89, 140
 termica, 81
 resistività, 17
 residua, 43
 tensore, 43
 reticolo, 79
 angolare reciproco, vettore del, 42
 base-centrato, 44
 corpo-centrato, 44
 cristallino, 42
 cristallino, simbolo di, 44
 direzione del, 44
 faccia-centrato, 44
 onda di, 43
 primitivo, 44
 reciproco, vettore del, **42**
 romboedrico, 44
 solido, 79
 super-, 79
 super-, matrice per notazione di, 80
 super-, vettore base di, 80
 super-, vettore base reciproco di, 80
 vettore di, 42
 vettore reciproco di, 80
 rettangolare
 distribuzione di probabilità, **153**, 155
 reversibile, potenziale, 72
 Reynolds, numero di, 5, **82**
 Reynolds, numero magnetico di, 82
 Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus, teoria di, 67
 ridotta
 energia, 95
 grandezza, 96
 massa, **14**, 64
 riduzione asimmetrica, 25
 riduzione simmetrica, 25
 riduzione, costante di velocità di, 72
 riflessione, **36**, 37
 fattore di, 36
 operatore di, 32
 riflessione acustica, 15
 fattore di, 15
 riflessione di Bragg, 44
 riflesso, flusso, 15
 riflettanza, 36
 rifrattività molare, 37
 rifrazione, 41
 indice di, 34, **34**, 40, 41
 indice di, complesso, **37**, 40
 indice di, immaginario, **37**, 40
 molare, 37
 righe (di una banda rotazionale), 33
 rilassamento, 28
 spin-reticolo longitudinale, tempo di, 29
 tempo di, 23
 ripetenza, **25**
 risoluzione, 36
 potere di, 36
 risoluzione, potere di, 36
 risonanza, 29
 di spin elettronico, 27
 di spin, spettroscopia, 23
 frequenza di, 29
 integrale di, 19
 magnetica nucleare, 28
 paramagnetica elettronica, 27
 standardizzata, frequenza di, 29
 struttura di, **51**, 52
 RMN, 29
 röntgen, 139
 rotatorio
 potere molare, 38
 potere specifico, 38
 rotatorio ottico
 potere molare, **37**

potere specifico, **37**
 rotazionale
 termine, 25
 transizione, 33
 rotazione
 di campo vettoriale, 107
 operatore di, 32
 rotazione ottica, 38
 angolo di, **37**, 38
 rotazione, specifica, 38
 rotazione-riflessione
 operatore di, 32
 rydberg, 137
 Rydberg, costante di, 22, 111
 röntgen equivalent man, 139

 scala Celsius, zero della, 111
 scambio
 integrale di, 20
 operatore di, **20**, 21
 scambio termico, coefficiente di, 81
 scambio, integrale di, 20
 scarto tipo, 103, **153**
 scarto tipo combinato, **153**
 scarto tipo stimato, 154
 scelta della unità di misura, 3
 scelta dello stato standard, 58
 scelta di Lorentz, 149
 Schönflies, simbolo di, 32
 schema \overline{MS} , 112
 schema on-shell, 112, **112**
 schermo
 costante di, 29
 parametro di, 21
 tensore di, 29
 Schmidt, numero di, 82
 Schrödinger, equazione di, 96
 scrittura di numero, 103
 scrittura di simboli matematici, **103**, 104
 sdoppiamento Λ , 31
 sdoppiamento K , 31
 sdoppiamento l , 31
 sdoppiamento di asimmetria, 31
 secondo, 6, 85, 86, **87**, 92, 98, 136, 137, 143, 144
 luce, 136
 secondo (di arco), **92**, 136
 secondo coefficiente del viriale, 57
 sedimentazione, **77**
 coefficiente di, **77**, 78
 ridotta limite, coefficiente di, 78
 velocità di, 78
 segnale, intensità del, 29
 segno decimale, 103
 semicella, **73**, 74
 semivita, **24**, 64, 116
 sezione circolare, 87
 sezione d'urto, **24**, 38
 della reazione, 65
 di assorbimento netto, 37
 di collisione, 64
 differenziale, 65
 integrata, 38
 integrata di assorbimento, 38
 integrata di assorbimento netto, 37
 media di collisione, 64, **65**
 totale, 65
 sfera di Fermi, 44
 sferoide oblato, 25
 sferoide prolato, 25
 sforzo, 89
 di taglio, 15
 di taglio, tensore di, 81
 normale, 15
 Sherwood, numero di, 82
 SI, 4, 85
 sistema di unità, 143
 unità base, 4, 85–88, 90, 91
 siemens, 89
 sievert, **89**, 139
 simbolo
 carattere di, 7
 del reticolo cristallino, 44
 del termine, 117–120
 dell'operatore di momento angolare, 30
 della direzione del piano, nei cristalli, 44
 dimensione, **4**
 matematico, 7, 8, 103–108
 matematico, scrittura di, **103**, 104
 regole generali, 5
 standard, **60**
 simbolo di
 eccitazione, 50
 elemento chimico, 8, 9, **49**, 50, 113, 117–120
 formula, 54
 grandezza base, 4
 grandezza fisica, **5**, 7–9, 11, 70, 97, 131
 grandezza, regole generali per, 5
 Hermann-Mauguin, 31, **44**
 Levi-Civita, 106
 operatore, 30
 operatore (reazione in generale), 58
 operatore di simmetria, 31
 operatore matematico, 7, **8**
 particella, 8, 22, **50**
 particella elementare, **50**, 113, 115, 115
 prefisso, 91
 processo fisico o chimico, 59–61
 reazione, 58, **60**
 Schönflies, 32
 sottomultiplo decimale, 91
 specie di simmetria, 103
 stato standard, 57, **60**, 66, 71
 struttura superficiale, 80

- termine, **32**
- termine (di stato atomico), 32
- termine (di stato molecolare), 32
- termine elettronico, 51
- termodinamica chimica, 62
- unità, 6, 92
- unità atomica, 94–96
- unità di misura, **3**, 4, 5, 83
- unità SI base, 86
- unità SI derivata, 89–91
- simmetria, 8, 16, 24, **31**
 - di permutazione-inversione, 31
 - asse, 30
 - coordinata di, 27
 - coordinata vibrazionale di, 27
 - fattore di, 72
 - numero di, 46
 - operatore di, 31, 32
 - operazione di, **31**
 - sferica, 146
- sistema
 - a guscio chiuso, 20
 - acquoso, 74
 - americano di denominazioni, 98
 - coerente, 93
 - coerente di unità di misura, 85
 - di coordinate cartesiane, 107
 - emu, 144
 - esu, 143, **144**
 - Gaussiano, 41, 133, 135, 143, **144**
 - in equilibrio, 58
 - lineare, 98
 - multifase, 71
 - non acquoso, 74
 - non in equilibrio, 58
 - non razionalizzato, 133
 - periodico, 8
- sistema di unità
 - atomiche, 146
 - coerenti, **93**
 - elettromagnetiche, 143
 - elettrostatiche, 143
 - emu, 143
 - esu, 143
 - Gaussiano, 143
 - non razionalizzato, **146**
 - razionalizzato, 146
 - SI, 143
- Sistema Internazionale delle Unità di Misura (SI), 85
- Slater, determinante di, 20
- Slater, orbitale, 21
- soglia, energia di, 67
- solido, 27, 28, 38, 40, **54**
 - amorfo, 54, **54**
 - angolo, **13**, 34, 36, 65
 - assorbente, 77
 - crystallino, 54
 - fcc, 79
 - reticolo, 79
 - stato, 42, 61
- solubilità, 48, **48**
- soluto, 40, 48, 59, **61**, 62, 132
- soluzione, 38, 40, 48, 52, 54, 57, **61**, 72, 74, 75, 132
 - (pedice), 60
 - a diluizione infinita
 - acquosa, 54, **54**
 - acquosa, 54, **54**, 57, 74, 97
 - acquosa a diluizione infinita, **54**
 - diluita, **58**, 97
 - molale, 48
- solvente, 29, 37, 48, 59, **61**, 132, 133
 - puro, 132
- somma
 - sugli stati, 45, 46
- somma di stati, 66
- somma in quadratura, 155
- sorgente di luce, 38
- sostanza
 - adsorbita, quantità di, 78
 - chimica, 51
 - gassosa, **61**
 - pura, 56, **61**
 - pura (apice), 60
 - quantità di, 4, 47, 48, 51, **53**, 57, 63, 71, 85, 86, 88, 89
 - vitrea, 54
- sottomultiplo decimale della unità, 85
- sovrappotenziale, 72
- sovrapposizione
 - elemento matriciale di, 21
 - integrale di, 19
- spazio, 13
 - asse cartesiano riferito a, **35**, 39
- spazio delle fasi, volume nello, 45
- spazio e tempo, 13
- spazio nullo, 53
- specie a guscio chiuso, 21
- specie adsorbita, 54
- specie di simmetria, simbolo di, 103
- specifica
 - conduttanza, 73
 - energia, 90
 - grandezza, **6**, 56
 - rotazione, 38
- specifico, 6
 - volume, **6**, 14, 90
- spessore, **13**, **38**, 77
 - dello strato di diffusione, 72
 - di film, 77
 - di strato, 77
- spetttrale, intensità, **35**, 36
- spettro

di assorbimento, 36
 infrarosso, 40
 spettroscopia, 25–33, 36
 a risonanza di spin, 23
 ad assorbimento atomico, 97
 atomica, 14
 molecolare, 14
 ottica, 32, 36
 spettroscopica, transizione, 33
 spin
 della particella, numero quantico di, 115
 dell'elettrone, funzione d'onda di, 19
 elettronico, molteplicità di, 32
 elettronico, momento angolare di, 30
 elettronico, operatore di, 25, **27**
 elettronico, risonanza di, 27
 funzione d'onda di, **19**, 29
 molecolare orbitale, 20
 molteplicità di, 32
 momento angolare di, **19**, 28, 116
 nucleare, 29
 nucleare, degenerazione di, 26
 nucleare, momento angolare di, 30
 nucleare, numero quantico di, 121
 nucleare, operatore di, 28
 orbitale molecolare, 20
 peso statistico di, 45
 spin-orbita, costante di accoppiamento, 25
 spin-reticolo
 tempo di rilassamento, 29
 tempo di rilassamento longitudinale, 29
 spin-rotazione
 costante di accoppiamento, 28
 interazione, 28
 spin-spin
 tempo di rilassamento trasversale, 29
 spin-spin nucleare
 costante di accoppiamento, 28
 costante di accoppiamento ridotta, 28
 spin-spin, tempo di rilassamento, 29
 spostamento
 (shift) chimico, 29
 di frequenza, 87
 dielettrico, 141, 147
 elettrico, **16**
 non razionalizzato, 141
 pedice, 59
 vettore di, 42
 vibrazionale, 27
 standard
 accelerazione di caduta libera, 137
 atmosfera, **62**, 111, 138
 atomico, 137
 concentrazione, **62**, 72
 condizione, **61**, 71
 deviazione, 111, 121
 di frequenza, 87
 grandezza, 57
 in biochimica, 62
 molalità, **62**, 75
 pesi atomici, 47, 117
 potenziale, **71**, **74**
 potenziale chimico, 61, 62
 pressione, 61, 62, **62**, 74
 primario (pH), **75**, 76
 secondario (pH), 76
 stato, 57, **61**, 66, 71
 standard (pH)
 primario, **75**, 76
 secondario, 76
 Stanton, numero di, 82
 Stanton, numero di (trasporto di massa), 82
 statcoulomb, 145
 stati eccitati, 32
 stati, numero cumulativo di, 45
 statistica
 entropia, 46
 meccanica, 66
 termodinamica, 45
 stato
 atomico, 32
 di aggregazione, 52, **54**
 di riferimento, 61
 di riferimento (di un elemento), 62
 di transizione, 64
 di transizione (apice), 60
 di transizione, densità di stati, 66
 di transizione, funzione di partizione molecolare,
 66
 di transizione, funzione di partizione, 67
 di transizione, livello di base, 67
 di transizione, numero di stati, **66**, 67
 eccitato, concentrazione, 67
 elettronico degenerare, 31
 elettronico eccitato, **49**
 gassoso, 54
 liquido, 61
 molecolare, 32
 puro, 46
 rotazionale, **30**, 51
 standard liquido o solido, 61
 stazionario, 18
 vibrazionale, **33**, 51
 vibrazionale degenerare, 31
 stato base, **8**, 22, 33, 61
 distanza dallo, 27
 elettronico, 32
 vibrazionale, 26
 stato solido, 42–44, 61
 stato standard, 57, **61**, 62, 71
 di soluto, 61
 in biochimica, 62

in fase gassosa, 61
 pressione di, 62
 scelta dello, 58
 simbolo di, 57, 66, 71
 stechiometria, 69
 stechiometrica, equazione, 49, 63
 stechiometrico, numero, 49, 61
 Stefan-Boltzmann, costante di, **35**, 112
 steradiante, 13, 88, **89**
 stereochimica, formula, **51**, 52
 stima, 97
 dell'incertezza, 151–156
 di probabilità, 156
 stokes, 138
 strato di diffusione, spessore dello, 72
 strato di interfaccia, **77**, 78
 strato dipolare, 70
 strato superficiale, 77
 Strouhal, numero di, 82
 struttura di risonanza, 52
 formula, **51**
 struttura di sostituzione, distanza dalla, 27
 struttura fine, costante di, **22**, 95, 111, 144, 146
 struttura superficiale, 79–80
 struttura, fattore di, 42
 Student-*t*, distribuzione di probabilità, 153, **156**
 sublimazione (pedice), 60
 substrato, vettori base del, 80
 suono, velocità del, **13**, 81
 superficiale
 concentrazione, 48, **77**
 densità, 14
 eccesso, **77**
 pressione, 77
 quantità, 77
 tensione, **14**, 56, 77, 78, 81, 90
 superficie, 79
 a gradini, 79
 asimmetrica, **30**, 31, 33
 di Gibbs, **77**, 78
 di separazione di Gibbs, **77**, 78
 di un monocristallo, 79
 sferica, 30
 vettore base di, 79
 superficie simmetrica
 oblata, 30
 prolata, 30
 suscettanza, 17
 suscettività
 elettrica, **16**, 146, 147
 magnetica, **17**, 133, 142, 146, 148
 magnetica molare, **17**, 133, 142
 molare non razionalizzata, 142
 suscettività magnetica, **17**, 133, 142, 146, 148
 molare, **17**, 133, 142
 svedberg, 137
 tabelle di conversione per le unità di misura, 135–142
 Tafel, pendenza di, 72
 taglio
 deformazione di, 15
 modulo di, 15
 tampone per standard, 76
 tau, neutrino, 115
 tebi, 91
 telecomunicazioni, 98
 temperatura, 6, 35, 38, 39, 41, 56, 61–64, **87**, 129, 133
 (caratteristica) di Weiss, 43
 caratteristica, 46
 Celsius, 38, 46, **56**, 89, 111, 138
 centigrada, 56
 di Curie, 43
 di Debye, **43**, 46, 80
 di Einstein, 46
 di Néel, 43
 di Weiss, 43
 Fahrenheit, 138
 internazionale, 56
 Rankine, 138
 rotazionale, 46
 termodinamica, 4, **56**, 81, 85–87, 89, 138
 vibrazionale, 46
 tempo, 4, 9, 13, **13**, 81, 85–87, 92, 95, 98, 135, 137, 143, 144
 di correlazione, 29
 di decadimento, 64
 di rilassamento, 13, 23, 29, 43, **64**
 di rilassamento longitudinale, 23
 di rilassamento trasversale, 23
 funzione dipendente dal, 18
 ua di, 137
 tempo di rilassamento, 13, 23, 29, 43, **64**
 longitudinale, 23
 spin-reticolo, 29
 spin-reticolo longitudinale, 29
 spin-spin, 29
 spin-spin trasversale, 29
 trasversale, 23
 tempo di vita, **24**, 44
 medio, 64
 tensione
 del film, 77
 di interfaccia, **77**
 di vapore, **60**
 elettrica, **16**, 89, 140
 interfacciale, 78
 superficiale, **14**, 56, 77, 78, 81, 90
 tensore, **5**, 7, 8, 17, 23, 24, 28, 44
 conducibilità, 43
 di accoppiamento indiretto di spin, 28
 di conducibilità termica, 43

di energia di interazione quadrupolare nucleare, 24
 di interazione dipolare, 28
 di interazione spin-rotazione, 28
 di rango due, **5**, 16, 17, 104
 di schermo, 29
 di sforzo di scorrimento, 81
 di sforzo di taglio, 81
 gradiente, 29
 gradiente di campo, 29
 gradiente di campo elettrico, 24
 gradiente di energia di interazione quadrupolare, 24
 rango del, 16
 resistività, 43
 simmetrico, 24
 tensoriale, grandezza, 14, 15, 28, **104**
 teoria
 autocoerente del campo, 21
 degli stati di transizione, 66, 67
 del campo autocoerente, **20**
 della collisione, 65
 dello stato di transizione, 65
 di Debye-Hückel, 75
 di quasi-equilibrio, 67
 elettromagnetica, **143**, 147
 Hartree-Fock, 19
 LCAO-MO, 21
 molecolare orbitale di Hückel, 19
 teoria della carica spaziale nei semiconduttori, 78
 tera, 91
 terabinario, 91
 termica
 coefficiente di diffusione, 81
 conducibilità, **81**, 90
 conduttanza, 81
 potenza, **57**, 81
 termine, 34
 di molalità, 75
 elettronico, 25
 elettronico, simbolo di, 51
 rotazionale, 25
 simbolo di, 32, **32**
 simbolo di (di stato molecolare), 32
 totale, 25
 valore di, 25
 vibrazionale, 25
 vibrazionale, formula del, 26
 terminologia, 9
 biochimica, 9
 chimica inorganica, 9
 chimica macromolecolare, 9
 chimica organica, 9
 termodinamica
 chimica, 62
 statistica, 45
 temperatura, 4, **56**, 81, 85–87, 89, 138
 termoelettrica, forza, **43**, 44
 Terra-Sole, distanza media, 92
 terzo coefficiente del viriale, 57
 tesla, **89**, 141
 Thomson, coefficiente di, 43
 tipo
 incertezza, **154**
 scarto, 153, **153**
 scarto combinato, **153**
 tipo degenerare, 31
 tipo di simmetria, 32
 indice per, 31
 tonnellata, 92
 tonnellata (metrica), 136
 top simmetrica, molecola, 33
 Torr, 81, 131, 138, 239
 torr, 131, 138
 totale
 carica, 19
 densità di carica, 44
 densità di probabilità, 18
 eccesso, 78
 eccesso superficiale, 77
 energia, 65
 energia elettronica, **20**, 21
 funzione d'onda, 20
 funzione d'onda di spin, 19
 momento angolare, 32
 numero di collisioni, 65
 numero di stati, 44, 67
 numero di stati quantici, 45
 potenza radiante, 34
 pressione, 48
 sezione d'urto, 65
 sezione d'urto della reazione, 65
 termine, 25
 traiettoria della particella, 65
 transizione, **33**, 38, 39, 41
 adiabatica, numero di canali aperti di, 66
 di banda, 41
 di dipolo elettrico, **35**, 39
 elettronica, 37
 frequenza di, 25
 momento di, 39
 momento dipolare (molecolare) di, 26
 numero d'onda della, 25
 probabilità di, 65
 radiativa cinetica, frequenza di, 40
 radiativa indotta, 38
 rotazionale, 33
 spettroscopica, 33
 tra fasi (pedice), 60
 vibrazionale, 33
 vibronica, 33
 trasferimento

anodico, coefficiente di, 72
 catodico, coefficiente di, 72
 di carica, **71**, 72, 74
 di massa stazionario, 72
 di massa, coefficiente di, **72**, 81
 di momento, **42**
 trasferimento di momento, 112
 traslazionale, energia di collisione, 65
 traslazione fondamentale, vettore di, 42
 angolare, 42
 trasmesso, flusso, 15
 trasmissione, 40
 acustica, 15
 coefficiente di, 66
 fattore di, 36
 trasmissione acustica, fattore di, 15
 trasmissione del segnale, 98
 trasmissione, coefficiente di, 66
 trasmittanza, 36
 trasporto di massa
 numero di Fourier, 82
 numero di Grashof, 82
 numero di Nusselt, 82
 numero di Péclet, 82
 numero di Stanton, 82
 trasporto, numero di, 73
 trasposta, matrice, 107
 triangolare, distribuzione di probabilità, 153
 trilione, 98
 tritone, 50, 115, 116
 tropico, anno, 137
 troy, 136

 ua, 139
 ua di azione, 138
 ua di forza, 137
 ua di tempo, 137
 unitaria, matrice, 107
 unitario, vettore, 13
 unità
 astronomica, 9, **92**, 94, 136
 atomica, 4, 18, 20, 22, 24, 26, **94**, 95, 96, 129,
 132, 135, 143, 144, 146
 base, 34, 85, 88, 93, 135, 143, 144
 base del SI, 4, 85
 CGS, 96, 135–138
 coerente, 93
 derivate coerenti, 85
 di energia, 129
 di entropia, 139
 di formula, 70
 di frequenza, **25**, 26
 di frequenza angolare, 28
 di massa atomica unificata, 22, 47, **92**, 94, 111,
 116, 117, 121, 136
 di pressione, 129
 elettromagnetica, 129, **144**
 elettromagnetica di corrente, 135
 elettrostatica, 144
 elettrostatica di carica, 135
 enzimatica, 89
 multiplo decimale di, 85, **91**
 non razionalizzata, 129, **146**
 non SI, 129, **135**
 razionalizzata, 146
 relativa alla energia, 129
 SI base, 85–88, 90, 91
 SI coerente, 85
 SI derivata, 85, 89–91
 simbolo di, 92
 sottomultiplo decimale di, 85, **91**
 unità atomica
 del momento di dipolo magnetico, 95
 simbolo di, 94–96
 unità atomiche, sistema di, 146
 unità base, 34, 86–89, 93, 135, 143, 144
 SI, 85, 86
 unità CGS, 96, 135–138
 unità di massa atomica unificata, 9, 94
 unità di misura
 base, 85
 del SI, 85
 di grandezza fisica, **3**, 18, 19
 multiplo decimale di, 6
 prodotto di, 7
 quoziente di, 7
 scelta della, 3
 simbolo di, **3**, 4–6, 83
 sistema coerente, 85
 sottomultiplo decimale di, 6
 unità non SI, accettate, 92
 unità SI, 96
 base, 87, 88, 90, 91
 base, simbolo di, 86
 derivata, 89–91
 unità x, 135

 valore
 di grandezza fisica, **3**, 129
 di termine, 25
 medio, 105
 numerico di grandezza fisica, **3**, 133
 relativo, 97
 valore *f*, 37
 valore atteso, **23**, 24, 153
 (dell'hamiltoniana del guscio interno), 20
 dell'operatore, 18
 valutazione
 dell'incertezza, 155
 della massa atomica, 121
 Tipo A, 154
 Tipo B, **154**, 155
 van der Waals, 57
 costante di, 77

costante ritardata di, 77
 gas di, 57
 van der Waals-Hamaker, costante di, 77
 vapore, 54
 tensione di, **60**, 131
 vaporizzazione, (pedice), 60
 varianza, 153
 analisi della, 154
 stimata, 154
 variazione
 della concentrazione, velocità di, 63
 della fluorescenza, costante di, **66**
 della pressione, 9
 di funzione lavoro, 80
 infinitesimale, 8, 9
 velocità di, 35
 velocità, 81, 90, 93, 95, 149
 angolare, **13**, 89, 90
 del suono, **13**, 81
 dell'elettrone, 44
 della luce, **34**
 funzione di distribuzione della, 45
 media, **45**, 81
 molecolare, vettore di, 45
 relativa media, 64
 velocità della luce, 9, 13, 16, 25, **34**, 43, 95, 111, 143, 144, 146
 nel vuoto, 9
 velocità di
 assorbimento dei fotoni, 67
 assorbimento di dose, 90
 cambiamento della grandezza, 63
 conversione, **63**, 67, 89
 decadimento, 36
 decadimento, costante di, 24
 diffusione, 74
 effusione, 81
 fluenza, 35
 flusso di energia di radiazione, 149
 migrazione, 73
 ossidazione, costante di, 72
 reazione, 68, **68**, 69
 (concentrazione di numero), **63**
 (concentrazione di quantità di sostanza), 63
 riduzione, costante di, 72
 sedimentazione, 78
 velocità di variazione, 35
 coefficiente di, 63, 67
 costante del primo ordine di, **65**
 costante di, 63–65, 67–69
 costante specifica di, 66
 dell'entropia, 63
 della concentrazione, 63
 della fluorescenza, costante di, 67
 della predissociazione, costante di, 67
 della pressione, 63
 di reazione unimolecolare (a bassa pressione), costante di, 64
 di reazione unimolecolare (ad alta pressione), costante di, 64
 equazione di, 67
 legge di, 63, **68**
 matrice di (coefficiente), 66
 specifico, costante di, 66
 velocità scalare (speed), **13**
 velocità vettoriale (velocity), **13**
 vettore, 5, 7, 13, 16, 104, **107**
 base del substrato, **79**, 80
 base di super-reticolo, 80
 base di superficie, 79
 base reciproco del substrato, 80
 base reciproco di super-reticolo, 80
 concentrazione, 67
 del reticolo angolare reciproco, 42
 del reticolo reciproco, **42**
 dell'indice di Miller, 79
 dipolo, 17
 intensità di campo elettrico, 73
 magnetico, potenziale del, **17**
 operatore, 30
 unitario, 13, 81, 107
 vettore di
 momento dipolare, 16
 Burgers, 42
 flusso termico, 44
 momento molecolare, 45
 onda, angolare, 43
 posizione, 13
 posizione della particella, 42
 posizione di equilibrio, 42
 posizione molecolare, 45
 potenziale magnetico, 147, 148
 Poynting, **17**, 149
 Poynting, modulo del, 35
 Poynting-Umov, 17
 propagazione, 43
 reticolo, 42
 reticolo di Bravais, 42
 reticolo reciproco, 80
 spostamento, 42
 traslazione (angolare) fondamentale, 42
 traslazione fondamentale, 42
 velocità molecolare, 45
 vibrazionale
 degenerazione, 26
 momento angolare interno, 30
 spostamento, 27
 termine, 25
 transizione, 33
 vibrazione fondamentale, 26
 vibronica, transizione, 33
 violazione di parità, 31

viriale di pressione, coefficiente del, 57
viriale, coefficiente del, 57
viscosità, **15**, 81
 cinematica, **15**, 90, 138
 di massa, 81
 di taglio, **81**, 90
 dinamica, **15**, 90, 138
vita, 121
 durata naturale di, 66
vita media, **24**, 64, 115, 116
volt, **89**, 94, 134, 140
 internazionale medio, 140
 internazionale USA, 140
Volta, differenza di potenziale di, 70
volume, 6, **13**, 63, 81, 90, 92, 136
 deformazione di, 15
 di attivazione, 65
 enpletico, 6
 frazione di, 97, 98
 frazione in, **48**
 magnetizzazione di, 142
 massico, 6
 modulo di, 15
 molare, 5, 6, 17, 41, **47**, 54, 55, 57, 90, 139
 molare del gas ideale, 111
 molare medio, 47
 parziale molare, 57
 polarizzato, 141
 specifico, **6**, 14, 90
volumico, 6
vuoto, 70, 87, **87**, 94, 143, 144, 147
 carica nel, 147
 densità di corrente elettrica nel, 148
 dipolo magnetico nel, 148
 dipolo nel, 147
 elemento di corrente nel, 147
 impedenza caratteristica del, 111
 indice di rifrazione nel, 34
 numero d'onda nel, 34
 permeabilità del, **17**, 143
 permittività del, **16**, 143
 velocità della luce nel, 9, 16, 25, **34**, 43, 111, 144

Wang, parametro di asimmetria di, 25
watt, 88, **89**, 138
weber, **89**, 142
Weber, numero di, 82
Weinberg, parametro di, 112
Weiss, temperatura di, 43

yarda, 135
yobi, 91
yocto, 91
yotta, 91
yottabinario, 91
Young, modulo di, 15

zebi, 91
zepto, 91
zetta, 91
zettabinario, 91

NOTE

NOTE

FATTORI DI CONVERSIONE DELLA PRESSIONE

	Pa	kPa	bar	atm	Torr	psi
1 Pa	= 1	= 10^{-3}	= 10^{-5}	$\approx 9.869\ 23 \times 10^{-6}$	$\approx 7.500\ 62 \times 10^{-3}$	$\approx 1.450\ 38 \times 10^{-4}$
1 kPa	= 10^3	= 1	= 10^{-2}	$\approx 9.869\ 23 \times 10^{-3}$	$\approx 7.500\ 62$	$\approx 0.145\ 038$
1 bar	= 10^5	= 10^2	= 1	$\approx 0.986\ 923$	≈ 750.062	≈ 14.5038
1 atm	= 101 325	= 101.325	= 1.013 25	= 1	= 760	≈ 14.6959
1 Torr	≈ 133.322	$\approx 0.133\ 322$	$\approx 1.333\ 22 \times 10^{-3}$	$\approx 1.315\ 79 \times 10^{-3}$	= 1	$\approx 1.933\ 68 \times 10^{-2}$
1 psi	≈ 6894.76	$\approx 6.894\ 76$	$\approx 6.894\ 76 \times 10^{-2}$	$\approx 6.804\ 60 \times 10^{-2}$	$\approx 51.714\ 94$	1

Esempi di uso di questa tabella: 1 bar \approx 0.986 923 atm
 1 Torr \approx 133.322 Pa

Note: 1 mmHg = 1 Torr, a meglio di 2×10^{-7} Torr, vedi Sezione 7.2, p. 138.

FATTORI NUMERICI DI CONVERSIONE DELL'ENERGIA

$$E = h\nu = hc\tilde{\nu} = kT; E_m = N_A E$$

	numero d'onda $\tilde{\nu}$		frequenza ν		energia E		energia molare E_m		temperatura T	
	cm^{-1}	MHz	aJ	eV	E_h	kJ mol ⁻¹	kcal mol ⁻¹	K		
$\tilde{\nu}$:	1 cm^{-1}	$\cong 1$	$2.997\,925 \times 10^4$	$1.986\,446 \times 10^{-5}$	$1.239\,842 \times 10^{-4}$	$4.556\,335 \times 10^{-6}$	$11.962\,66 \times 10^{-3}$	$2.859\,144 \times 10^{-3}$	1.438 775	
ν :	1 MHz	$\cong 3.335\,641 \times 10^{-5}$	1	$6.626\,069 \times 10^{-10}$	$4.135\,667 \times 10^{-9}$	$1.519\,830 \times 10^{-10}$	$3.990\,313 \times 10^{-7}$	$9.537\,076 \times 10^{-8}$	$4.799\,237 \times 10^{-5}$	
E :	1 aJ	$\cong 50\,341.17$	$1.509\,190 \times 10^9$	1	6.241 510	0.229 371 3	602.2142	143.9326	$7.242\,963 \times 10^4$	
	1 eV	$\cong 8065.545$	$2.417\,989 \times 10^8$	0.160 217 6	1	$3.674\,933 \times 10^{-2}$	96.485 34	23.060 55	$1.160\,451 \times 10^4$	
	1 E_h	$\cong 219\,474.6$	$6.579\,684 \times 10^9$	4.359 744	27.211 38	1	2625.500	627.5095	$3.157\,747 \times 10^5$	
E_m :	1 kJ mol ⁻¹	$\cong 83.593\,47$	$2.506\,069 \times 10^6$	$1.660\,539 \times 10^{-3}$	$1.036\,427 \times 10^{-2}$	$3.808\,799 \times 10^{-4}$	1	0.239 005 7	120.2722	
	1 kcal mol ⁻¹	$\cong 349.7551$	$1.048\,539 \times 10^7$	$6.947\,694 \times 10^{-3}$	$4.336\,410 \times 10^{-2}$	$1.593\,601 \times 10^{-3}$	4.184	1	503.2189	
T :	1 K	$\cong 0.695\,035\,6$	$2.083\,664 \times 10^4$	$1.380\,650 \times 10^{-5}$	$8.617\,343 \times 10^{-5}$	$3.166\,815 \times 10^{-6}$	$8.314\,472 \times 10^{-3}$	$1.987\,207 \times 10^{-3}$	1	

Il simbolo \cong dev'essere considerato significare 'corrispondente' od 'equivalente' all'incirca a. La conversione da kJ a kcal è esatta per definizione di kcal termochimica (vedi Sezione 2.11, nota 16, p. 58). I valori in questa tabella sono stati ottenuti dalle costanti riportate nel Cap. 5, p. 111. L'ultima cifra non è significativa.

Esempi di uso di questa tabella:

$$1 \text{ aJ} \cong 50\,341.17 \text{ cm}^{-1}$$

$$1 \text{ eV} \cong 96.485\,34 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Esempi di derivazione dei fattori di conversione:

$$1 \text{ aJ to MHz} \quad \frac{(1 \text{ aJ})}{h} \cong \frac{10^{-18} \text{ J}}{6.626\,068\,96 \times 10^{-34} \text{ J s}} \cong 1.509\,190 \times 10^{15} \text{ s}^{-1} \cong 1.509\,190 \times 10^9 \text{ MHz}$$

$$1 \text{ cm}^{-1} \text{ to eV} \quad (1 \text{ cm}^{-1}) hc \left(\frac{e}{e} \right) \cong \frac{(1.986\,445\,501 \times 10^{-25} \text{ J}) \times 10^2 e}{1.602\,176\,487 \times 10^{-19} \text{ C}} \cong 1.239\,842 \times 10^{-4} \text{ eV}$$

$$1 E_h \text{ to kJ mol}^{-1} \quad (1 E_h) N_A \cong (4.359\,743\,94 \times 10^{-18} \text{ J}) \times (6.022\,141\,79 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}) \cong 2625.500 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$1 \text{ kcal mol}^{-1} \text{ to cm}^{-1} \quad \frac{(1 \text{ kcal mol}^{-1})}{hcN_A} \cong \frac{4.184 \times (1 \text{ kJ mol}^{-1})}{h c N_A} \cong \frac{4.184 \times (10^3 \text{ J mol}^{-1})}{(1.986\,445\,501 \times 10^{-25} \text{ J}) \times 10^2 \text{ cm} \times (6.022\,141\,79 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1})} \cong 349.7551 \text{ cm}^{-1}$$

