



I U P A C



Sociedade Brasileira de Química

INTERNATIONAL UNION OF
PURE AND APPLIED CHEMISTRY



SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

Grandezas, Unidades e Símbolos em Físico-Química

Tradução atualizada para o Português
(nas variantes brasileira e portuguesa)
da 3^a edição em Inglês

IUPAC – União Internacional de Química Pura e Aplicada

*Publi***SBQ**

Grandezas, Unidades e Símbolos em Físico-Química

Tradução atualizada para o Português (nas variantes brasileira e portuguesa)
da 3^a edição em Inglês



Presidente da SBQ
ALDO JOSÉ GORGATTI ZARBIN

Publicações SBQ – *PubliSBQ*
Coordenador: LUIZ HENRIQUE CATALANI

Editora da Sociedade Brasileira de Química – *EditSBQ*
Coordenador: ETELVINO J. H. BECHARA

2018
SBQ – Ano 41

INTERNATIONAL UNION OF PURE AND APPLIED CHEMISTRY
Physical and Biophysical Chemistry Division



Sociedade Brasileira de Química



SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

Grandezas, Unidades e Símbolos em Físico-Química

Tradução atualizada para o Português (nas variantes brasileira e portuguesa)
da 3^a edição em Inglês, coordenada por
Romeu C. Rocha-Filho e Rui Fausto

Original em Inglês preparado para publicação por
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 e Anders J. Thor

1^a edição



Sociedade Brasileira de Química

PubliSBQ

EditSBQ

São Paulo, Brasil
2018

Obra originalmente publicada sob o título
Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry
ISBN 978-0-85404-433-7
IUPAC – RSC Publishing, 2007

Diagramação: ARQUIVO DIGITAL Soluções Editoriais – dotsacarlos@gmail.com

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária da UFSCar**
Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

G752g Grandezas, unidades e símbolos em físico-química / E. Richard Cohen ... [et al.] ; tradução de Romeu C. Rocha-Filho e Rui Fausto (coords.). – São Paulo : Sociedade Brasileira de Química, 2018.
272 p.

ISBN – 978-85-64099-19-7

1. Físico-química. 2. Notação. 3. Terminologia. I. Título.

CDD – 541.3 (20^a)
CDU – 544

© 2018, Sociedade Brasileira de Química

Todos os direitos reservados. Nenhuma parte desta publicação poderá ser reproduzida ou transmitida de qualquer modo ou por qualquer meio, eletrônico ou mecânico, incluindo fotocópia, gravação ou qualquer outro tipo de sistema de armazenamento e transmissão de informação, sem prévia autorização, por escrito, da Sociedade Brasileira de Química.

Direitos reservados
Editora da Sociedade Brasileira de Química – EditSBQ

Sociedade Brasileira de Química
Av. Prof. Lineu Prestes, 748
Bloco 3 superior, sala 371
CEP 05508-000
Cidade Universitária
São Paulo, Brasil
Fone: +55 (11) 3032-2299
www.sbz.org.br

Sumário

PREFÁCIO À TRADUÇÃO PORTUGUESA	ix
PREFÁCIO DA EDIÇÃO ORIGINAL	xiii
INTRODUÇÃO HISTÓRICA	xv
1 GRANDEZAS FÍSICAS E UNIDADES	1
1.1 Grandezas físicas e álgebra de grandezas	3
1.2 Grandezas de base e grandezas derivadas	4
1.3 Símbolos para grandezas físicas e unidades	4
1.3.1 Regras gerais para símbolos de grandezas	5
1.3.2 Regras gerais para símbolos de unidades	6
1.4 Uso das palavras “extensivo”, “intensivo”, “específico” e “molar”	6
1.5 Produtos e quocientes de grandezas físicas e unidades	7
1.6 Uso de fontes itálicas e romanas para símbolos em publicações científicas	7
2 TABELAS DE GRANDEZAS FÍSICAS	11
2.1 Espaço e tempo	13
2.2 Mecânica Clássica	14
2.3 Eletricidade e Magnetismo	16
2.4 Mecânica Quântica e Química Quântica	19
2.4.1 Teoria ab initio do campo autoconsistente de Hartree-Fock (ab initio SCF) . .	20
2.4.2 Teoria SCF de Hartree-Fock-Roothaan usando orbitais moleculares expandidos/as como combinações lineares de funções de base de orbitais atômicos/as (teoria LCAO-MO)	22
2.5 Átomos e moléculas	24
2.6 Espectroscopia	27
2.6.1 Símbolos para os operadores de momento angular e números quânticos . . .	33
2.6.2 Símbolos para operadores de simetria e notações para espécies de simetria .	34
2.6.3 Outros símbolos e convenções em Espectroscopia Óptica	35
2.7 Radiação eletromagnética	38
2.7.1 Grandezas e símbolos relacionados com a medição de intensidade de absorção	42
2.7.2 Convenções para intensidades de absorção em fases condensadas	44
2.8 Estado sólido	46
2.8.1 Símbolos para planos e direções em cristais	48
2.9 Termodinâmica estatística	49
2.10 Química Geral	51
2.10.1 Outros símbolos e convenções em Química	53
2.11 Termodinâmica Química	60
2.11.1 Outros símbolos e convenções em Termodinâmica Química	63
2.12 Cinética Química e Fotoquímica	67
2.12.1 Outros símbolos, termos e convenções usados em Cinética Química	72
2.13 Eletroquímica	74
2.13.1 Convenções de sinal e notação em Eletroquímica	77
2.14 Química de Coloides e de Superfícies	81
2.14.1 Estrutura de superfícies	83
2.15 Propriedades de transporte	85
2.15.1 Números característicos de transporte: grandezas de dimensão unitária . .	86

3 DEFINIÇÕES E SÍMBOLOS PARA UNIDADES	87
3.1 O Sistema Internacional de Unidades (SI)	89
3.2 Nomes e símbolos para as unidades de base do SI	90
3.3 Definições das unidades de base do SI	91
3.4 Unidades SI derivadas com nomes e símbolos especiais	93
3.5 Unidades SI derivadas para outras grandezas	94
3.6 Prefixos SI e prefixos para múltiplos binários	95
3.7 Unidades fora do SI em uso com o SI	96
3.8 Unidades coerentes e análise dimensional	97
3.9 Constantes físicas fundamentais usadas como unidades	98
3.9.1 Unidades atômicas	99
3.9.2 As equações da Química Quântica expressas em termos de grandezas reduzidas usando unidades atômicas	100
3.10 Grandezas adimensionais	102
3.10.1 Frações (valores relativos, rendimentos e eficiências)	102
3.10.2 Usos desaprovados	102
3.10.3 Unidades para grandezas logarítmicas: neper, bel e decibel	103
4 SÍMBOLOS MATEMÁTICOS RECOMENDADOS	105
4.1 Impressão de números e símbolos matemáticos	107
4.2 Símbolos, operadores e funções	109
5 GRANDEZAS FÍSICAS FUNDAMENTAIS	113
6 PROPRIEDADES DE PARTÍCULAS, ELEMENTOS E NUCLÍDEOS	117
6.1 Propriedades de partículas específicas	119
6.2 Pesos atômicos padrões dos elementos 2015	121
6.3 Propriedades de nuclídeos	126
7 CONVERSÃO DE UNIDADES	135
7.1 O uso da álgebra de grandezas	137
7.2 Tabelas de conversão para unidades	141
7.3 Os sistemas de unidades ESU, EMU, gaussiano e atômicas em relação ao SI	149
7.4 Transformação de equações da teoria eletromagnética entre as formas SIG(SI) e gaussiana	152
8 INCERTEZA	155
8.1 Incerteza de uma única grandeza medida	157
8.2 Propagação de incerteza para medidas não correlacionadas	160
8.3 Incertezas em termos de intervalos de confiança	160
9 ABREVIACÕES E ACRÔNIMOS	161
10 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	171
10.1 Fontes primárias	173
10.2 Fontes secundárias	175
11 ALFABETO GREGO	185
12 ÍNDICE DE SÍMBOLOS	187

13 ÍNDICE DE VARIANTES EUROPEIAS	201
14 ÍNDICE REMISSIVO	205
NOTAS	248
FATORES DE CONVERSÃO DA PRESSÃO	249
FATORES DE CONVERSÃO PARA EQUIVALENTES DA ENERGIA	250
TABELAS PERIÓDICAS	252

PREFÁCIO À TRADUÇÃO PORTUGUESA

Como explicitado na capa e na página de rosto, este manual é uma tradução atualizada, nas variantes brasileira e portuguesa, da 3^a edição de “*Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry*” (usualmente referido como “*Green Book*” e, como tal, daqui para frente referido apenas como Livro Verde).

Dado que a iniciativa desta tradução partiu da comunidade científica brasileira, a versão base da língua portuguesa usada ao longo deste livro é a utilizada no Brasil. Sempre que a ortografia, termos, expressões, etc. diferem dos utilizados em Portugal, tal variante é devidamente indicada neste manual (exceto no Índice de Símbolos – capítulo 12, e no Índice Remissivo – capítulo 14). Tome-se como exemplo o termo “elétron”: na primeira vez que este aparece no texto, indica-se a seguir entre parênteses (em verde na versão digital ou em cinza na versão impressa) a expressão utilizada em Portugal, (*Port.*: eletrão). Nas suas ocorrências posteriores, o termo elétron é então escrito em verde, na versão digital, ou cinza, na versão impressa, para indicar que existe uma variante europeia do termo já referida anteriormente. O capítulo 13 contém um índice remissivo de todas as variantes que aparecem no livro.

Considerando que a 3^a edição do Livro Verde (em língua inglesa) foi publicada em 2007, os valores da maioria das constantes físicas (e fatores de conversão delas decorrentes) bem como de algumas propriedades de partículas, elementos e nuclídeos constantes na versão original do livro estão desatualizados. Procedeu-se, portanto, à sua atualização nesta versão traduzida do livro, indicando-se as referências bibliográficas pertinentes. Esta é, pois, uma tradução atualizada da 3^a edição do Livro Verde. Note-se que a nomenclatura referente à grandeza cuja unidade é o mol (ou a mole, em Portugal) está atualizada de acordo com as últimas recomendações metrológicas brasileira e portuguesa: “quantidade de substância”¹ e “quantidade de matéria”², respectivamente.

Deve ainda salientar-se que esta tradução também está disponível na *internet* para consulta (www.sbz.org.br/livroverde). Além da facilidade de acesso e navegação típicas da *internet*, acresce que a versão *on line* do livro permitirá aceder aos nomes em Inglês das grandezas e constantes físicas contidas nas tabelas (como constam na versão original da 3^a edição do Livro Verde), bastando para isso posicionar o cursor sobre a grandeza ou constante física em apreço.

Histórico da tradução:

Em 2007, por ocasião do lançamento da 3^a edição do Livro Verde, a IUPAC aprovou um projeto da sua Divisão de Físico-Química e Biofísico-Química (*Physical and Biophysical Chemistry Division*) com o objetivo de criar condições para que os arquivos digitais dessa edição fossem usados para a preparação de documentos estruturalmente idênticos em outras línguas, incluindo o Português. Como já há algum tempo, com o apoio da Sociedade Brasileira de Química (SBQ), tínhamos (R.C. Rocha-Filho) manifestado interesse em realizar esta tradução, fomos convidados a participar nesse projeto, coordenado por Roberto Marquardt. O projeto previa a realização de um “workshop” para que os participantes (interessados em coordenar traduções para diferentes línguas) aprendessem a usar os documentos em LaTex, então disponibilizados, e discutessem questões técnicas específicas de linguagem que poderiam surgir durante a tradução, tendo em conta a limitação de se manter a estrutura original do manual. Este “workshop” foi realizado em Estrasburgo, França, de 25 a 27 de setembro de 2009, com participantes interessados em traduções para as seguintes línguas: Japonês, Turco, Romeno, Francês, Italiano, Alemão, Chinês e Português. Nesse momento, tinha-se em mente uma tradução apenas para a vertente brasileira do Português. No final de 2009, após diversas consultas a colegas, foi criado um grupo de trabalho para dar início à tradução. Foi então decidido realizar-se a tradução usando uma aplicação Wiki (denominada Wiki-IUPAC), de

¹Sistema Internacional de Unidades SI. 1^a ed. da 8^a ed. do BIPM. INMETRO/CICMA/SEPIN, Duque de Caxias – RJ, 2012.

²O Sistema de Unidades de Medidas Legais. Decreto-Lei nº 128/2010, de 3 de dezembro.

acesso restrito, que permitiu que os envolvidos pudessem trabalhar na tradução e sua revisão em ambiente colaborativo, diretamente a partir de um navegador da web; o sítio Wiki-IUPAC tornou-se operacional no final de janeiro de 2010.

Nesta mesma época, foi solicitada à IUPAC uma permissão formal para a tradução e publicação (em formato pdf e pequena tiragem em papel) de uma versão brasileira do Livro Verde. Esta permissão foi dada em 26 de fevereiro de 2010, mas com a recomendação de que a Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) fosse informada, para garantir que não houvesse duplicação de trabalho nem a possibilidade do surgimento de duas versões diferentes do manual, no Brasil e em Portugal. A tradução iniciou-se após contatos preliminares com a SPQ, mas problemas diversos levaram à interrupção dos trabalhos após a tradução inicial de apenas algumas secções do capítulo 2, com posterior desativação da Wiki-IUPAC. Em agosto de 2013, respondendo a uma solicitação de Roberto Marquardt, e com a gentil intermediação de Christopher M. A. Brett, reiniciou-se o diálogo entre a SBQ e a SPQ (representadas pelos seus presidentes, Adriano Defini Andricopulo – Universidade de São Paulo e Maria José Calhorda – Universidade de Lisboa), que permitiu recomeçar o trabalho de tradução no início de 2014. A SBQ e a SPQ acordaram compartilhar responsabilidades (e alguns custos) pela tradução do Livro Verde e designaram os coordenadores deste processo (Romeu C. Rocha-Filho – Universidade Federal de São Carlos, e Rui Fausto – Universidade de Coimbra), que, por sua vez, se responsabilizam pela escolha dos membros dos grupos de trabalho para tradução/revisão/adaptação das diferentes partes do manual. A seguir, indicam-se os nomes dos participantes neste processo, considerando-se as diferentes partes do manual (T = tradução; R = revisão da tradução). Os participantes portugueses realizaram, essencialmente, tarefas de adaptação do texto ao português europeu e revisão da tradução. No final, o texto do manual foi cuidadosamente revisto pelos coordenadores, que assumem a responsabilidade por eventuais problemas/imprecisões remanescentes.

Grupo de trabalho brasileiro

Capítulo 2

Secções 2.1 a 2.3 – T: Ignez Caracelli e Julio Zukerman Schpector (Universidade Federal de São Carlos).

Secções 2.4 e 2.5 – T: Ricardo Bicca de Alencastro (Universidade Federal do Rio de Janeiro); R: Luiz Carlos Gomide Freitas (Universidade Federal de São Carlos).

Secção 2.6 – T: Yoshio Kawano (Universidade de São Paulo); R: Gerardo Gerson Bezerra de Souza (Universidade Federal do Rio de Janeiro).

Secções 2.7 e 2.12 – T: Miguel Guillermo Neumann (Universidade de São Paulo); R: Frank Herbert Quina (Universidade de São Paulo).

Secções 2.8 e 2.14 – T: Paulo Celso Isolani (Universidade de São Paulo); R: Ignez Caracelli e Julio Zukerman Schpector (Universidade Federal de São Carlos).

Secções 2.9 e 2.11 – T: Aécio Pereira Chagas (Universidade Estadual de Campinas); R: Roberto de Barros Faria (Universidade Federal do Rio de Janeiro).

Secção 2.13 – T: Artur de Jesus Motheo (Universidade de São Paulo).

Para partes que não são explicitamente mencionadas, a tradução/revisão ficou sob a responsabilidade direta do coordenador brasileiro (Romeu C. Rocha-Filho). Para dúvidas de nomenclatura de compostos orgânicos, contou-se com a gentil colaboração de José Augusto Rosário Rodrigues (Universidade Estadual de Campinas). Para dúvidas sobre nomes de novos elementos químicos, contou-se com a gentil colaboração de Henrique Eisi Toma (Universidade de São Paulo).

Grupo de trabalho português

Capítulo 2

Secções 2.1 a 2.5 – Pedro J. S. B. Caridade (Universidade de Coimbra).

Secções 2.6 e 2.7 – José M. Gaspar Martinho (Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa).

Secção 2.8 – Maria Teresa Duarte (Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa).

Secção 2.9 – Víctor M. Morais (Universidade do Porto).

Secções 2.10 e 2.11 – Maria Ermelinda S. Eusébio (Universidade de Coimbra).

Secção 2.12 – Sebastião J. Formosinho (Universidade de Coimbra).

Secção 2.13 – Christopher M. A. Brett (Universidade de Coimbra).

Secções 2.14 e 1.15 – Artur J. M. Valente (Universidade de Coimbra).

Capítulo 3 – José M. Gaspar Martinho (Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa).

Capítulos 4 e 6 – João M. S. Campos Gil (Universidade de Coimbra).

Capítulo 5 – Manuel J. B. Fiolhais (Universidade de Coimbra).

Capítulo 7 – Artur J. M. Valente (Universidade de Coimbra).

Capítulo 8 – Alberto C. Canelas Pais (Universidade de Coimbra).

Capítulos 12 e 13 – Cláudio M. Nunes (Universidade de Coimbra).

Para partes que não são explicitamente mencionadas, a adaptação/revisão ficou sob a responsabilidade direta do coordenador português, Rui Fausto.

Muitas foram as pessoas que contribuíram para que esta tradução se concretizasse. Aquelas que foram responsáveis diretamente por isso estão mencionadas acima. Agradece-se também a Roberto Marquardt pela sua perseverança no incentivo à realização desta tradução. R.C. Rocha-Filho agradece a Carlos André Mores pelas muitas discussões e sugestões de como resolver problemas técnicos diversos surgidos ao longo do processo de produção do manual. Agradece-se ainda a todos aqueles que, de alguma forma, contribuíram também para este trabalho e, inadvertidamente, olvidamos mencionar. Finalmente, agradece-se o apoio financeiro da SBQ, SPQ e IUPAC para custear despesas relacionadas à aplicação Wiki-IUPAC e à produção e diagramação final do texto. Agradece-se ainda ao Laboratório de Pesquisas em Eletroquímica do Departamento de Química da Universidade Federal de São Carlos por custear a hospedagem da aplicação Wiki-IUPAC num servidor comercial e também parte das despesas relacionadas à produção e diagramação final do texto.

São Carlos e Coimbra (dezembro de 2017) – Romeu C. Rocha-Filho e Rui Fausto

PREFÁCIO DA EDIÇÃO ORIGINAL

O propósito deste manual é o de aprimorar a troca de informação científica entre os leitores com formação em diferentes disciplinas e através das diferentes nações. À medida que aumenta o volume da literatura científica, cada disciplina tem tendência a refugiar-se no seu próprio jargão. Este livro tenta prover uma compilação inteligível de termos e símbolos amplamente usados, de muitas fontes diferentes, juntamente com breves definições fáceis de compreender. Esta terceira edição reflete a experiência adquirida nas edições prévias e agradecemos sinceramente os vários comentários pertinentes que recebemos. A maior parte do material apresentado neste livro é padrão, mas algumas definições e alguns símbolos não são universalmente aceitos (*Port.: aceites*). Em tais casos, tentamos fornecer alternativas aceitáveis. As referências listam os relatórios da IUPAC e outras fontes onde estes problemas notacionais são discutidos de forma aprofundada. IUPAC é o acrônimo (*Port.: acrônimo*) do Inglês para União Internacional de Química Pura e Aplicada.

Um exemplo impressionante das consequências advindas de confusão de unidades foi a perda de um satélite da NASA, o “Orbitador Climático de Marte” (OCM). A Comissão de Investigação de Acidente (Relatório da Fase 1, de 10 de novembro de 1999)³ descobriu que a causa principal da perda do OCM foi “a não utilização de unidades métricas na codificação do arquivo de software de solo (na base)”. O impulso foi registrado (*Port.: registado*) em unidades do sistema britânico, libra (força) segundo (lbf s), em vez de nas unidades métricas newton (força) segundo (N s). Este fato (*Port.: facto*) causou um erro (por um fator de 4,45) que retirou o satélite da sua rota⁴. Nós instamos os usuários (*Port.: utilizadores*) deste livro a definirem sempre explicitamente os termos, as unidades e os símbolos que venham a usar.

Martin Quack e Jürgen Stohner compilaram esta edição em formato digital. Todo o texto do manual estará disponível na Internet algum tempo depois da publicação do livro e será acessível via o sítio da IUPAC, <http://www.iupac.org>. Sugestões e comentários são bem-vindos e podem ser endereçados ao cuidado de

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

As correções ao manual serão listadas periodicamente.

O livro foi sistematicamente atualizado e novas secções foram adicionadas. Como nas edições anteriores, o primeiro capítulo descreve o uso da álgebra de grandezas para o tratamento de grandezas físicas e as regras gerais para o simbolismo de grandezas e unidades, incluindo uma descrição expandida sobre o uso de fontes romanas e itálicas em impressão científica. O segundo capítulo lista os símbolos para grandezas numa vasta gama de tópicos usados em Físico-Química. Entre as novas partes deste capítulo, consta uma secção sobre a estrutura de superfícies. O terceiro capítulo descreve o uso do Sistema Internacional de Unidades (SI) e alguns outros sistemas tais como as unidades atómicas (*Port.: atómicas*). O Capítulo 4 considera símbolos matemáticos e o seu uso em impressão. O Capítulo 5 apresenta a revisão de 2006 das constantes físicas fundamentais, e o Capítulo 6 as propriedades de partículas, elementos e nucléos. Segue-se a conversão de unidades, no Capítulo 7, juntamente com as equações de Eletricidade e Magnetismo nas suas várias formas. O Capítulo 8 é totalmente novo e resume o tratamento de incertezas em medidas físicas. O Capítulo 9 apresenta uma lista de abreviações e *acrônimos*. O Capítulo 10 fornece as referências, e o Capítulo 11, o alfabeto grego. Finalmente, nos Capítulos 12 e 13, apresentam-se os índices. A Tabela Periódica dos Elementos da IUPAC é mostrada na 3^a capa, e as páginas precedentes listam fatores de conversão frequentemente usados para unidades de pressão e energia.

³O relatório sobre o OCM pode ser encontrado em ftp://ftp.hq.nasa.gov/pub/pao/reports/1999/MCO_report.pdf.

⁴Impulso (variação do momento) aqui significa a/o integral da força no tempo.

Muitas pessoas contribuíram para este volume. As pessoas mais diretamente responsáveis são referidas na Introdução Histórica. Muitos dos membros da IUPAC I.1 continuaram a fazer contribuições ativas muito depois dos seus mandatos na Comissão terem terminado. Gostaríamos também de agradecer aos membros de outras comissões da Divisão de Físico-Química: Cinética Química, Coloides e Química de Superfícies, Eletroquímica, Espectroscopia e Termodinâmica, cada uma das quais contribuiu para as secções do livro relativas aos seus diferentes interesses. Agradecemos ainda a todos aqueles que contribuíram de alguma forma para esta edição do livro e de quem, inadvertidamente, nos podemos ter esquecido de referir nestas listagens.

*Comissão de Símbolos, Terminologia
e Unidades Físico-Químicos*

Jeremy G. Frey e Herbert L. Strauss

INTRODUÇÃO HISTÓRICA

O *Manual de Símbolos e Terminologia para Grandezas e Unidades Físico-Químicas* (“*Manual of Symbols and Terminology for Physicochemical Quantities and Units*” [1.a]), do qual este livro é um sucessor direto, foi inicialmente preparado para publicação em nome da Divisão de Físico-Química da IUPAC por M. L. McGlashan, em 1969, quando ele era o presidente da Comissão de Símbolos, Terminologia e Unidades Físico-Químicos (I.1). McGlashan deu uma contribuição substancial para a consecução do objetivo que ele descreveu no prefácio daquela primeira edição como sendo “assegurar clareza e precisão, e maior concordância no uso de símbolos, pelos químicos em diferentes países, entre os físicos, químicos e engenheiros, e pelos editores de revistas científicas”. A segunda edição do manual, preparada por M. A. Paul em 1973 [1.b], e a terceira edição, preparada por D. H. Whiffen em 1976 [1.c], foram revisões para considerar vários desenvolvimentos no *Système International d’Unités* (Sistema Internacional de Unidades, abreviação internacional SI), e outros desenvolvimentos em terminologia.

A primeira edição de *Grandezas, Unidades e Símbolos em Físico-Química*, publicada em 1988 (“*Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry*” [2.a]), foi uma versão revista e ampliada dos manuais anteriores. A decisão de dar início a este projeto, originalmente proposto por N. Kallay, foi tomada na Assembleia Geral da IUPAC em Leuven, em 1981, quando D. R. Lide era o presidente da Comissão. O grupo de trabalho foi escolhido na reunião de 1983, em Lyngby, quando K. Kuchitsu era o presidente, e do começo ao fim o projeto recebeu forte apoio de todos os membros atuais e passados da Comissão I.1 e outras comissões da Físico-Química, particularmente de D. R. Lide, D. H. Whiffen e N. Sheppard.

As extensões incluíram parte do material anteriormente publicado em apêndices [1.d-1.k]; todas as resoluções mais recentes da Conférence Générale des Poids et Mesures (CGPM); e as recomendações da União Internacional de Física Pura e Aplicada (IUPAP) de 1978 e da Comissão Técnica 12 da Organização Internacional de Normalização, *Grandezas, unidades, símbolos, fatores de conversão* (ISO/TC 12). As tabelas de grandezas físicas (Capítulo 2) foram completadas de modo a incluir equações definidoras e unidades SI para cada grandeza. O estilo também foi levemente modificado, deixando de ser um livro de regras para passar a ser um manual de recomendações destinado a ajudar os cientistas praticantes no seu trabalho quotidiano. Exemplos disso são a inclusão de notas extensas e as inserções de textos explicativos no Capítulo 2, a introdução da álgebra de grandezas, e as tabelas de fatores de conversão entre unidades SI e fora do SI e as equações apresentadas no Capítulo 7.

A segunda edição (1993) foi uma versão revista e ampliada da edição anterior. As revisões foram baseadas nas resoluções recentes da CGPM [3], nas novas recomendações da IUPAP [4], nos novos padrões internacionais ISO 31 [5,6], nalgumas recomendações publicadas por outras comissões da IUPAC e em numerosos comentários que recebemos de químicos de todo o mundo. As revisões na segunda edição foram realizadas por Ian Mills e Tom Cvitaš, com contribuição substancial de Robert Alberty, Kozo Kuchitsu e Martin Quack, bem como de outros membros da Comissão de Símbolos, Terminologia e Unidades Físico-Químicos.

O manual teve ampla aceitação na comunidade química, e várias edições foram traduzidas para o russo [2.c], húngaro [2.d], japonês [2.e], alemão [2.f], romeno [2.g], espanhol [2.h] e catalão [2.i]. Grande parte do manual foi reproduzida na 71^a e em edições subsequentes do *Handbook of Chemistry and Physics* publicado pela CRC Press.

O trabalho de revisão da segunda edição começou imediatamente após sua publicação e, entre 1995 e 1997, discutiu-se a possibilidade de mudar o título para “Grandezas, Unidades e Símbolos Físico-Químicos” e de realizar revisões bastante completas em várias partes. Salientou-se que o livro cobria tanto o campo geralmente denominado “Físico-Química” como o denominado “Física Química”. De **fato** consideramos o campo interdisciplinar ampliado, no qual a fronteira entre a Física e a Química desapareceu em grande parte [10]. Na mesma época, decidiu-se produzir todo o livro como um arquivo de texto que futuramente permitisse o acesso direto por computador, algum tempo depois da versão impressa ter sido disponibilizada. Apoio a esta decisão foi recebido da secretaria da IUPAC em Research Triangle Park, NC (EUA) (John W. Jost). O trabalho prático de revisão foi realizado na ETH Zürich, com as contribuições mais significantes vindas do grupo de editores listados na capa. Pela nova estrutura da IUPAC, estes são definidos como membros de

projeto e não só através de afiliação na comissão. A estrutura básica desta edição foi finalmente estabelecida numa reunião de trabalho dos membros do projeto em Engelberg, Suíça, em março de 1999, enquanto que revisões adicionais foram discutidas na reunião de Berlim (agosto de 1999) e posteriores. Em 2001, finalmente, decidiu-se usar o antigo título. Nesta edição, todo o texto e todas as tabelas foram revistos e muitos capítulos substancialmente alterados. Este trabalho foi realizado em grande parte na ETH Zürich, onde Jürgen Stohner coordenou as várias contribuições e correções do grupo de membros do projeto atual e preparou o documento eletrônico (*Port.: eletrónico*) pronto para impressão. As maiores alterações em relação às edições anteriores referem-se a uma atualização completa e substancial de novos valores de constantes recentemente disponibilizados, a inclusão das secções sobre incertezas em grandezas físicas, grandezas adimensionais e símbolos matemáticos, e o aprimoramento de numerosas outras secções.

Ao finalizar este breve levantamento histórico, podemos referir o que pode ser já considerada uma tradição deste manual. Não se tem o intuito de apresentar uma lista de recomendações na forma de ordens estritas. Pelo contrário, segue-se o princípio de que este manual deve ajudar o *usuário* no que pode ser denominado “boas práticas da linguagem científica”. Se existem diversos usos ou convenções bem estabelecidos, eles foram mencionados sempre que isso é útil, mas levando sempre em consideração a variedade, se tal variedade não for prejudicial à clareza. Em alguns casos, possíveis melhorias de convenções ou linguagem são mencionadas com referência apropriada, mesmo se incomuns, mas sem recomendação específica. Nos casos em que os usos comuns estão desaprovados, há fortes razões para tal e o leitor deve seguir o conselho correspondente aqui fornecido.

Zürich, 2007

Martin Quack

A seguir, informa-se a composição da Comissão no período 1963 a 2006, durante o qual as sucessivas edições deste manual foram preparadas:

Membros titulares

Presidente: 1963-1967 G. Waddington (EUA); 1967-1971 M.L. McGlashan (Reino Unido); 1971-1973 M.A. Paul (EUA); 1973-1977 D.H. Whiffen (Reino Unido); 1977-1981 D.R. Lide Jr (EUA); 1981-1985 K. Kuchitsu (Japão); 1985-1989 I.M. Mills (Reino Unido); 1989-1993 T. Cvitaš (Croácia); 1993-1999 H.L. Strauss (EUA); 2000-2007 J.G. Frey (Reino Unido); 2008- R. Marquardt (França).

Secretário: 1963-1967 H. Brusset (França); 1967-1971 M.A. Paul (EUA); 1971-1975 M. Fayard (França); 1975-1979 K.G. Weil (Alemanha); 1979-1983 I. Ansara (França); 1983-1985 N. Kallay (Croácia); 1985-1987 K.H. Homann (Alemanha); 1987-1989 T. Cvitaš (Croácia); 1989-1991 I.M. Mills (Reino Unido); 1991-1997, 2001-2005 M. Quack (Suíça); 1997-2001 B. Holmström (Suécia).

Outros membros titulares

1975-1983 I. Ansara (França); 1965-1969 K.V. Astachov (Rússia); 1963-1971 R.G. Bates (EUA); 1963-1967 H. Brusset (França); 1985-1997 T. Cvitaš (Croácia); 1963 F. Daniels (EUA); 1979-1981 D.H.W. den Boer (Países Baixos); 1981-1989 E.T. Denisov (Rússia); 1967-1975 M. Fayard (França); 1997-2005 J. Frey (Reino Unido); 1963-1965 J.I. Gerassimov (Rússia); 1991-2001 B. Holmström (Suécia); 1979-1987 K.H. Homann (Alemanha); 1963-1971 W. Jaenicke (Alemanha); 1967-1971 F. Jellinek (Países Baixos); 1977-1985 N. Kallay (Croácia); 1973-1981 V. Kellö (Checoslováquia); 1989-1997 I.V. Khudyakov (Rússia); 1985-1987 W.H. Kirchhoff (EUA); 1971-1979 J. Koefoed (Dinamarca); 1979-1987 K. Kuchitsu (Japão); 1971-1981 D.R. Lide Jr (EUA); 1997-2001, 2006- R. Marquardt (França); 1963-1971 M.L. McGlashan (Reino Unido); 1983-1991 I.M. Mills (Reino Unido); 1963-1967 M. Milone (Itália); 1967-1973 M.A. Paul (EUA); 1991-1999, 2006- F. Pavese (Itália); 1963-1967 K.J. Pedersen (Dinamarca); 1967-1975 A. Perez-Masiá (Espanha); 1987-1997 and 2002-2005 M. Quack (Suíça); 1971-1979 A. Schuyff (Países Baixos); 1967-1970 L.G. Sillén (Suécia); 2008- J. Stohner (Suíça); 1989-1999 and 2002-2005 H.L. Strauss (EUA); 1995-2001 M. Takami (Japão); 1987-1991 M. Tasumi (Japão); 1963-1967 G. Waddington (EUA); 1981-1985 D.D. Wagman (EUA); 1971-1979 K.G. Weil (Alemanha); 1971-1977 D.H. Whiffen (Reino Unido); 1963-1967 E.H. Wiebenga (Países Baixos).

Membros associados

1983-1991 R.A. Alberty (EUA); 1983-1987 I. Ansara (França); 1979-1991 E.R. Cohen (EUA); 1979-1981 E.T. Denisov (Rússia); 1987-1991 G.H. Findenegg (Alemanha); 1987-1991 K.H. Homann (Alemanha); 1971-1973 W. Jaenicke (Alemanha); 1985-1989 N. Kallay (Croácia); 1987-1989 and 1998-1999 I.V. Khudyakov (Rússia); 1979-1980 J. Koefoed (Dinamarca); 1987-1991 K. Kuchitsu (Japão); 1981-1983 D.R. Lide Jr (EUA); 1971-1979 M.L. McGlashan (Reino Unido); 1991-1993 I.M. Mills (Reino Unido); 1973-1981 M.A. Paul (EUA); 1999-2005 F. Pavese (Itália); 1975-1983 A. Perez-Masiá (Espanha); 1997-1999 M. Quack (Suíça); 1979-1987 A. Schuyff (Países Baixos); 1963-1971 S. Seki (Japão); 2000-2001 H.L. Strauss (EUA); 1991-1995 M. Tasumi (Japão); 1969-1977 J. Terrien (França); 1994-2001 A.J. Thor (Suécia); 1975-1979 L. Villena (Espanha); 1967-1969 G. Waddington (EUA); 1979-1983 K.G. Weil (Alemanha); 1977-1985 D.H. Whiffen (Reino Unido).

Representantes nacionais

Inúmeros representantes nacionais prestaram serviço na comissão ao longo de muitos anos. Não fornecemos aqui essa longa lista.

1 GRANDEZAS FÍSICAS E UNIDADES

1.1 Grandezas físicas e álgebra de grandezas

O valor de uma *grandeza física* Q pode ser expresso como o produto de um *valor numérico* $\{Q\}$ e uma *unidade* $[Q]$

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

Nem o nome da grandeza física, nem o símbolo usado para a denotar, implicam uma escolha particular de unidade (vide nota de rodapé 3, p. 4).

Grandezas físicas, valores numéricos e unidades podem todos ser tratados usando regras comuns da álgebra. Assim, por exemplo, podemos escrever para o comprimento de onda λ de uma das linhas amarelas do sódio

$$\lambda = 5,896 \times 10^{-7} \text{ m} = 589,6 \text{ nm} \quad (2)$$

onde m é o símbolo para a unidade de comprimento denominada metro (vide Secções 3.2 e 3.3, p. 90 e 91, respectivamente), nm é o símbolo para o nanometro (*Port.*: nanómetro), e as unidades metro e nanometro se relacionam por

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

A equivalência das duas expressões para λ na Equação (2) surge diretamente quando tratamos as unidades pelas regras da álgebra e reconhecemos a identidade de 1 nm com 10^{-9} m na Equação (3). O comprimento de onda pode também ser expresso nas formas

$$\lambda/\text{m} = 5,896 \times 10^{-7} \quad (4)$$

ou

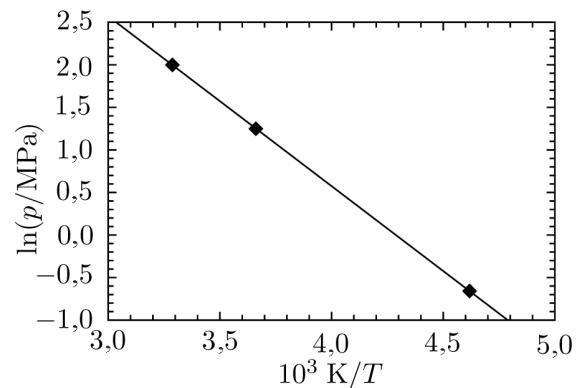
$$\lambda/\text{nm} = 589,6 \quad (5)$$

Pode ser útil trabalhar com variáveis que sejam definidas dividindo-se a grandeza por uma dada unidade. Por exemplo, ao tabular os valores numéricos de grandezas físicas ou identificar os eixos de gráficos, é particularmente conveniente usar o quociente de uma grandeza física por uma unidade de tal forma que os valores a serem tabulados sejam valores numéricos, como nas Equações (4) e (5).

Exemplo

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

T/K	$10^3 K/T$	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



Podem ser usadas formas algebraicamente equivalentes em vez de $10^3 K/T$, tais como kK/T ou $10^3 (T/\text{K})^{-1}$. As equações envolvendo valores numéricos dependem da escolha das unidades, enquanto que equações envolvendo grandezas têm a vantagem de serem independentes desta escolha. Portanto, geralmente deve-se preferir o uso de equações envolvendo grandezas.

O método aqui descrito para manusear grandezas físicas e as suas unidades é conhecido como *álgebra de grandezas* [11–13]. A utilização deste método é recomendada em todos os domínios científicos e tecnológicos. O uso da álgebra de grandezas não implica nenhuma escolha particular de unidades; na realidade uma das vantagens da álgebra de grandezas é que esta torna as mudanças de unidades particularmente fáceis de serem seguidas. Na página 137 da Secção 7.1, que é dedicada aos problemas relacionados com a transformação de um conjunto de unidades num outro, são dados mais exemplos do uso da álgebra de grandezas.

1.2 Grandezas de base e grandezas derivadas

Por convenção, as grandezas físicas são organizadas num sistema dimensional construído sobre sete *grandezas de base*, cada uma delas possuindo a sua própria dimensão. Estas grandezas de base no Sistema Internacional de Grandezas (SIG), no qual se baseia o Sistema Internacional de Unidades (SI), e os principais símbolos usados para as denotar e às suas dimensões, são como se segue:

<i>Grandeza de base</i>	<i>Símbolo para grandeza</i>	<i>Símbolo para dimensão</i>
comprimento	l	L
massa	m	M
tempo	t	T
corrente elétrica	I	I
temperatura termodinâmica	T	Θ
quantidade de substância	n	N
<i>(Port.: quantidade de matéria)</i>		
intensidade luminosa	I_v	J

Todas as outras grandezas são denominadas *grandezas derivadas* e são consideradas como tendo dimensões derivadas algebricamente, por multiplicação e divisão, a partir das sete grandezas de base.

Exemplo A dimensão de energia é igual à dimensão de $M L^2 T^{-2}$

Isto pode ser escrito com o símbolo dim para dimensão (vide nota de rodapé⁵, abaixo): $\text{dim}(E) = \text{dim}(m \cdot l^2 \cdot t^{-2}) = M L^2 T^{-2}$

A grandeza *quantidade de substância* tem uma importância especial para os químicos. A *quantidade de substância* é proporcional ao número de entidades elementares especificadas da substância em consideração. O fator de proporcionalidade é o mesmo para todas as substâncias; o seu inverso é a *constante de Avogadro* (vide Secção 2.10, p. 51, Secção 3.3, p. 92, e Capítulo 5, p. 115). A unidade SI para *quantidade de substância* é o mol (*Port.: a mole*), definido na Secção 3.3, p. 92. A grandeza física “*quantidade de substância*” não deve mais ser denominada “número de moles”, assim como a grandeza física “massa” não deve ser denominada “número de quilogramas” (ou “número de quilogramas”). O nome “*quantidade de substância*”, às vezes também referido como “*quantidade química*”, pode frequentemente e facilmente ser abreviado para a palavra única “*quantidade*”, particularmente em frases tais como “*concentração de quantidade*” (vide nota de rodapé⁶, abaixo), e “*quantidade de N₂*”. Foi sugerido um possível nome para uso internacional: “*enpletia*” [10] (do Grego, similar a entalpia e entropia).

O número e a escolha das grandezas de base são pura convenção. Outras grandezas poderiam ser consideradas como sendo mais fundamentais, como a carga elétrica Q em vez da corrente elétrica I .

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

Contudo, no SIG, a corrente elétrica é a grandeza escolhida como grandeza de base e o ampere é a unidade de base do SI. Na Física Atômica e Molecular, são úteis as denominadas *unidades atômicas* (vide Secção 3.9, p. 98).

1.3 Símbolos para grandezas físicas e unidades [5.a]

Deve-se fazer uma distinção clara entre os nomes e símbolos para grandezas físicas, e os nomes e símbolos para unidades. No Capítulo 2, p. 11, são fornecidos nomes e símbolos para várias

⁵O símbolo $[Q]$ foi usado anteriormente para a *dimensão* de Q , mas este símbolo deve ser usado preferencialmente para a *unidade* de Q .

⁶A Divisão de Química Clínica da IUPAC recomenda que “*concentração de quantidade de substância*” seja abreviado como “*concentração de substância*” (*Port.: “concentração de matéria”*) [14].

grandezas. Os símbolos aí fornecidos são *recomendações*. Se outros símbolos forem usados, devem ser claramente definidos. Nomes e símbolos para unidades são fornecidos no Capítulo 3, p. 87; os símbolos para unidades aí listados são citados a partir do Bureau International de Pesos e Medidas (BIPM) e são *obrigatórios*.

1.3.1 Regras gerais para símbolos de grandezas

O símbolo para uma grandeza deve ser uma única letra (vide nota de rodapé⁷, abaixo) do alfabeto latino ou grego (vide Secção 1.6, p. 7). Podem ser usadas tanto letras maiúsculas como minúsculas. A letra deve ser impressa em tipo itálico (inclinado). Quando necessário, o símbolo pode ser modificado por subscritos e sobrescritos de significado especificado. Subscritos e sobrescritos que são por sua vez símbolos para grandezas físicas ou para números devem ser impressos em tipo itálico (inclinado); outros subscritos e sobrescritos devem ser impressos em tipo romano (redondo).

<i>Exemplos</i>	C_p	para capacidade calorífica (<i>Port.</i> : capacidade térmica)
		a pressão constante
	p_i	para pressão parcial da i -ésima substância
mas	C_B	para capacidade calorífica da substância B
	μ_B^α	para potencial químico da substância B na fase α
	E_c	para energia cinética
	μ_r	para permeabilidade relativa
	$\Delta_r H^\ominus$	para entalpia de reação padrão
	V_m	para volume molar
	A_{10}	para absorbância (<i>Port.</i> : absorvência ou absorvância) na base 10

O significado de símbolos para grandezas físicas pode ser adicionalmente qualificado pelo uso de um ou mais subscritos, ou por informação contida entre parênteses.

<i>Exemplos</i>	$\Delta_f S^\ominus(\text{HgCl}_2, \text{cr}, 25^\circ\text{C}) = -154,3 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
	$\mu_i = (\partial G / \partial n_i)_{T,p,\dots,n_j,\dots; j \neq i}$ ou $\mu_i = (\partial G / \partial n_i)_{T,p,n_j \neq i}$

Vetores e matrizes podem ser impressos em tipo itálico em negrito, *e.g.*, \mathbf{A} , \mathbf{a} . Tensores podem ser impressos em tipo itálico sem serifas em negrito, *e.g.*, \mathbf{S} , \mathbf{T} . Vetores podem ser alternativamente caracterizados por uma seta, \vec{A} , \vec{a} e tensores de segunda ordem por uma seta dupla, $\vec{\vec{S}}$, $\vec{\vec{T}}$.

⁷Faz-se uma exceção para certos números característicos ou “grandezas adimensionais” usados no estudo de processos de transporte, para os quais os símbolos internacionalmente acordados consistem de duas letras (vide Secção 2.15.1, p. 86).

Exemplo número de Reynolds, Re ; pH é outro exemplo (vide Secções 2.13 e 2.13.1 (viii), p. 74 e 79).

Quando tais símbolos aparecem como fatores num produto, devem ser separados de outros símbolos por um espaço, sinal de multiplicação, ou parênteses.

1.3.2 Regras gerais para símbolos de unidades

Símbolos de unidades devem ser impressos em tipo romano. Devem permanecer inalterados no plural, e não devem ser seguidos de ponto, exceto no final de uma frase.

Exemplo $r = 10 \text{ cm}$, não cm. ou cms.

Os símbolos para unidades devem ser impressos em letras minúsculas, a menos que sejam derivados de um nome próprio, caso em que devem ser iniciados com uma letra maiúscula. Uma exceção é o símbolo para o litro, que pode ser tanto L como l, *i.e.* tanto maiúsculo como minúsculo (vide nota de rodapé⁸, abaixo).

Exemplos m (metro), s (segundo), mas J (joule), Hz (hertz)

Múltiplos e submúltiplos decimais de unidades podem ser indicados por meio do uso de prefixos, como definido na Secção 3.6, p. 95.

Exemplos nm (nanometro), MHz (megahertz), kV (kilovolt ou quilovolt)

1.4 Uso das palavras “extensivo”, “intensivo”, “específico” e “molar”

Uma grandeza que é aditiva para subsistemas que não interagem, independentes, é denominada *extensiva*; exemplos: massa m , volume V , energia de Gibbs G . A grandeza que é independente da extensão do sistema é denominada *intensiva*; exemplos: temperatura T , pressão p , potencial químico (energia de Gibbs molar parcial) μ .

O adjetivo *específico* após o nome de uma grandeza extensiva é usado para significar *dividido pela massa*. Quando o símbolo para a grandeza extensiva é uma letra maiúscula, frequentemente o símbolo para a grandeza específica é a correspondente letra minúscula.

Exemplos volume, V , e
volume específico, $v = V/m = 1/\rho$ (onde ρ é a densidade de massa);
capacidade calorífica a pressão constante, C_p , e
capacidade calorífica específica a pressão constante, $c_p = C_p/m$

A ISO (Organização Internacional de Normalização) [5.a] e a Divisão de Química Clínica da IUPAC recomendam que se dê nomes sistemáticos a grandezas físicas derivadas por divisão por massa, volume, área e comprimento, usando-se os atributos mássico ou específico, volúmico, areico e lineico, respectivamente. Além disso, a Divisão de Química Clínica recomenda o uso do atributo *entidádico* para grandezas obtidas por divisão pelo número de entidades [14]. Assim, por exemplo, o volume específico poderia ser denominado de volume mássico e a densidade de carga superficial seria carga areica.

O adjetivo *molar* após o nome de uma grandeza extensiva geralmente significa *dividido pela quantidade de substância*. O subscrito m no símbolo para a grandeza extensiva denota a correspondente grandeza molar.

Exemplos volume, V volume molar, $V_m = V/n$ (Secção 2.10, p. 51)
entalpia, H entalpia molar, $H_m = H/n$

Se o nome enpletia (vide Secção 1.2, p. 4) for usado no lugar de “quantidade de substância”, poder-se-á usar volume enplético em vez de volume molar, por exemplo. A palavra “molar” viola o princípio de que o nome da grandeza não deve ser misturado ao nome da unidade (**mol**, neste caso). O uso de enplético resolve este problema. Às vezes é conveniente dividir todas as grandezas extensivas pela *quantidade de substância*, de modo que todas as grandezas se tornem intensivas; o subscrito m pode então ser omitido se esta convenção estiver explicitada e não houver risco de ambiguidade. (Vide também os símbolos recomendados para grandezas molares parciais na Secção 2.11, p. 61, e na Secção 2.11.1 (iii), p. 64.)

Existem alguns poucos casos onde o adjetivo *molar* tem um significado diferente, nomeadamente, *dividido pela concentração de quantidade de substância*.

⁸No entanto, apenas o l minúsculo é usado pela ISO e pela Comissão Eletrotécnica Internacional (IEC).

- Exemplos*
- coeficiente de absorção, a
 - coeficiente de absorção molar, $\varepsilon = a/c$ (vide Secção 2.7, nota 22, p. 41)
 - condutividade, κ
 - condutividade molar, $\Lambda = \kappa/c$ (vide Secção 2.13, p. 77)

1.5 Produtos e quocientes de grandezas físicas e unidades

Produtos de grandezas físicas podem ser escritos de qualquer um dos modos

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

e, de modo similar, quocientes podem ser escritos

$$a/b \quad \text{ou} \quad \frac{a}{b} \quad \text{ou escrevendo-se o produto de } a \text{ e } b^{-1}, \text{ e.g. } ab^{-1}$$

- Exemplos* $F = ma$, $p = nRT/V$

Não se deve usar mais de uma barra (/) na mesma expressão, a menos que sejam usados parênteses para eliminar as ambiguidades.

- Exemplo* $(a/b)/c$ ou $a/(b/c)$ (em geral diferentes), não $a/b/c$

Ao avaliar combinações de muitos fatores, a multiplicação escrita sem um sinal de multiplicação tem precedência sobre a divisão, no sentido de que a/bc é interpretado como $a/(bc)$ e não como $(a/b)c$; no entanto, é necessário o uso de parênteses para eliminar ambiguidade em todas as circunstâncias, evitando-se assim expressões do tipo a/bcd etc. Da mesma forma, $a/b + c$ é interpretado como $(a/b) + c$ e não como $a/(b + c)$. Novamente, o uso de parênteses é recomendado (obrigatório para $a/(b + c)$).

Produtos e quocientes de unidades podem ser escritos de modo similar, mas o sinal (\times) não é usado como um sinal de multiplicação entre unidades. Quando um produto de unidades é escrito sem qualquer sinal de multiplicação, deve ser deixado um espaço entre os símbolos das unidades.

- Exemplo* $1 \text{ N} = 1 \text{ m kg s}^{-2} = 1 \text{ m} \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-2} = 1 \text{ m kg/s}^2$, não 1 mkgs^{-2}

1.6 Uso de fontes itálicas e romanas para símbolos em publicações científicas

Os manuscritos científicos devem seguir as convenções quanto ao uso de fontes itálicas e romanas para símbolos. Em textos corridos, geralmente usam-se fontes itálicas para ênfase, mas este tipo de fonte tem um significado bastante específico quando usado para símbolos em textos e equações científicos. As indicações que se seguem devem ser tidas em consideração para o uso correto de fontes itálicas na preparação de material manuscrito.

1. As regras gerais relativas ao uso de fontes itálicas ou romanas são apresentadas na Secção 1.3.2, p. 6 e na Secção 4.1, p. 107 em relação a símbolos e operadores matemáticos. Estas regras também são apresentadas nas Normas Internacionais ISO 31 (sucedida pela ISO/IEC 80000) [5], ISO 1000 [6], e na Brochura do SI [3].
2. A regra geral prevê que símbolos que representam grandezas ou variáveis físicas sejam itálicos, enquanto símbolos que representam unidades, constantes matemáticas, ou designações, sejam romanos. Às vezes pode surgir a dúvida se um símbolo representa uma grandeza ou se tem algum outro significado (tal como o de uma designação): uma boa regra é que grandezas, ou variáveis, podem ter um intervalo de valores numéricos, enquanto designações não podem. Vetores, tensores e matrizes são denotados usando-se uma fonte negrita, mas devem ser escritos em itálico visto que se trata de grandezas.

- Exemplos* A constante de Planck $h = 6,626\ 070\ 040(81) \times 10^{-34} \text{ J s}$.
A intensidade do campo elétrico \mathbf{E} tem componentes E_x, E_y e E_z .
A massa da minha caneta é $m = 24 \text{ g} = 0,024 \text{ kg}$.

3. A regra acima aplica-se a todas as letras de ambos os alfabetos grego e latino, embora alguns autores resistam a escrever as letras gregas em itálico.

Exemplo Quando o símbolo μ é usado para denotar uma grandeza física (tal como a permeabilidade ou a massa reduzida) deve ser itálico, porém quando é usado como um prefixo em uma unidade tal como micrograma, μg , ou quando é usado como o símbolo para o múon (*Port.*: muão), μ (vide parágrafo 5, abaixo), deve ser romano.

4. Números, e designações, são escritos em tipo romano.

Exemplos Os estados eletrônicos fundamental e primeiro excitado da molécula CH_2 são denotados $\dots(2a_1)^2(1b_2)^2(3a_1)^1(1b_1)^1$, $\tilde{X}^3\text{B}_1$, e $\dots(2a_1)^2(1b_2)^2(3a_1)^2$, $\tilde{\alpha}^1\text{A}_1$, respectivamente. A configuração eletrônica π e a simetria da molécula de benzeno no seu estado fundamental são denotadas: $\dots(a_{2u})^2(e_{1g})^4$, $\tilde{X}^1\text{A}_{1g}$. Todos estes símbolos são designações e, portanto, devem ser escritos em tipo romano.

5. Símbolos para elementos do sistema periódico devem ser escritos em tipo romano. Da mesma forma, os símbolos usados para representar partículas elementares são sempre romanos. (Vide, no entanto, parágrafo 9 abaixo para o uso de fonte itálica em nomes de compostos químicos.)

Exemplos H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne, ... para átomos; e para o elétron (*Port.*: eletrão), p para o próton (*Port.*: protão), n para o nêutron (*Port.*: neutrão), μ para o múon, α para a partícula alfa, etc.

6. Símbolos para grandezas físicas são uma única letra, ou excepcionalmente duas, do alfabeto latino ou grego, mas são frequentemente suplementados com subscritos, sobrescritos ou informação em parênteses para especificar mais precisamente a grandeza. Símbolos adicionais usados desta maneira são ou itálicos ou romanos, dependendo do que eles representam.

Exemplos H denota entalpia, mas H_m denota entalpia molar (m é uma designação mnemônica (*Port.*: mnemónica) para molar, e é portanto romano). C_p denota a capacidade calorífica a pressão p constante e C_V a capacidade calorífica a volume V constante (note o m romano, mas p e V itálicos). O potencial químico do argônio (*Port.*: árgon) pode ser denotado μ_{Ar} ou $\mu(\text{Ar})$, mas o potencial químico do i -ésimo componente numa mistura deve ser denotado μ_i , onde i é itálico porque se trata de um subscrito variável.

7. Símbolos para operadores matemáticos são sempre romanos. Isto aplica-se ao símbolo Δ para uma diferença, δ para variação infinitesimal, d para uma diferença infinitesimal (em Cálculo), e a Σ e Π maiúsculos para sinais de somatória/[o](#) e produtória/[o](#), respectivamente. Os símbolos π (3,141 592...), e (2,718 281..., base de logaritmos naturais), i (raiz quadrada de menos um), etc. são sempre romanos, tal como são os símbolos usados para designar funções, por exemplo, \log (\lg para \log_{10} , \ln para \log_e , ou \lg para \log_2), \exp , \sin , \cos , \tan , erf , **div**, **grad**, **rot**, etc. Os operadores **grad** e **rot** e os símbolos correspondentes ∇ para **grad**, $\nabla \times$ para **rot**, e $\nabla \cdot$ para **div** são impressos em negrito para indicar o caráter de vetor ou tensor que se segue, de acordo com [5.k]. Algumas destas letras são às vezes também usadas para representar grandezas físicas, *e.g.*, e para carga elementar; então é claro que devem ser itálicas, para se distinguirem do correspondente símbolo matemático.

Exemplos $\Delta H = H(\text{final}) - H(\text{initial})$; (dp/dt) usado para a velocidade de variação da pressão; δx usado para denotar uma variação infinitesimal de x . Porém, para um oscilador linear amortecido, a amplitude F como uma função do tempo t poderia ser expressa pela equação $F = F_0 \exp(-\delta t) \sin(\omega t)$, onde δ é o coeficiente de decaimento (unidade SI: Np/s) e ω é a frequência angular (unidade SI: rad/s). Note o uso de fonte romana δ para o operador numa variação infinitesimal de x , δx , porém itálica δ para o coeficiente de decaimento no produto δt . Note que os produtos δt e ωt são ambos adimensionais, mas são descritos tendo a unidade neper ($\text{Np} = 1$) e radiano ($\text{rad} = 1$), respectivamente.

8. As constantes físicas fundamentais são sempre consideradas como grandezas sujeitas a medida (apesar de não serem consideradas como sendo variáveis) e devem consequentemente ser sempre escritas em itálico. Às vezes, constantes físicas fundamentais são usadas como se fossem unidades, mas continuam a ser escritas em itálico. Um exemplo é a energia de Hartree (ou hartree), E_h (vide Secção 3.9.1, p. 99). No entanto, o elétron-volt (*Port.*: eletrão-volt), eV, o dalton, Da, ou a unidade de massa atômica unificada, u, e a unidade astronómica (*Port.*: astronómica), ua, foram reconhecidos como unidades pela Comissão Internacional de Pesos e Medidas (CIPM) do BIPM e, consequentemente, são-lhe atribuídos símbolos romanos.

Exemplos c_0 para a velocidade da luz no vácuo, m_e para a massa do elétron, h para a constante de Planck, N_A ou L para a constante de Avogadro, e para a carga elementar, a_0 para o raio de Bohr, etc.

$$\text{O elétron-volt } 1 \text{ eV} = e \cdot 1 \text{ V} = 1,602\,176\,6208(98) \times 10^{-19} \text{ J.}$$

9. Letras gregas são usadas em nomenclatura sistemática orgânica, inorgânica, macromolecular e bioquímica. Devem ser romanas, visto que não são símbolos para grandezas físicas. Elas designam a posição de substituição nas cadeias laterais, conexão de átomo-ligante e modo ponte em compostos de coordenação, grupos terminais em nomes baseados em estrutura para macromoléculas, e estereoquímica em carboidratos e produtos naturais. Letras símbolos para elementos são itálicas quando são localizadores em nomes de compostos químicos que indicam conexões a heteroátomos, *e.g.*, O -, N -, S - e P -. O símbolo itálico H denota hidrogênio (*Port.*: hidrogénio) indicado ou adicionado (vide referência [15]).

Exemplos ácido α -etilciclopentanoacético

β -metil-4-propilciclohexanoetanol

tetracarbonil(η^4 -2-metilidenopropano-1,3-diil)cromo

α -(triclorometil)- ω -clorópoli(1,4-fenilenometíleno)

α -D-glicopiranose

5 α -androstan-3 β -ol

N -metilbenzamida

hexanotioato de O -etila (*Port.*: O -etilo)

3 H -pirrol

naftalen-2(1 H)-ona

2 TABELAS DE GRANDEZAS FÍSICAS

As tabelas a seguir contêm os nomes e símbolos recomendados internacionalmente para as grandezas físicas mais usadas por químicos. Grandezas e símbolos adicionais podem ser encontrados em recomendações da IUPAP [4] e da ISO [5].

Embora os autores tenham liberdade para escolher quaisquer símbolos para as grandezas que discutem, desde que definam a sua notação e sigam as regras gerais indicadas no Capítulo 1, é sem dúvida melhor para a comunicação científica se todos seguirem uma notação padrão. Os símbolos a seguir foram escolhidos para estarem em conformidade com o seu uso atual e para minimizar a possibilidade de ocorrência de conflitos tanto quanto possível. Podem ser desejáveis, em situações particulares, pequenas variações em relação aos símbolos recomendados, por exemplo por adição ou modificação de subscritos ou sobrescritos, ou pelo uso alternativo de letra maiúscula ou minúscula. Dentro de uma área restrita, também pode ser possível simplificar a notação, por exemplo omitindo subscritos ou sobrescritos, sem introduzir ambiguidade. A notação adotada deve em qualquer caso ser sempre definida. Desvios maiores em relação aos símbolos recomendados devem ser explicitados com especial cuidado.

As tabelas estão dispostas por assunto. As cinco colunas de cada tabela indicam o nome da grandeza, o(s) símbolo(s) recomendado(s), uma breve definição, o símbolo para a unidade SI coerente (sem prefixos de múltiplos ou submúltiplos, vide Secção 3.6, p. 95) e referência(s) a notas explicativas. Quando dois ou mais símbolos são recomendados, são usadas vírgulas para separar símbolos igualmente aceitáveis, enquanto símbolos de escolha secundária aparecem entre parênteses. Um ponto e vírgula é usado para separar símbolos de grandezas ligeiramente diferentes. As definições são dadas principalmente para fins de identificação e nem sempre são completas; devem ser consideradas como relações úteis em vez de definições formais. Para algumas das grandezas listadas neste capítulo, as definições dadas em vários documentos da IUPAC estão compiladas em [16]. Definições úteis de grandezas físicas na Físico-Química Orgânica podem ser encontradas em [17] e na Química de Polímeros em [18]. Para grandezas adimensionais, um 1 é introduzido na coluna da unidade SI (vide Secção 3.10, p. 102). Informação extra é fornecida em notas explicativas e em textos inseridos entre as tabelas, conforme apropriado. Outros símbolos usados são definidos dentro da mesma tabela (não necessariamente na ordem em que aparecem) e nas notas explicativas.

2.1 Espaço e tempo

Os nomes e símbolos aqui recomendados estão de acordo com os recomendados pela IUPAP [4] e pela ISO [5.b].

Nome	Símbolos	Definição	Unidade SI	Notas
coordenadas espaciais cartesianas	$x; y; z$		m	
coordenadas cilíndricas	$\rho; \vartheta; z$		m, 1, m	
coordenadas polares esféricicas	$r; \vartheta; \varphi$		m, 1, 1	
coordenadas generalizadas	q, q_i		(varia)	
vetor posição	\mathbf{r}	$\mathbf{r} = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z$	m	
comprimento	l		m	
símbolos especiais:				
altura	h			
largura	b			
espessura	d, δ			
distância	d			
raio	r			
diâmetro	d			
comprimento do percurso	s			
comprimento do arco	s			
área	A, A_s, S		m^2	1
volume	$V, (v)$		m^3	
ângulo plano	$\alpha, \beta, \gamma, \vartheta, \varphi, \dots$	$\alpha = s/r$	rad, 1	2
ângulo sólido	$\Omega, (\omega)$	$\Omega = A/r^2$	sr, 1	2
tempo, duração	t		s	
período	T	$T = t/N$	s	3
frequência	ν, f	$\nu = 1/T$	Hz, s^{-1}	
frequência angular	ω	$\omega = 2\pi\nu$	$\text{rad s}^{-1}, \text{s}^{-1}$	2, 4
intervalo de tempo	τ, T	$\tau = \Delta t /\ln x $	s	
característico, tempo de relaxação, constante de tempo				
velocidade angular	ω	$\omega = d\varphi/dt$	$\text{rad s}^{-1}, \text{s}^{-1}$	2, 5
vetor velocidade	$\mathbf{v}, \mathbf{u}, \mathbf{w}, \mathbf{c}, \dot{\mathbf{r}}$	$\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$	m s^{-1}	
velocidade	v, u, w, c	$v = \mathbf{v} $	m s^{-1}	6
aceleração	\mathbf{a}	$\mathbf{a} = d\mathbf{v}/dt$	m s^{-2}	7

(1) Uma área infinitesimal pode ser vista como um vetor $\mathbf{e}_n dA$, onde \mathbf{e}_n é o vetor unitário normal ao plano.

(2) As unidades radiano (rad) e esferorradiano (*Port.: estereorradiano ou esterradiano*) (sr) para o ângulo plano e o ângulo sólido são derivadas. Uma vez que são de dimensão unitária (isto é, adimensionais), se apropriado podem ser incluídas em expressões de unidades SI derivadas, ou omitidas se, neste modo, não houver perda de clareza ou significado.

(3) N é o número de eventos idênticos (periódicos) durante o tempo t .

(4) A unidade Hz não deve ser usada para frequência angular.

(5) A velocidade angular pode ser tratada como um vetor, $\boldsymbol{\omega}$, perpendicular ao plano de rotação definido pela expressão $\mathbf{v} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}$.

(6) É comum o uso do símbolo c para as velocidades da luz e do som.

(7) O símbolo g é usado para a aceleração da gravidade.

2.2 Mecânica Clássica

Os nomes e símbolos aqui recomendados estão de acordo com os recomendados pela IUPAP [4] e pela ISO [5.c]. Grandezas e símbolos adicionais usados em Acústica podem ser encontrados em [4,5.g].

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
massa	m		kg	
massa reduzida	μ	$\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$	kg	
densidade, densidade de massa	ρ	$\rho = m/V$	kg m^{-3}	
densidade relativa	d	$d = \rho/\rho^\ominus$	1	1
densidade superficial (ou de superfície)	ρ_A, ρ_S	$\rho_A = m/A$	kg m^{-2}	
volume específico	v	$v = V/m = 1/\rho$	$\text{m}^3 \text{ kg}^{-1}$	
momento	\mathbf{p}	$\mathbf{p} = mv$	kg m s^{-1}	
momento angular	\mathbf{L}	$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$	J s	2
momento de inércia	I, J	$I = \sum_i m_i r_i^2$	kg m^2	3
força	\mathbf{F}	$\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt = m\mathbf{a}$	N	
momento de força, torque	$\mathbf{M}, (\mathbf{T})$	$\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}$	N m	
energia	E		J	
energia potencial	E_p, V, Φ	$E_p = - \int \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r}$	J	4
energia cinética	E_c, T, K	$E_c = (1/2)mv^2$	J	
trabalho	W, A, w	$W = \int \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r}$	J	
potência	P	$P = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} = dW/dt$	W	
coordenada generalizada	q		(varia)	
momento generalizado	p		(varia)	
função de Lagrange	L	$L(q, \dot{q}) = T(q, \dot{q}) - V(q)$	J	
função de Hamilton	H	$H(q, p) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q})$	J	
ação	S	$S = \int L dt$	J s	5
pressão	$p, (P)$	$p = F/A$	$\text{Pa}, \text{N m}^{-2}$	
tensão superficial	γ, σ	$\gamma = dW/dA$	$\text{N m}^{-1}, \text{J m}^{-2}$	

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

(2) No caso da Espectroscopia Atômica e Molecular, são geralmente utilizados outros símbolos (vide Secção 2.6, p. 27).

(3) Em geral \mathbf{I} é uma grandeza tensorial: $I_{\alpha\alpha} = \sum_i m_i (\beta_i^2 + \gamma_i^2)$, e $I_{\alpha\beta} = -\sum_i m_i \alpha_i \beta_i$ se $\alpha \neq \beta$, onde α, β, γ é uma permutação de x, y, z . No caso de uma distribuição contínua de massa, as somas são substituídas por integrais.

(4) Estritamente, apenas as diferenças de energia potencial têm significado físico. Consequentemente, a/o integral deve ser interpretada/o como uma/um integral definida/o, por exemplo

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

ou com infinito como limite superior

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

(5) Ação é a/o integral sobre o tempo da função de Lagrange L , que é equivalente a $\int pdq - \int Hdt$ (vide [19]).

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Definição</i>	<i>Unidade SI</i>	<i>Notas</i>
peso	$G, (W, P)$	$G = mg$	N	
constante gravitacional	G	$F = Gm_1m_2/r^2$	$N\ m^2\ kg^{-2}$	
tensão normal	σ	$\sigma = F/A$	Pa	6
tensão de cisalhamento	τ	$\tau = F/A$	Pa	6
tensão linear, alongamento relativo	ε, e	$\varepsilon = \Delta l/l$	1	
módulo de elasticidade, módulo de Young	E	$E = \sigma/\varepsilon$	Pa	6
deformação específica	γ	$\gamma = \Delta x/d$	1	6, 7
módulo de cisalhamento, módulo de Coulomb	G	$G = \tau/\gamma$	Pa	6
tensão volumétrica	ϑ	$\vartheta = \Delta V/V_0$	1	6
módulo volumétrico, módulo de compressibilidade	K	$K = -V_0\ (dp/dV)$	Pa	6
viscosidade, viscosidade dinâmica	$\eta, (\mu)$	$\tau_{xz} = \eta\ (dv_x/dz)$	Pa s	
fluidez	φ	$\varphi = 1/\eta$	$m\ kg^{-1}\ s$	
viscosidade cinemática	ν	$\nu = \eta/\rho$	$m^2\ s^{-1}$	
coeficiente de atração dinâmico	$\mu, (f)$	$F_{atr} = \mu F_{norm}$	1	
fluxo de energia sonora	P, P_a	$P = dE/dt$	W	
coeficientes sonoros, de reflexão	ρ	$\rho = P_r/P_0$	1	8
de absorção	$\alpha_a, (\alpha)$	$\alpha_a = 1 - \rho$	1	9
de transmissão	τ	$\tau = P_{tr}/P_0$	1	8
de dissipação	δ	$\delta = \alpha_a - \tau$	1	

(6) Em geral estas podem ser grandezas tensoriais.

(7) d é a distância entre as camadas deslocadas por um Δx .

(8) P_0 é o fluxo de energia acústica incidente, P_r o fluxo refletido e P_{tr} o fluxo transmitido.

(9) Esta definição é específica para a Acústica e é diferente da usada com radiação, onde o coeficiente de absorção corresponde ao coeficiente de dissipação sonora.

2.3 Eletricidade e Magnetismo

Os nomes e símbolos aqui recomendados estão de acordo com os recomendados pela IUPAP [4] e pela ISO [5.e].

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
corrente elétrica	I, i		A	1
densidade de corrente elétrica	j, \mathbf{J}	$I = \int j \cdot e_n dA$	A m ⁻²	2
carga elétrica, quantidade de eletricidade	Q	$Q = \int I dt$	C	1
densidade de carga	ρ	$\rho = Q/V$	C m ⁻³	
densidade de carga superficial	σ	$\sigma = Q/A$	C m ⁻²	
potencial elétrico	V, ϕ	$V = dW/dQ$	V, J C ⁻¹	
diferença de potencial elétrico, tensão elétrica	$U, \Delta V, \Delta\phi$	$U = V_2 - V_1$	V	
força eletromotriz	$E,$ $(E_{\text{mf}}, E_{\text{MK}})$	$E = \oint (\mathbf{F}/Q) \cdot d\mathbf{r}$	V	3
intensidade do campo elétrico	\mathbf{E}	$\mathbf{E} = \mathbf{F}/Q = -\nabla V$	V m ⁻¹	
fluxo elétrico	Ψ	$\Psi = \int \mathbf{D} \cdot e_n dA$	C	2
deslocamento elétrico	\mathbf{D}	$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$	C m ⁻²	
capacitância	C	$C = Q/U$	F, C V ⁻¹	
permissividade (Port.: permitividade)	ϵ	$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$	F m ⁻¹	4
constante elétrica, permissividade do vácuo	ϵ_0	$\epsilon_0 = \mu_0^{-1} c_0^{-2}$	F m ⁻¹	5
permissividade relativa	ϵ_r	$\epsilon_r = \epsilon/\epsilon_0$	1	6
polarização dielétrica, polarização elétrica (momento dipolar elétrico por unidade de volume)	\mathbf{P}	$\mathbf{P} = \mathbf{D} - \epsilon_0 \mathbf{E}$	C m ⁻²	
susceptibilidade elétrica	χ_e	$\chi_e = \epsilon_r - 1$	1	
1 ^a hipersusceptibilidade	$\chi_e^{(2)}$	$\chi_e^{(2)} = \epsilon_0^{-1} \times (\partial^2 P / \partial E^2)$	C m J ⁻¹ , m V ⁻¹	7
2 ^a hipersusceptibilidade	$\chi_e^{(3)}$	$\chi_e^{(3)} = \epsilon_0^{-1} \times (\partial^3 P / \partial E^3)$	C ² m ² J ⁻² , m ² V ⁻²	7

(1) A corrente elétrica I é uma grandeza de base no SIG.

(2) $e_n dA$ é um vetor elemento de área (vide Secção 2.1, nota 1, p. 13)

(3) O nome força eletromotriz e o símbolo fem já não são recomendados, pois uma diferença de potencial elétrico não é uma força (vide Secção 2.13, nota 14, p. 75).

(4) ϵ pode ser um tensor de segunda ordem.

(5) c_0 é a velocidade da luz no vácuo.

(6) No passado, esta grandeza era designada como constante dielétrica.

(7) As hipersusceptibilidades são os coeficientes dos termos não lineares na expansão da magnitude P da polarização dielétrica \mathbf{P} em potências da intensidade do campo elétrico \mathbf{E} , bastante relacionada com a expansão do vetor momento dipolar descrita na Secção 2.5, nota 17, p. 26. Em meios isotrópicos, a expansão da componente i da polarização dielétrica é dada por

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

onde E_i é a i -ésima componente da intensidade do campo elétrico e $\chi_e^{(1)}$ é a susceptibilidade elétrica usual χ_e , igual a $\epsilon_r - 1$ na ausência de termos superiores. Em meios anisotrópicos, $\chi_e^{(1)}$, $\chi_e^{(2)}$ e

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
momento dipolar elétrico	$\mathbf{p}, \boldsymbol{\mu}$	$\mathbf{p} = \sum_i Q_i \mathbf{r}_i$	C m	8
densidade de fluxo magnético, indução magnética	\mathbf{B}	$\mathbf{F} = Q \mathbf{v} \times \mathbf{B}$	T	9
fluxo magnético	Φ	$\Phi = \int \mathbf{B} \cdot \mathbf{e}_n \, dA$	Wb	2
intensidade do campo magnético, intensidade do campo de magnetização	\mathbf{H}	$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j}$	A m ⁻¹	
permeabilidade	μ	$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$	N A ⁻² , H m ⁻¹	10
constante magnética, permeabilidade do vácuo	μ_0	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ H m ⁻¹	H m ⁻¹	
permeabilidade relativa	μ_r	$\mu_r = \mu/\mu_0$	1	
magnetização (momento dipolar magnético por unidade de volume)	\mathbf{M}	$\mathbf{M} = \mathbf{B}/\mu_0 - \mathbf{H}$	A m ⁻¹	
susceptibilidade magnética	$\chi, \kappa, (\chi_m)$	$\chi = \mu_r - 1$	1	11
susceptibilidade magnética molar	χ_m	$\chi_m = V_m \chi$	m ³ mol ⁻¹	
momento dipolar magnético	$\mathbf{m}, \boldsymbol{\mu}$	$E = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$	A m ² , J T ⁻¹	
resistência elétrica	R	$R = U/I$	Ω	12
condutância	G	$G = 1/R$	S	12
ângulo de perda	δ	$\delta = \varphi_U - \varphi_I$	rad	13
reatância (<i>Port.</i> : reactância)	X	$X = (U/I) \operatorname{sen} \delta$	Ω	
impedância, (impedância complexa)	Z	$Z = R + iX$	Ω	
admitância, (admitância complexa)	Y	$Y = 1/Z$	S	
susceptância	B	$Y = G + iB$	S	
resistividade	ρ	$\mathbf{E} = \rho \mathbf{j}$	Ω m	14

(7) (continuação) $\chi_e^{(3)}$ são tensores de ordem 2, 3 e 4. Para um meio isotrópico (tal como um líquido), ou para um cristal com uma célula unitária centrossimétrica, $\chi_e^{(2)}$ é zero por simetria. Estas grandezas são propriedades macroscópicas e caracterizam um meio dielétrico da mesma forma que as grandezas microscópicas polarizabilidade (α) e hiperpolarizabilidades (β, γ) caracterizam uma molécula. Para um meio dielétrico isotrópico, saturado, homogêneo (*Port.*: homogéneo) de volume molar V_m tem-se que $\alpha_m = \epsilon_0 \chi_e V_m$, onde $\alpha_m = N_A \alpha$ é a polarizabilidade molar (vide Secção 2.5, nota 17, p. 26, bem como a Secção 2.7.2, p. 44).

(8) Quando um dipolo é formado por duas cargas pontuais Q e $-Q$ separadas por uma distância r , é suposto que a direção do vetor do dipolo aponta da carga negativa para a positiva. A convenção oposta é às vezes utilizada, mas o seu uso deve ser desencorajado. O momento dipolar de um íon (*Port.*: ião) depende da escolha da origem.

(9) Esta grandeza não deve ser designada como “campo magnético”.

(10) Em materiais anisotrópicos, μ é um tensor de segunda ordem.

(11) Às vezes, o símbolo χ_m é utilizado para a susceptibilidade magnética, mas deve ser reservado para indicar a susceptibilidade magnética molar.

(12) Num material com reatância $R = (U/I) \cos \delta$ e $G = R/(R^2 + X^2)$.

(13) φ_I and φ_U são as fases da corrente e da diferença de potencial.

(14) Em materiais anisotrópicos, esta grandeza é um tensor.

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Definição</i>	<i>Unidade SI</i>	<i>Notas</i>
condutividade	κ, γ, σ	$\mathbf{j} = \kappa \mathbf{E}$	S m^{-1}	14, 15
autoindutância	L	$E = -L(\text{d}I/\text{d}t)$	$\text{H}, \text{V s A}^{-1}$	
indutância mútua	M, L_{12}	$E_1 = -L_{12}(\text{d}I_2/\text{d}t)$	$\text{H}, \text{V s A}^{-1}$	
potencial vetor magnético	\mathbf{A}	$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$	Wb m^{-1}	
vetor de Poynting	\mathbf{S}	$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$	W m^{-2}	16

(15) A ISO lista somente γ e σ , mas não κ .

(16) Esta grandeza também é conhecida como vetor de Poynting-Umov.

2.4 Mecânica Quântica e Química Quântica

Os nomes e símbolos das grandezas usadas em Mecânica Quântica aqui recomendados estão de acordo com os recomendados pela IUPAP [4]. Os nomes e símbolos das grandezas utilizadas essencialmente em Química Quântica foram escolhidos considerando a prática corrente nesta área. Orientações para a apresentação de escolhas metodológicas em publicações de resultados computacionais foram apresentadas [20]. Uma lista de siglas usadas em Química Teórica foi publicada pela IUPAC [21]; vide também Capítulo 9, p. 161.

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
operador de momento	$\hat{\mathbf{p}}$	$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$	J s m^{-1}	1
operador de energia cinética	\hat{T}	$\hat{T} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2$	J	1
operador hamiltoniano, hamiltoniano	\hat{H}	$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$	J	1
função de onda, função de estado	Ψ, ψ, ϕ	$\hat{H}\psi = E\psi$	$(\text{m}^{-3/2})$	2, 3
função de onda hidrogenóide	$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$	$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$	$(\text{m}^{-3/2})$	3
função harmônica (Port.: harmónica) esférica	$Y_{lm}(\theta, \phi)$	$Y_{lm} = N_{l m }P_l^{ m }(\cos \theta)e^{im\phi}$	1	4
densidade de probabilidade	P	$P = \psi^*\psi$	(m^{-3})	3, 5
densidade de carga eletrônica	ρ	$\rho = -eP$	(C m^{-3})	3, 5, 6
densidade de corrente de probabilidade, fluxo de probabilidade	\mathbf{S}	$\mathbf{S} = -(i\hbar/2m) \times (\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$	$(\text{m}^{-2}\text{s}^{-1})$	3
densidade de corrente de elétrons	\mathbf{j}	$\mathbf{j} = -e \mathbf{S}$	(A m^{-2})	3, 6
elemento de integração	$d\tau$	$d\tau = dx dy dz$	(varia)	
elemento da matriz do operador \hat{A}	$A_{ij}, \langle i A j \rangle$	$A_{ij} = \int \psi_i^* \hat{A} \psi_j d\tau$	(varia)	7
valor esperado (ou expectável) $\langle A \rangle$, \overline{A} do operador \hat{A}		$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau$	(varia)	7

(1) O acento circunflexo, $\hat{\cdot}$, serve para distinguir um operador de uma grandeza algébrica. Essa definição aplica-se a uma representação de coordenadas, em que ∇ representa o operador nabla (vide Secção 4.2, p. 111).

(2) ψ maiúsculo e minúsculo são usados comumente para a função $\Psi(x, t)$ dependente do tempo e a função amplitude $\psi(x)$, respectivamente. Assim, para um estado estacionário, $\Psi(x, t) = \psi(x)\exp(-iEt/\hbar)$.

(3) No caso da função de onda normalizada de uma única partícula no espaço tridimensional, a unidade SI é dada entre parênteses. Em Química Quântica, no entanto, os resultados são comumente expressos em termos de unidades atômicas (vide Secção 3.9.2, p. 100 e Secção 7.3 (iv), p. 151, bem como a referência [22]). Se distâncias, energias, momentos angulares, cargas e massas são expressos em razões adimensionais r/a_0 , E/E_h etc., então todas as grandezas são adimensionais.

(4) $P_l^{|m|}$ representa a função de Legendre associada de grau l e ordem $|m|$. $N_{l|m|}$ é um fator de normalização.

(5) ψ^* é o complexo conjugado de ψ . No caso de uma função de onda antissimetrizada de n elétrons $\Psi(r_1, \dots, r_n)$, a densidade de probabilidade total dos elétrons é $\int_2 \cdots \int_n \Psi^* \Psi d\tau_2 \cdots d\tau_n$, em que a integração inclui as coordenadas de todos os elétrons menos um.

(6) $-e$ é a carga do elétron.

(7) A unidade é igual à da grandeza física A que o operador representa.

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
conjugado hermitiano do operador \hat{A}	\hat{A}^\dagger	$(\hat{A}^\dagger)_{ij} = (A_{ji})^*$	(varia)	7
comutador de \hat{A} e \hat{B}	$[\hat{A}, \hat{B}]$, $[\hat{A}, \hat{B}]_-$	$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$	(varia)	8
anticomutador de \hat{A} e \hat{B}	$[\hat{A}, \hat{B}]_+$	$[\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$	(varia)	8
operadores de momento angular	vide ESPECTROSCOPIA, Secção 2.6.1, p. 33			
função de onda de spin	$\alpha; \beta$		1	9
Teoria dos/das orbitais moleculares de Hückel (HMO)				
função de base do/da orbital atômico/a	χ_r		$m^{-3/2}$	3
orbital molecular	ϕ_i	$\phi_i = \sum_r \chi_r c_{ri}$	$m^{-3/2}$	3, 10
integral de Coulomb	H_{rr}, α_r	$H_{rr} = \int \chi_r^* \hat{H} \chi_r d\tau$	J	3, 10, 11
integral de ressonância	H_{rs}, β_{rs}	$H_{rs} = \int \chi_r^* \hat{H} \chi_s d\tau$	J	3, 10, 12
parâmetro de energia	x	$-x = (\alpha - E)/\beta$	1	13
integral de sobreposição (recobrimento)	S_{rs}, S	$S_{rs} = \int \chi_r^* \chi_s d\tau$	1	10
ordem de carga	q_r	$q_r = \sum_{i=1}^n b_i c_{ri}^2$	1	14, 15
ordem de ligação	p_{rs}	$p_{rs} = \sum_{i=1}^n b_i c_{ri} c_{si}$	1	15, 16

(8) A unidade é igual à do produto das grandezas físicas A e B .

(9) As funções de onda de spin de um elétron isolado, α e β , são definidas pelos elementos da matriz da componente z do momento angular de spin, \hat{s}_z , pelas relações $\langle \alpha | \hat{s}_z | \alpha \rangle = +(1/2)$, $\langle \beta | \hat{s}_z | \beta \rangle = -(1/2)$, $\langle \beta | \hat{s}_z | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{s}_z | \beta \rangle = 0$ em unidades de \hbar . As funções de onda de spin para um átomo com muitos elétrons são representadas pelas letras gregas α, β, γ etc., de acordo com o valor de $\sum m_s$, do maior para o menor.

(10) \hat{H} é um hamiltoniano efetivo para um único elétron, i e j indicam os/as orbitais moleculares, e r e s indicam os/as orbitais atômicos/as. Na teoria dos/das orbitais moleculares de Hückel, H_{rs} é diferente de zero somente para pares de átomos ligados r e s , e todos os S_{rs} são iguais a zero para $r \neq s$.

(11) Note que o nome “integral de Coulomb” tem um significado diferente na teoria dos/das orbitais moleculares de Hückel (onde se refere à energia do/da orbital χ_r no campo dos núcleos) e na teoria de Hartree-Fock discutida adiante (onde se refere à/ao integral de repulsão entre dois elétrons).

(12) Essa expressão descreve uma interação ligante entre os/as orbitais atômicos/as r e s . No caso de uma interação antiligante, a/o integral de ressonância correspondente é dada/o pelo valor negativo da/do integral de ressonância da interação ligante.

(13) Na aplicação mais simples da teoria de Hückel aos elétrons π de hidrocarbonetos conjugados planares, supõe-se que α é igual para todos os átomos de carbono, e que β é igual para todos os pares de átomos de carbono ligados. Pode-se, desta forma, escrever o determinante secular de Hückel em termos do parâmetro adimensional x .

(14) $-eq_r$ é a carga eletrônica do átomo r . q_r especifica a contribuição de todos os n elétrons π para a carga total do centro r , com $\sum q_r = n$.

(15) b_i refere-se ao número de elétrons que ocupam um/uma dado/a orbital, de energia ε_i . No caso de orbitais não degenerados/as, b_i pode tomar os valores 0, 1 ou 2.

(16) p_{rs} é a ordem de ligação entre os átomos r e s .

2.4.1 Teoria ab initio do campo autoconsistente de Hartree-Fock (ab initio SCF)

Os resultados em Química Quântica são usualmente expressos em unidades atômicas (vide Secção 3.9.1, p. 99, e Secção 7.3(iv), p. 151). Nas tabelas restantes desta secção, todos os comprimentos,

energias, massas, cargas e momentos angulares são expressos divididos por a_0 , E_h , m_e , e e \hbar , respectivamente. Por esta razão, todas as grandezas passam a ser adimensionais e, portanto, a coluna referente a unidades SI foi omitida.

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Definição</i>	<i>Notas</i>
orbital molecular	$\phi_i(\mu)$		17
spin-orbital molecular <i>(Port.: orbital-spin)</i>	$\phi_i(\mu)\alpha(\mu);$ $\phi_i(\mu)\beta(\mu)$		17
função de onda total	Ψ	$\Psi = (n!)^{-1/2} \ \phi_i(\mu)\ $	17, 18
hamiltoniano do cerne (caroço) de um único elétron	$\hat{H}_\mu^{\text{cerne}}$	$\hat{H}_\mu = -(1/2)\nabla_\mu^2 - \sum_A Z_A/r_{\mu A}$	17, 19
integrais de um elétron: valor esperado para o hamiltoniano do cerne (caroço)	H_{ii}	$H_{ii} = \int \phi_i^*(1)\hat{H}_1^{\text{cerne}}\phi_i(1)d\tau_1$	17, 19
integrais de repulsão de dois elétrons:			
integral de Coulomb	J_{ij}	$J_{ij} = \iint \phi_i^*(1)\phi_j^*(2)\frac{1}{r_{12}}\phi_i(1)\phi_j(2)d\tau_1 d\tau_2$	17, 20
integral de troca	K_{ij}	$K_{ij} = \iint \phi_i^*(1)\phi_j^*(2)\frac{1}{r_{12}}\phi_j(1)\phi_i(2)d\tau_1 d\tau_2$	17, 20
energia de orbital de um elétron	ε_i	$\varepsilon_i = H_{ii} + \sum_j (2J_{ij} - K_{ij})$	17, 21
energia eletrônica total	E	$E = 2\sum_i H_{ii} + \sum_i \sum_j (2J_{ij} - K_{ij})$ $= \sum_i (\varepsilon_i + H_{ii})$	17, 21, 22
operador de 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
operador de troca	\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
operador de Fock	\hat{F}	$\hat{F} = \hat{H}^{\text{cerne}} + \sum_i (2\hat{J}_i - \hat{K}_i)$	17, 21, 23

(17) Os índices i e j identificam os/as orbitais moleculares, e μ , ou os algarismos 1 e 2, identificam as coordenadas dos elétrons.

(18) As barras verticais duplas representam um produto antissimetrizado dos/das spins-orbitais moleculares $\phi_i\alpha$ e $\phi_i\beta$ (às vezes escritos/as como ϕ_i e $\bar{\phi}_i$). Para um sistema de camada fechada, Ψ seria um determinante de Slater normalizado. $(n!)^{-1/2}$ é o fator de normalização e n , o número de elétrons.

(19) Z_A é o número de prótons (número de carga) do núcleo A, e $r_{\mu A}$ é a distância entre o elétron μ e o núcleo A. H_{ii} é a energia de um elétron no/na orbital ϕ_i no campo do cerne (caroço).

(20) A/O integral de repulsão entre os elétrons é escrita/o usando-se várias notações abreviadas. Em $J_{ij} = \langle ij | ij \rangle$, o primeiro e o terceiro índices referem-se ao elétron 1, e o segundo e o quarto ao elétron 2. Em $J_{ij} = (i^*i | j^*j)$, os primeiros dois índices referem-se ao elétron 1, e os segundos dois índices ao elétron 2. Em geral as funções são reais e os asteriscos são omitidos. A/O integral de troca é escrita/o em várias notações abreviadas com a mesma convenção dos índices já descrita: $K_{ij} = \langle ij | ji \rangle$ ou $K_{ij} = (i^*j | j^*i)$.

2.4.2 Teoria SCF de Hartree-Fock-Roothaan usando orbitais moleculares expandidos/as como combinações lineares de funções de base de orbitais atômicos/as (teoria LCAO-MO)

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Definição</i>	<i>Notas</i>
função de base do/da orbital atômico/a	χ_r		24
orbital molecular	ϕ_i	$\phi_i = \sum_r \chi_r c_{ri}$	
elemento da matriz de sobreposição (recobrimento)	S_{rs}	$S_{rs} = \int \chi_r^* \chi_s d\tau, \quad \sum_{r,s} c_{ri}^* S_{rs} c_{sj} = \delta_{ij}$	
elemento da matriz de densidade	P_{rs}	$P_{rs} = 2 \sum_i^{\text{occ}} c_{ri}^* c_{si}$	25
integrais sobre as funções de base:			
integrais de um elétron	H_{rs}	$H_{rs} = \int \chi_r^*(1) \hat{H}_1 \chi_s(1) d\tau_1$	
integrais de dois elétrons ($rs tu$)		$(rs tu) = \iint \chi_r^*(1) \chi_s(1) \frac{1}{r_{12}} \chi_t^*(2) \chi_u(2) d\tau_1 d\tau_2$	26, 27
energia eletrônica total	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 da matriz do operador de Fock	F_{rs}	$F_{rs} = H_{rs} + \sum_t \sum_u P_{tu} [(rs tu) - (1/2)(ru ts)]$	25, 28

(Notas – continuação)

(21) Essas relações aplicam-se somente a sistemas de camadas fechadas e as somas estendem-se pelos/as orbitais moleculares ocupados/as.

(22) A soma sobre j inclui o termo com $j = i$, para o qual $J_{ii} = K_{ii}$, de modo que este termo, na soma, pode ser simplificado para dar $2J_{ii} - K_{ii} = J_{ii}$.

(23) As equações de Hartree-Fock são resumidas como $(\hat{F} - \varepsilon_j)\phi_j = 0$. Note que a definição do operador de Fock envolve todas as funções próprias ϕ_i através dos operadores de Coulomb e de troca, \hat{J}_i e \hat{K}_i .

(24) Os índices r e s identificam as funções de base. Em computações numéricas, as funções de base são orbitais do tipo Slater (STO) ou gaussianos (Port.: gaussianas) (GTO). Uma função de base STO em coordenadas polares esféricas tem a fórmula geral $\chi(r, \theta, \phi) = N r^{n-1} \exp(-\zeta_{nl} r) Y_{lm}(\theta, \phi)$, em que ζ_{nl} é um parâmetro de blindagem representando a carga efetiva do estado com números quânticos n e l . As funções GTO são usualmente expressas em coordenadas cartesianas, na forma $\chi(x, y, z) = N x^a y^b z^c \exp(-\alpha r^2)$. São usadas frequentemente combinações lineares dessas funções com variação dos expoentes α de modo a modelar um/uma STO. N é um fator de normalização.

(25) Para espécies com camada fechada com dois elétrons por orbital ocupado/a. A soma estende-se por todos os/as orbitais moleculares ocupados/as. P_{rs} pode também ser designado como ordem de ligação entre os átomos r e s .

(26) A notação abreviada para integrais de dois elétrons sobre as funções de base, $(rs|tu)$, baseia-se na mesma convenção descrita na nota 20.

(27) A/O integral de dois elétrons é expressa/o em termos de integrais sobre o espaço das funções de base dos/das orbitais atômicos/as. Os elementos da matriz H_{ii} , J_{ij} e K_{ij} podem ser expressos de modo semelhante em termos de integrais sobre o espaço das funções de base dos/das orbitais atômicos/as de acordo com as seguintes equações:

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

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

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

(28) As equações SCF de Hartree-Fock-Roothaan, expressas em termos dos elementos da matriz do operador de Fock, F_{rs} , e os elementos da matriz de sobreposição (recobrimento), S_{rs} , tomam a forma:

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

2.5 Átomos e moléculas

Os nomes e símbolos aqui recomendados estão de acordo com os recomendados pela IUPAP [4] e pela ISO [5.i]. Outras grandezas e símbolos usados em Física Atômica, Nuclear e de Plasma podem ser encontrados em [4,5.j].

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
número de núcleons, número de massa	A		1	
número de prótons, número atômico	Z		1	
número de nêutrons	N	$N = A - Z$	1	
massa do elétron	m_e		kg	1, 2
massa do átomo, massa atômica	m_a, m		kg	
constante de massa atômica	m_u	$m_u = m_a(^{12}\text{C})/12$	kg	1, 3
excesso de massa	Δ	$\Delta = m_a - Am_u$	kg	
carga elementar	e	carga do próton	C	2
constante de Planck	h		J s	
constante de Planck dividida por 2π	\hbar	$\hbar = h/2\pi$	J s	2
raio de Bohr	a_0	$a_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/m_e e^2$	m	2
energia de Hartree	E_h	$E_h = \hbar^2/m_e a_0^2$	J	2
constante de Rydberg	R_∞	$R_\infty = E_h/2hc$	m^{-1}	
constante de estrutura fina	α	$\alpha = e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar c$	1	
energia de ionização	E_i, I		J	4
afinidade eletrônica	E_{ae}, A		J	4
eletronegatividade	χ	$\chi = (1/2)(E_i + E_{ae})$	J	5
energia de dissociação	E_d, D		J	
a partir do estado fundamental	D_0		J	6
a partir do mínimo de potencial	D_e		J	6

(1) Símbolos análogos são usados para outras partículas com subscritos: p para próton, n para nêutron, a para átomo, N para núcleo, etc.

(2) Essa grandeza também é usada como uma unidade atômica (vide Secção 3.9.1, p. 99, e Secção 7.3 (iv), p. 151).

(3) m_u é igual à unidade de massa atômica unificada, com o símbolo u, isto é, $m_u = 1$ u (vide Secção 3.7, p. 96). O nome dalton, com o símbolo Da, é usado como um nome alternativo para a unidade de massa atômica unificada [23].

(4) A energia de ionização é frequentemente chamada de potencial de ionização (I_p). A afinidade eletrônica é a energia necessária para retirar um elétron de um íon negativo.

(5) O conceito de eletronegatividade foi introduzido por L. Pauling como a capacidade de um átomo numa molécula atrair elétrons. Há várias maneiras de definir essa grandeza [24]. A dada na tabela tem um significado claro de energia e é devida a R. S. Mulliken. A escala mais usada, devida a Pauling, baseia-se em energias de dissociação de ligação E_d em eV e é relativa, no sentido de que os valores são adimensionais e que só diferenças de eletronegatividade são definidas. Para os átomos A e B

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

em que χ_r representa a eletronegatividade definida por Pauling. A escala é escolhida de modo que a eletronegatividade do hidrogênio seja $\chi_{r,H} = 2,1$. Há dificuldades na escolha do sinal da raiz quadrada, que determina o sinal de $\chi_{r,A} - \chi_{r,B}$. Pauling fez essa escolha intuitivamente.

(6) Os símbolos D_0 e D_e são usados para as energias de dissociação de moléculas diatônicas (Port.: diatônicas) e poliatônicas (Port.: poliatônicas).

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
número quântico principal (átomo hidrogenóide)	n	$E = hcZ^2R_\infty/n^2$	1	7
números quânticos do momento angular momento dipolar magnético de uma molécula	\mathbf{m}, μ	vide ESPECTROSCOPIA, Secção 2.6 $E_p = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$	J T^{-1}	8
magnetizabilidade de uma molécula magnéton (<i>Port.</i> : magnetão) de Bohr	ξ μ_B	$\mathbf{m} = \xi \mathbf{B}$ $\mu_B = e\hbar/2m_e$	J T^{-2} J T^{-1}	
magnéton nuclear razão giromagnética, (razão magnetogérica)	μ_N γ	$\mu_N = e\hbar/2m_p = (m_e/m_p)\mu_B$ $\gamma_e = -g_e\mu_B/\hbar$	J T^{-1} $\text{s}^{-1} \text{T}^{-1}$	9
fator g	g, g_e	$g_e = -\gamma_e(2m_e/e)$	1	10
fator g nuclear	g_N	$g_N = \gamma_N(2m_p/e)$	1	10
frequência angular de Larmor	ω_L	$\omega_L = -\gamma \mathbf{B}$	s^{-1}	11
frequência de Larmor	ν_L	$\nu_L = \omega_L/2\pi$	Hz	
tempo de relaxação, longitudinal	T_1		s	12
transversal	T_2		s	12
momento dipolar elétrico de uma molécula	\mathbf{p}, μ	$E_p = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}$	C m	13
momento quadrupolar de uma molécula	$\mathbf{Q}; \Theta$	$E_p = (1/2)\mathbf{Q} : \mathbf{V}''$ $= (1/3)\Theta : \mathbf{V}''$	C m^2	14

(7) Para um **elétron** num campo central de Coulomb de um núcleo infinitamente pesado com número **atómico** Z .

(8) Momentos magnéticos de partículas específicas podem ser representados por subscritos, por exemplo, μ_e , μ_p , μ_n para um **elétron**, um **próton** e um **nêutron**. Os valores tabelados referem-se habitualmente ao valor esperado máximo da componente z . Valores para núcleos estáveis são dados na Secção 6.3, p. 126.

(9) A razão giromagnética de um núcleo é $\gamma_N = g_N\mu_N/\hbar$

(10) Por razões históricas, $g_e > 0$. e é a carga elementar (positiva), portanto $\gamma_e < 0$. Para núcleos, γ_N e g_N têm o mesmo sinal. Uma convenção diferente de sinal para o fator g **eletrônico** é discutida em [25].

(11) Esta é uma grandeza vetorial com magnitude ω_L . Essa grandeza é, também, designada frequência circular de Larmor.

(12) Estas grandezas são usadas no contexto de efeitos de saturação em Espectroscopia, particularmente na Espectroscopia de Ressonância de Spin (vide Secção 26, p. 30–30).

(13) Vide Secção 2.6, nota 9, p. 28.

(14) O momento quadrupolar de uma molécula pode ser representado pelo tensor \mathbf{Q} , definido por uma/**um** integral sobre a densidade de carga ρ :

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

em que α e β representam x , y ou z , ou pelo tensor Θ de traço zero, definido por

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

\mathbf{V}'' é a segunda derivada do potencial **eletrônico**:

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

A contribuição para a energia potencial é dada por

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

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
momento quadrupolar de um núcleo	eQ	$eQ = 2 \langle \Theta_{zz} \rangle$	$C\ m^2$	15
tensor gradiente do campo elétrico	\mathbf{q}	$q_{\alpha\beta} = -\partial^2 V / \partial \alpha \partial \beta$	$V\ m^{-2}$	
tensor energia de interação quadrupolar polarizabilidade elétrica de uma molécula	χ	$\chi_{\alpha\beta} = eQ q_{\alpha\beta}$	J	16
1 ^a hiperpolarizabilidade	$\boldsymbol{\alpha}$	$\alpha_{ab} = \partial p_a / \partial E_b$	$C^2\ m^2\ J^{-1}$	17
2 ^a hiperpolarizabilidade	$\boldsymbol{\beta}$	$\beta_{abc} = \partial^2 p_a / \partial E_b \partial E_c$	$C^3\ m^3\ J^{-2}$	17
atividade (de uma substância radioativa)	$\boldsymbol{\gamma}$	$\gamma_{abcd} = \partial^3 p_a / \partial E_b \partial E_c \partial E_d$	$C^4\ m^4\ J^{-3}$	17
constante de (velocidade de) decaimento, constante de (velocidade de) de desintegração	A	$A = -dN_B / dt$	Bq	18
meia-vida	λ, k	$A = \lambda N_B$	s^{-1}	18
vida-média, tempo de vida	$t_{1/2}, T_{1/2}$	$N_B(t_{1/2}) = N_B(0)/2$	s	18, 19
largura de nível	τ	$\tau = 1/\lambda$	s	19
energia de desintegração	Γ	$\Gamma = \hbar/\tau$	J	
secção de choque	Q		J	
(Port.: secção reta ou eficaz)	σ		m^2	
carga eletrofraca de um núcleo	Q_W	$Q_W \approx Z(1 - 4\sin^2 \theta_W) / -N$	1	20

(15) Por convenção, os momentos de quadrupolos nucleares são definidos de modo diferente dos momentos de quadrupolos moleculares. Q tem a dimensão de uma área e e é a carga elementar. eQ é considerado como sendo duas vezes o valor esperado máximo do elemento zz do tensor (vide nota 14). Os valores de Q de alguns núcleos estão listados na Secção 6.3, p. 126.

(16) O tensor energia de interação de um quadrupolo nuclear χ é usualmente dado em MHz, correspondendo ao valor de eQq/h , embora h seja comumente omitido.

(17) A polarizabilidade $\boldsymbol{\alpha}$ e as hiperpolarizabilidades $\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}, \dots$ são os coeficientes da expansão do momento dipolar \mathbf{p} nas potências da intensidade do campo elétrico \mathbf{E} (vide Secção 2.3, nota 7, p. 16). A expansão da componente a é dada por

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

em que α_{ab} , β_{abc} e γ_{abcd} são os elementos dos tensores $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$ e $\boldsymbol{\gamma}$ de graus 2, 3 e 4, respectivamente. As componentes desses tensores são identificadas pelos subscritos $abc\dots$, como indicado nas definições, sendo que o primeiro índice a representa sempre a componente de p , e os índices subsequentes as componentes do campo elétrico. A polarizabilidade e as hiperpolarizabilidades têm propriedades de simetria. Assim, $\boldsymbol{\alpha}$ é habitualmente um tensor simétrico e todas as componentes de $\boldsymbol{\beta}$ são zero para uma molécula com centro de simetria, etc. Valores de polarizabilidade são normalmente citados como o valor $\alpha/4\pi\epsilon_0$, que é um volume. O valor é comumente expresso na unidade \AA^3 (\AA não deveria ser usado, vide Secção 2.6, nota 11, p. 29) ou na unidade a_0 (unidades atômicas, vide Secção 3.9.1, p. 99). Comentários semelhantes aplicam-se às hiperpolarizabilidades, com $\beta/(4\pi\epsilon_0)^2$ em unidades de $a_0^5 e^{-1}$ e $\gamma/(4\pi\epsilon_0)^3$ em unidades de $a_0^7 e^{-2}$, etc.

(18) N_B é o número de entidades B em decaimento (1 Bq = 1 s⁻¹, vide Secção 3.4, p. 93).

(19) Meias-vidas e vidas-médias são comumente dadas em anos (símbolo a), vide Secção 7.2, nota 4, p. 143. Para decaimentos exponenciais, $t_{1/2} = \tau \ln 2$.

(20) A carga eletrofraca de um núcleo é dada aproximadamente pelo número de **nêutrons** N e o número de **prótons** Z com o ângulo de mistura fraca θ_W (vide Capítulo 5, p. 115). É importante em cálculos de propriedades atômicas e moleculares que incluem interações nucleares fracas [26].

2.6 Espectroscopia

Esta secção foi consideravelmente ampliada em comparação com o manual original [1.a–1.c] e com a secção correspondente no documento da IUPAP [4]. Baseia-se nas recomendações da Comissão Conjunta para Espectroscopia da ICSU [27, 28] e nas práticas atuais nessa área científica, as quais estão bem representadas nos livros de Herzberg [29–31]. A Comissão de Estrutura Molecular e Espectroscopia da IUPAC também publicou recomendações que foram levadas em consideração [32–43].

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Definição</i>	<i>Unidade SI</i>	<i>Notas</i>
termo total	T	$T = E_{\text{tot}}/hc$	m^{-1}	1, 2
número de onda de transição	$\tilde{\nu}$	$\tilde{\nu} = T' - T''$	m^{-1}	1
frequência de transição	ν	$\nu = (E' - E'')/h$	Hz	
termo eletrônico	T_e	$T_e = E_e/hc$	m^{-1}	1, 2
termo vibracional	G	$G = E_{\text{vib}}/hc$	m^{-1}	1, 2
termo rotacional	F	$F = E_{\text{rot}}/hc$	m^{-1}	1, 2
constante de acoplamento spin-orbital	A	$T_{\text{so}} = A \langle \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \rangle$	m^{-1}	1, 3
momentos de inércia principais (ou momentos principais de inércia)	$I_A; I_B; I_C$	$I_A \leq I_B \leq I_C$	kg m^2	
constantes rotacionais, em número de onda	$\tilde{A}; \tilde{B}; \tilde{C}$	$\tilde{A} = h/8\pi^2 c I_A$	m^{-1}	1, 2
em frequência	$A; B; C$	$A = h/8\pi^2 I_A$	Hz	
defeito inercial	Δ	$\Delta = I_C - I_A - I_B$	kg m^2	
parâmetro de assimetria	κ	$\kappa = \frac{2B - A - C}{A - C}$	1	4
constantes de distorção centrífuga, redução S	$D_J; D_{JK}; D_K; d_1; d_2$		m^{-1}	5
redução A	$\Delta_J; \Delta_{JK}; \Delta_K; \delta_J; \delta_K$		m^{-1}	5

(1) Em Espectroscopia, quase sempre é usada a unidade cm^{-1} para a grandeza número de onda e os valores dos termos e os números de onda referem-se sempre ao inverso do comprimento de onda da radiação equivalente no vácuo. O símbolo c na definição E/hc refere-se à velocidade da luz no vácuo. Como “número de onda” não é um número, a ISO sugere o uso do termo “repetência” em paralelo com número de onda [5,6]. O uso da palavra “número de onda” no lugar da unidade cm^{-1} deve ser evitado.

(2) Às vezes, os valores de termos e constantes rotacionais são definidos em unidades de número de onda (*e.g.* $T = E/hc$) e, outras vezes, em unidades de frequência (*e.g.* $T = E/h$). Quando os símbolos forem os mesmos, é conveniente distinguir grandezas em número de onda com um til (*e.g.* $\tilde{\nu}, \tilde{T}, \tilde{A}, \tilde{B}, \tilde{C}$).

(3) $\hat{\mathbf{L}}$ e $\hat{\mathbf{S}}$ são operadores de orbitais eletrônicos/as e de spins eletrônicos, respectivamente.

(4) Os parâmetros de assimetria de Wang também são usados: para um rotor quase prolato, $b_p = (C - B) / (2A - B - C)$, e para um rotor quase oblato, $b_o = (A - B) / (2C - A - B)$.

(5) S e A referem-se às reduções simétrica e assimétrica do hamiltoniano rotacional, respectivamente; vide [44] para maiores detalhes sobre as várias representações possíveis da constante de distorção centrífuga.

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
número de onda de uma vibração harmônica	$\omega_e; \omega_r$		m^{-1}	6
constante de anarmonicidade vibracional	$\omega_e x_e; x_{rs}; g_{tt'}$		m^{-1}	6
números quânticos vibrationais	$v_r; l_t$		1	6
número de onda fundamental vibracional	$\tilde{\nu}_r, \tilde{\nu}_r^0, \nu_r$	$\tilde{\nu}_r = T(v_r = 1) - T(v_r = 0)$	m^{-1}	6
constante ζ de Coriolis	ζ_{rs}^α		1	7
números quânticos do momento angular		vide Secção 2.6.1, p. 33		
degenerescência, peso estatístico	g, d, β		1	8
momento dipolar elétrico de uma molécula	\mathbf{p}, μ	$E_p = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}$	C m	9

(6) Para uma molécula **diatômica**, $G(v) = \omega_e(v + \frac{1}{2}) - \omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 + \dots$. Para uma molécula **poliatômica**, os $3N - 6$ modos vibrationais ($3N - 5$, se linear) são rotulados pelos índices r, s, t, \dots , ou i, j, k, \dots . Em geral, a atribuição do índice r é feita de forma que ele cresça com o decréscimo do número de onda, espécie de simetria por espécie de simetria, iniciando-se com a espécie totalmente simétrica. O índice t é mantido para modos degenerados. A fórmula do termo vibracional é

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

Outra fórmula comum para o termo é definida em relação ao estado vibracional fundamental

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

sendo estas fórmulas comumente usadas como os elementos diagonais dos hamiltonianos vibrationais efetivos.

(7) Frequentemente as constantes de acoplamento de Coriolis $\xi_\alpha^{v'v}$, em unidade de cm^{-1} , são usadas como constantes hamiltonianas efetivas ($\alpha = x, y, z$). Para duas vibrações fundamentais com números de onda **harmônicos** ω_r e ω_s , estes estão relacionados com ζ_{rs}^α pela equação ($v_r = 1$ e $v_s = 1$)

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

onde \tilde{B}_α é a constante rotacional α . Uma equação similar é aplicável para B_α , se $\xi_\alpha^{v'v}$ for definida como uma grandeza com unidade de frequência.

(8) Usualmente, d é utilizado para a degenerescência vibracional, e β para a degenerescência de spin nuclear.

(9) E_p é a energia potencial de um dipolo com momento dipolar elétrico \mathbf{p} num campo elétrico de intensidade \mathbf{E} . Momentos dipolares moleculares são usualmente expressos na unidade fora do SI *debye*, sendo que $1 \text{ D} \approx 3,335 \times 10^{-30} \text{ C m}$. A unidade SI C m é inconveniente para expressar momentos dipolares moleculares, o que tem resultado no continuado uso do desaprovado *debye* (D). Uma alternativa conveniente é usar a unidade **atômica**, ea_0 . Outro modo de expressar o momento dipolar é citar os comprimentos dos dipolos elétricos, $l_p = p/e$, analogamente ao modo como as áreas do quadrupolo nuclear são citadas (vide Secção 2.5, notas 14 e 15, p. 25 e 26, e Secção 6.3, p. 126). Isto corresponde à distância entre duas cargas elementares do dipolo equivalente e fornece um quadro claro em relação às dimensões moleculares (vide também Secção 2.3, nota 8, p. 17).

Exemplos	Momento dipolar			Comprimento do dipolo
	SI	p/C m	ua	
HCl	$3,60 \times 10^{-30}$	1,08	0,425	l_p/pm
H ₂ O	$6,23 \times 10^{-30}$	1,87	0,736	22,5
NaCl	$3,00 \times 10^{-29}$	9,00	3,54	38,9
				187

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
momento dipolar de transição de uma molécula	\mathbf{M}, \mathbf{R}	$\mathbf{M} = \int \psi^* \mathbf{p} \psi'' d\tau$	C m	9, 10
distâncias interatômicas (Port.: interatómicas), de equilíbrio	r_e		m	
média no ponto zero do estado fundamental da estrutura por substituição	r_z		m	
coordenadas vibracionais, interna	r_0		m	
de simetria normal	r_s		m	
ponderada pela massa adimensional	$R_i, r_i, \theta_j, \text{etc.}$		$\text{kg}^{1/2} \text{ m}$	11
constantes de força vibracional,	S_j		1	
diatômica	Q_r			
poliatômica,	q_r			
coordenadas internas	f_{ij}	$f_{ij} = \partial^2 V / \partial r_i \partial r_j$	(varia)	
coordenadas de simetria	F_{ij}	$F_{ij} = \partial^2 V / \partial S_i \partial S_j$	(varia)	
coordenadas normais adimensionais	$\phi_{rst\dots}, k_{rst\dots}, C_{rst\dots}$		m^{-1}	14
ressonância eletrônica de spin (RES), ressonância paramagnética eletrônica (RPE):		$f = \partial^2 V / \partial r^2$	$\text{J m}^{-2}, \text{N m}^{-1}$	11, 13
razão giromagnética	γ	$\gamma = \mu / \hbar \sqrt{S(S+1)}$	$\text{s}^{-1} \text{T}^{-1}$	15
fator g	g	$h\nu = g\mu_B B$	1	16

(10) Para grandezas que descrevem intensidades de linha e de banda, vide Secção 2.7, p. 38–45.

(11) Distâncias interatómicas (internucleares) e deslocamentos vibracionais são usualmente expressos na unidade fora do SI *angstrom*, onde $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m} = 0,1 \text{ nm} = 100 \text{ pm}$. \AA não deve ser usado.

(12) Os vários modos ligeiramente distintos de representar distâncias interatómicas, diferenciados por subscritos, envolvem diferentes contribuições vibracionais médias, e são discutidos em [45], onde estão listadas as estruturas geométricas médias de muitas moléculas livres. Apenas a distância de equilíbrio r_e é isotopicamente invariante, dentro de uma boa aproximação. O parâmetro de distância efetiva r_0 é estimado a partir das constantes rotacionais para o estado vibracional fundamental, e tem um significado físico mais complicado no caso de moléculas poliatômicas.

(13) Constantes de força são usualmente expressas em mdyn $\text{\AA}^{-1} = \text{aJ \AA}^{-2}$ para coordenadas de estiramento (ou elongação), mdyn $\text{\AA} = \text{aJ}$ para coordenadas de deformação angular, e mdyn = aJ \AA^{-1} para interações de estiramento-deformação angular. \AA não deve ser usado (vide nota 11). Para outros detalhes sobre definições e notações para constantes de força, vide [46].

(14) As constantes de força em coordenadas normais adimensionais são usualmente definidas em unidades de número de onda pela equação $V/hc = \sum \phi_{rst\dots} q_r q_s q_t \dots$, onde o somatório sobre os índices de coordenada normal r, s, t, \dots não está sujeito a restrições.

(15) A magnitude de γ é obtida a partir das magnitudes do momento dipolar magnético μ e do momento angular (em RPE: spin eletrônico \mathbf{S} para um estado Σ , $L = 0$; em RMN: spin nuclear \mathbf{I}).

(16) Fator g efetivo para um único spin ($S = 1/2$) num campo estático externo (vide Secção 2.5, nota 10, p. 25).

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Definição</i>	<i>Unidade SI</i>	<i>Notas</i>
constante de acoplamento hiperfino em líquidos em sólidos	a, A \mathbf{T}	$\hat{H}_{\text{hfs}}/h = a \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{I}}$ $\hat{H}_{\text{hfs}}/h = \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{T} \cdot \hat{\mathbf{I}}$	Hz	17 17
ressonância magnética nuclear (RMN):				
densidade de fluxo magnético estático de um espetrômetro (Port.: espetrómetro) de RMN	B_0		T	18
densidades de fluxo magnético de radiofrequência	$\mathbf{B}_1, \mathbf{B}_2$		T	18
tensor de interação spin-rotação	C		Hz	19
constante de acoplamento spin-rotação do núcleo A	C_A		Hz	19
tensor de interação dipolar	D		Hz	19
constante de acoplamento dipolar entre núcleos A, B	D_{AB}	$D_{AB} = \frac{\mu_0 \hbar}{8\pi^2} \frac{\gamma_A \gamma_B}{r_{AB}^3}$	Hz	19
frequências variáveis de um espectro bidimensional	$F_1, F_2;$ f_1, f_2		Hz	
operador de spin nuclear para o núcleo A	$\hat{\mathbf{I}}_A, \hat{\mathbf{S}}_A$		1	20
número quântico associado com $\hat{\mathbf{I}}_A$	I_A		1	
tensor de acoplamento indireto de spin	\mathbf{J}		Hz	

(17) \hat{H}_{hfs} é o hamiltoniano de acoplamento hiperfino. $\hat{\mathbf{S}}$ é o operador de spin eletrônico com número quântico S (vide Secção 2.6.1, p. 33). As constantes de acoplamento a são usualmente expressas em MHz, mas às vezes são expressas em unidades de indução magnética (G ou T) obtidas dividindo-se pelo fator de conversão $g\mu_B/h$, que tem a unidade SI Hz/T; $g_e\mu_B/h \approx 28,025 \text{ GHz T}^{-1}$ ($= 2,8025 \text{ MHz G}^{-1}$), onde g_e é o fator g para um elétron livre. Se em líquidos a constante hiperfina é isotrópica, a constante de acoplamento é uma/un escalar a . Em sólidos o acoplamento é anisotrópico, e a constante de acoplamento é um tensor \mathbf{T} (3×3). Comentários similares aplicam-se ao fator g e aos parâmetros análogos em RMN. Foi proposta uma convenção para o fator g , em que o sinal de g é positivo quando o momento dipolar é paralelo ao seu momento angular, e negativo quando ele é anti-paralelo. Tal escolha requereria que os fatores g para os momentos angulares de orbital eletrônico e de spin fossem negativos [25] (vide Secção 2.5, nota 10, p. 25).

(18) As densidades de fluxo de radiofrequência observada (\mathbf{B}_1) e irradiada (\mathbf{B}_2) estão associadas com as frequências ν_1 , ν_2 e com as frequências angulares de nutação Ω_1 , Ω_2 (em torno de \mathbf{B}_1 , \mathbf{B}_2 , respectivamente). Elas são definidas por $\Omega_1 = -\gamma \mathbf{B}_1$ e $\Omega_2 = -\gamma \mathbf{B}_2$ (vide Secção 2.3, notas 8 e 9, p. 17).

(19) A unidade para as forças de interação é Hz. No contexto de relaxação, as forças de interação devem ser convertidas para unidades de frequência angular (rad s^{-1} , mas usualmente denotadas por s^{-1} , vide nota 25).

(20) $\hat{\mathbf{I}}_A$, $\hat{\mathbf{S}}_A$ têm componentes \hat{I}_{Ax} , \hat{I}_{Ay} , \hat{I}_{Az} ou \hat{S}_{Ax} , \hat{S}_{Ay} , \hat{S}_{Az} , respectivamente. Para outro modo de definir operadores de momento angular com unidade J s, vide Secção 2.6.1, p. 33.

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Definição</i>	<i>Unidade SI</i>	<i>Notas</i>
acoplamento spin-spin nuclear através de n ligações	nJ		Hz	21
constante de acoplamento spin-spin nuclear reduzido	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
autovalor (<i>Port.</i> : valor próprio) de $\hat{\mathbf{I}}_{Az}$	m_A		1	22
magnetização macroscópica de equilíbrio por unidade de volume	M_0		$J T^{-1} m^{-3}$	23
momento quadrupolar nuclear	eQ		$C m^2$	24
gradiente do campo elétrico	\mathbf{q}	$q_{\alpha\beta} = -\partial^2 V / \partial \alpha \partial \beta$	$V m^{-2}$	25
constante de acoplamento quadrupolar nuclear	χ	$\chi = eq_{zz}Q/h$	Hz	19
dimensões de tempo para RMN bidimensional	t_1, t_2		s	
tempo de relaxação spin-rede (longitudinal) para o núcleo A	T_1^A		s	26, 27
tempo de relaxação spin-spin (transversal) para o núcleo A	T_2^A		s	26
funções de onda de spin	$\alpha; \beta$			28
razão giromagnética	γ	$\gamma = \mu/\hbar\sqrt{I(I+1)}$	$s^{-1} T^{-1}$	15, 29
deslocamento químico para o núcleo A	δ_A	$\delta_A = (\nu_A - \nu_{ref})/\nu_{ref}$	1	30

(21) Parênteses podem ser usados para indicar as espécies de núcleos acoplados, *e.g.* $J(^{13}\text{C}, ^1\text{H})$ ou, adicionalmente, a via de acoplamento, *e.g.* $J(\text{POCF})$. Onde não houver ambiguidade, os elementos envolvidos podem ser, alternativamente, explicitados como subscrito, *e.g.* J_{CH} . O núcleo de maior massa deve aparecer primeiro. O mesmo se aplica à constante de acoplamento reduzida.

(22) Frequentemente recomenda-se M em vez de m , mas a maioria dos usuários de RMN preferem usar m para evitar confusão com a magnetização.

(23) Isto é para um sistema de spin na presença de uma densidade de fluxo magnético \mathbf{B}_0 .

(24) Vide Secção 2.5, notas 14 e 15, p. 25 e 26.

(25) O símbolo \mathbf{q} é recomendado pela IUPAC para o tensor gradiente do campo elétrico, com as unidades $V m^{-2}$ (vide Secção 2.5, p. 26). Com \mathbf{q} definido deste modo, a constante de acoplamento quadrupolar é $\chi = eq_{zz}Q/h$. Em RMN, é comum representar o tensor gradiente do campo elétrico como $e\mathbf{q}$ e a constante de acoplamento quadrupolar como $\chi = e^2 q_{zz}Q/h$. \mathbf{q} tem as componentes principais q_{XX}, q_{YY}, q_{ZZ} .

(26) O tempo de relaxação e o tempo de correlação são normalmente dados na unidade s. Estritamente falando, isto diz respeito a $s \text{ rad}^{-1}$.

(27) Denota-se como $T_{1\rho}^A$ o tempo de relaxação spin-rede do núcleo A no sistema de referência girando com \mathbf{B}_1 .

(28) Vide Secção 2.4, nota 9, p. 20.

(29) μ é a magnitude do momento magnético nuclear.

(30) Deslocamento químico (da ressonância) para o núcleo do elemento A (positivo quando a amostra tem uma frequência de ressonância mais alta do que a da referência); vide convenções em [47]. Informações adicionais relacionadas com solvente, referências, ou núcleos de interesse podem ser fornecidas por sobrescritos ou subscritos ou através do uso de parênteses.

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Definição</i>	<i>Unidade SI</i>	<i>Notas</i>
intensificação nuclear Overhauser	η		1	31
magnéton nuclear	μ_N	$\mu_N = (m_e/m_p)\mu_B$	$J T^{-1}$	32
frequência de ressonância de uma molécula referencial	ν_{ref}		Hz	18
do campo de rf observado	ν_1			
do campo de rf irradiante	ν_2			
frequência de ressonância padronizada para o núcleo A	Ξ_A		Hz	33
tensor de blindagem	σ		1	34
constante de blindagem	σ_A	$B_A = (1 - \sigma_A)B_0$	1	34
tempo de correlação	τ_c		s	26

(31) O efeito nuclear Overhauser, $1 + \eta$, é definido como a razão da intensidade do sinal para o spin nuclear I , obtido sob condições de saturação do spin nuclear S , e a intensidade de sinal no equilíbrio para o spin nuclear I .

(32) m_e e m_p são as massas do elétron e do próton, respectivamente. μ_B é o magnéton de Bohr (vide Secção 2.5, notas 1 e 2, p. 24, e Capítulo 5, p. 115).

(33) Frequência de ressonância para o núcleo do elemento A num campo magnético tal que os prótons do tetrametilsilano (TMS) entram em ressonância exatamente a 100 MHz.

(34) Os símbolos σ_A (e termos relacionados do tensor de blindagem e suas componentes) devem referir-se à blindagem numa escala absoluta (para trabalhos teóricos). Para a blindagem em relação a uma referência, devem ser usados símbolos tais como $\sigma_A - \sigma_{ref}$. B_A é a densidade de fluxo magnético efetivo correspondente (vide Secção 2.3, nota 9, p. 17).

2.6.1 Símbolos para os operadores de momento angular e números quânticos

Na tabela a seguir, todos os símbolos de operadores denotam a razão adimensional do *momento angular* dividido por \hbar . Embora isto seja uma prática universal para os números quânticos, alguns autores usam os símbolos de operadores para denotar um *momento angular*, em cujo caso os operadores teriam unidades SI: J s. O título da coluna “*eixo Z*” denota a componente fixa no espaço, e o título “*eixo z*” denota a componente fixa na molécula ao longo do eixo de simetria (moléculas que são lineares ou rotores simétricos), ou o eixo de quantização.

Momento angular ¹	Operador símbolo	Símbolo do número quântico			Notas
		Total	eixo Z	eixo z	
orbital eletrônico	\hat{L}	L	M_L	Λ	2
apenas um elétron	\hat{l}	l	m_l	λ	2
spin eletrônico	\hat{S}	S	M_S	Σ	
apenas um elétron	\hat{s}	s	m_s	σ	
orbital eletrônico mais spin	$\hat{L} + \hat{S}$			$\Omega = \Lambda + \Sigma$	2
orbital nuclear (rotacional)	\hat{R}	R		K_R, k_R	
spin nuclear	\hat{I}	I	M_I		
rotor esférico					
vibracional interno	\hat{l}	$l(l\zeta)$		K_l	3
outros	$\hat{j}, \hat{\pi}$			$l(l\zeta)$	2, 3
soma de $R + L (+j)$	\hat{N}	N		K, k	2
soma de $N + S$	\hat{J}	J	M_J	K, k	2, 4
soma de $J + I$	\hat{F}	F	M_F		

(1) Em todos os casos, o operador vetorial e suas componentes relacionam-se com os números quânticos através de uma equação de *autovalores* análoga a:

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

onde os números quânticos das componentes M_J e K são valores inteiros ou semi-inteiros ímpares no intervalo $-J \leq M_J \leq +J, -J \leq K \leq +J$. (Se o símbolo do operador é considerado como representando o *momento angular* em vez do *momento angular* dividido por \hbar , as equações dos *autovalores* seriam $\hat{\mathbf{J}}^2 \psi = J(J+1)\hbar^2 \psi, \hat{J}_Z \psi = M_J \hbar \psi$, e $\hat{J}_z \psi = K \hbar \psi$.) l é frequentemente designado número quântico azimutal e m_l número quântico magnético.

(2) Alguns autores, notadamente Herzberg [29–31], tratam os números quânticos das componentes Λ, Ω, l e K como assumindo apenas valores positivo ou nulo, de tal forma que cada valor não nulo do número quântico designa duas funções de onda com sinais opostos para a componente do momento angular apropriada. Fazendo-se isso, a letra minúscula k é usualmente considerada como um número quântico com um dado sinal, relacionado a K por $K = |k|$. No entanto, em discussões teóricas todos os números quânticos das componentes são normalmente tratados como dotados de sinal, admitindo-se ambos os valores positivo e negativo.

(3) Não há convenção uniforme para denotar o momento angular vibracional interno; j, π, p e G têm sido todos usados. Para moléculas lineares e do tipo rotor simétrico, a componente de j no eixo de simetria é sempre denotada pelo número quântico l , onde l assume valores no intervalo $-v \leq l \leq +v$ em incrementos de 2. Na verdade, a correspondente componente do momento angular é $l\zeta\hbar$, em vez de $l\hbar$, onde ζ é a constante ζ de Coriolis (vide nota 7, p. 28).

(4) Os estados rotacionais de um rotor assimétrico são rotulados pelo valor de J (ou N se $S \neq 0$), com subscritos K_a, K_c , onde o último se correlaciona com o número quântico $K = |k|$ sobre os eixos a e c nos limites dos rotores simétricos prolato e oblato, respectivamente.

Exemplo $J_{K_a, K_c} = 5_{2,3}$ para um nível rotacional particular.

2.6.2 Símbolos para operadores de simetria e notações para espécies de simetria

(i) Operadores de simetria para coordenadas fixas no espaço [41,48]

identidade	E
permutação	P, p
inversão fixa no espaço	$E^*, (P)$
permutação-inversão	$P^* (= PE^*), p^*$

A operação de permutação P permuta os índices de núcleos idênticos.

Exemplo Na molécula NH₃, se os núcleos do hidrogênio são rotulados 1, 2 e 3, então $P = (123)$ simbolizaria a permutação onde 1 é substituído por 2, 2 por 3, e 3 por 1.

A operação de inversão E^* inverte o sinal de todas as coordenadas da partícula em relação à origem fixa no espaço, ou do centro de massa fixo na molécula se a translação tiver sido separada. É também chamado operador de paridade e então frequentemente denotado por P , embora não possa ser usado simultaneamente com P para permutação, que então deve ser denotado pela letra minúscula p . Na ausência de campo e na ausência de violação de paridade [26], as funções próprias verdadeiras do hamiltoniano são ou de paridade positiva + (invariante) ou de paridade negativa - (mudam de sinal) sob E^* . A notação pode ser usada para distinguir as duas componentes aproximadamente degeneradas formadas por um desdobramento Λ (num estado eletrônico degenerado) ou um desdobramento l (num estado vibracional degenerado) em moléculas lineares, ou por um desdobramento K (desdobramento assimétrico) em rotores ligeiramente assimétricos. Para moléculas lineares, as componentes resultantes de desdobramentos Λ ou l podem também ser distinguidas pelas rotulações e ou f [49]; para estados singletos, correspondem respectivamente a paridade + ou - para J par e vice-versa para J ímpar (mas vide [49]). Para moléculas lineares em estados eletrônicos degenerados, os níveis resultantes de desdobramentos Λ podem ser alternativamente rotulados por $\Pi(A')$ ou $\Pi(A'')$ (ou $\Delta(A'), \Delta(A'')$ etc.) [50]. Nestes casos, as designações A' ou A'' descrevem a simetria da função de onda eletrônica para valores elevados de J com respeito à reflexão no plano de rotação (mas vide [50] para outros detalhes). As designações A' ou A'' são particularmente úteis para a correlação de estados de moléculas envolvidas em reações ou fotodissociação.

Em relação às espécies de simetria de permutação-inversão, o sobrescrito + ou - pode ser usado para designar paridade, enquanto uma letra é usada para designar simetria em relação ao grupo de permutação. Também é possível usar a notação sistemática da teoria do grupo simétrico (grupo de permutação) S_n [51], sendo que neste caso o grupo de permutação-inversão é denotado por S_n^* , se o grupo de permutação completo for considerado. A espécie é então dada pela partição $P(S_n)$ [52–54]. Os exemplos abaixo referem-se às espécies de simetria para S_4^* , onde a partição é convencionalmente dada entre parênteses retos []. As convenções relativas a estes símbolos são ainda variáveis ([2.b] e [39–41, 51–54]).

- Exemplos* A_1^+ espécie totalmente simétrica em relação à permutação, paridade positiva, $[4]^+$
- A_1^- espécie totalmente simétrica em relação à permutação, paridade negativa, $[4]^-$
- E^+ espécie duplamente degenerada em relação à permutação, paridade positiva, $[2^2]^+$
- E^- espécie duplamente degenerada em relação à permutação, paridade negativa, $[2^2]^-$
- F_1^+ espécie triplamente degenerada em relação à permutação, paridade positiva, $[2,1^2]^+$
- F_1^- espécie triplamente degenerada em relação à permutação, paridade negativa, $[2,1^2]^-$

Os símbolos de Hermann-Mauguin de operações de simetria usados para cristais são dados na Secção 2.8.1 (ii), p. 48.

(ii) Operadores de simetria em coordenadas fixas na molécula (símbolos de Schönflies)
[29–31]

identidade	E
rotação por $2\pi/n$	C_n
reflexão	$\sigma, \sigma_v, \sigma_d, \sigma_h$
inversão	i
rotação-reflexão	$S_n (= C_n \sigma_h)$

Se C_n é o eixo de simetria primário, considera-se que as funções de onda que são invariantes ou mudam o sinal sob o operador C_n pertencem à espécie A ou B, respectivamente, e, noutros casos, às funções de onda que são multiplicadas por $\exp(\pm 2\pi i s/n)$ são dadas as rotulações de espécie E_s . As funções de onda que são invariantes ou mudam de sinal sob i são rotuladas de g (gerade) ou u (ungerade), respectivamente. As funções de onda que são invariantes ou mudam de sinal sob σ_h têm rotulações das espécies com um apóstrofo simples ' ou um apóstrofo duplo ", respectivamente. Para regras mais detalhadas vide [28–31].

2.6.3 Outros símbolos e convenções em Espectroscopia Óptica

(i) Símbolos de termos para estados atômicos

Os estados eletrônicos de átomos são rotulados pelo valor do número quântico L para o estado. O valor de L é indicado por uma letra maiúscula em estilo romano (vertical): as letras S, P, D, F, G, H, I, e K, … são usadas para $L = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$, e 7, …, respectivamente. As letras minúsculas correspondentes são usadas para o momento angular orbital de um elétron isolado. Para um átomo multieletrônico, a multiplicidade de spin eletrônico ($2S + 1$) pode ser indicada como um sobrescrito do lado esquerdo da letra, e o valor do momento angular total J como um subscrito do lado direito. Se L ou S forem zero, apenas um valor de J é possível e, nesse caso, o subscrito é normalmente suprimido. Finalmente, a configuração eletrônica de um átomo é indicada dando-se a ocupação de cada orbital monoelétrônico/a, como nos exemplos abaixo.

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

Um sobrescrito \circ à direita pode ser usado para indicar paridade ímpar (paridade negativa –). Omissão do sobrescrito \circ é então interpretada como paridade par (paridade positiva +). A fim de evitar ambiguidades, pode ser útil sempre designar a paridade por + ou – como um sobrescrito à direita (i.e. ${}^4S_{3/2}^-$ para N e ${}^3P_0^+$ para C).

(ii) Símbolos de termos para estados moleculares

Os estados eletrônicos de moléculas são rotulados indicando as espécies de simetria da função de onda no grupo pontual de simetria da molécula. Estas são letras maiúsculas latinas ou gregas, grafadas na vertical. Como para o caso dos átomos, a multiplicidade de spin ($2S + 1$) pode ser indicada por um sobrescrito à esquerda. Para moléculas lineares, o valor de $\Omega (= \Lambda + \Sigma)$ pode ser adicionado como um subscrito à direita (análogo a J para o caso dos átomos). Se o valor de Ω não for especificado, o símbolo do termo é considerado como referindo-se a todos os estados componentes, e um subscrito r ou i à direita pode ser adicionado para indicar que os componentes são regulares (a energia aumenta com Ω) ou invertidos (a energia decresce com Ω), respectivamente.

Aos estados eletrônicos de moléculas são, também, dados rótulos de uma única letra, como se segue. O estado eletrônico fundamental é rotulado por X, os estados excitados de mesma multiplicidade são rotulados por A, B, C, …, em ordem crescente de energia, e estados excitados de energia de multiplicidade diferente são rotulados com letras minúsculas a, b, c, … . No caso de moléculas

poliatômicas (exceto as diatômicas), é costume adicionar um til (*e.g.* \tilde{X}) a estas rotulações empíricas para evitar possível confusão com as designações de simetria.

Finalmente, orbitais monoeletrônicos/as são rotulados/as pelas letras minúsculas correspondentes, e a configuração eletrônica é indicada de maneira análoga à dos átomos.

Exemplos O estado fundamental de CH é $(1\sigma)^2 (2\sigma)^2 (3\sigma)^2 (1\pi)^1$, X $^2\Pi_r$, em que a componente $^2\Pi_{1/2}$ está abaixo da componente $^2\Pi_{3/2}$, como indicado pelo subscrito r para regular.

O estado fundamental de OH é $(1\sigma)^2 (2\sigma)^2 (3\sigma)^2 (1\pi)^3$, X $^2\Pi_i$, em que a componente $^2\Pi_{3/2}$ está abaixo da componente $^2\Pi_{1/2}$, como indicado pelo subscrito i para invertido.

Os dois estados eletrônicos mais baixos de CH₂ são $\cdots (2a_1)^2 (1b_2)^2 (3a_1)^2$, à 1A_1 , $\cdots (2a_1)^2 (1b_2)^2 (3a_1)^1 (1b_1)^1$, $\tilde{X} ^3B_1$.

O estado fundamental de C₆H₆ (benzeno) é $\cdots (a_{2u})^2 (e_{1g})^4$, $\tilde{X} ^1A_{1g}$.

Os estados vibracionais de moléculas são usualmente indicados especificando-se os números quânticos vibracionais para cada modo normal.

Exemplos Para uma molécula triatômica não linear
 $(0, 0, 0)$ denota o estado fundamental,
 $(1, 0, 0)$ denota o estado v_1 , *i.e.*, $v_1 = 1$, e
 $(1, 2, 0)$ denota o estado $v_1 + 2v_2$, *i.e.*, $v_1 = 1, v_2 = 2$, etc.

(iii) Notação para transições espectroscópicas

Os níveis superior e inferior de uma transição espectroscópica são indicados por um apóstrofo simples ' e um apóstrofo duplo "", respectivamente.

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

Transições são geralmente indicadas fornecendo-se a rotulação do estado excitado, seguida pela do estado fundamental, separadas por um traço ou uma seta para indicar o sentido da transição (emissão, à direita; absorção, à esquerda).

<i>Exemplos</i>	B-A	indica uma transição entre um estado de alta energia B e um estado de baixa energia A;
	B→A	indica uma emissão de B a A;
	B←A	indica absorção de A a B;
	A→B	indica de um modo mais geral uma transição do estado inicial A ao estado final B em cinética (vide Secção 2.12, p. 67);
	$(0, 2, 1) \leftarrow (0, 0, 1)$	rotula a banda quente $2v_2 + v_3 - v_3$ numa molécula triatômica não linear.

Para rotular transições vibrônicas (*Port.: vibrónicas*) (ou vibracionais) em moléculas poliatômicas com vários modos normais pode ser usada uma notação mais compacta [55], em que a cada índice de vibração r é dado um sobrescrito v'_r e um sobrescrito v''_r para indicar respectivamente os valores dos estados eletrônicos superior e inferior do número quântico vibracional. Se $v'_r = v''_r = 0$, suprime-se o índice correspondente.

Exemplos 1_0^1 denota a transição $(1,0,0)-(0,0,0)$;
 $2_0^2 3_1^1$ denota a transição $(0,2,1)-(0,0,1)$.

Para denotar transições no interior do mesmo estado eletrônico, pode-se usar a notação matricial ou uma seta.

Exemplo 2_{20} ou $2_{2 \leftarrow 0}$ denota uma transição vibracional dentro do estado eletrônico fundamental desde $v_2 = 0$ para $v_2 = 2$.

Para transições rotacionais, o valor de $\Delta J = J' - J''$ é indicado por uma letra como rótulo dos ramos de uma banda rotacional: $\Delta J = -2, -1, 0, 1$, e 2 são rotuladas como o ramo O, o ramo P, o ramo Q, o ramo R e o ramo S, respectivamente. As mudanças em outros números quânticos (tais como K para um rotor simétrico, ou K_a e K_c para um rotor assimétrico) podem ser indicadas pela adição de letras minúsculas como um sobreescrito à esquerda, seguindo-se a mesma regra.

Exemplo PQ indica um “ramo Q do tipo p” numa molécula rotor simétrica, *i.e.*, $\Delta K = -1$, $\Delta J = 0$.

O valor de K num nível inferior é indicado como um subscrito à direita, *e.g.*, ${}^PQ_{K''}$ ou ${}^PQ_2(5)$ indicando a transição de $K'' = 2$ a $K' = 1$, sendo o valor de J'' adicionado entre parênteses.

2.7 Radiação eletromagnética

As grandezas e símbolos aqui listados foram selecionados com base em recomendações da IUPAP [4], ISO [5.f], e IUPAC [56–59], tendo ainda em conta a prática comum na área de Física de Laser. Os termos usados em Fotoquímica [60] também foram considerados, mas algumas definições podem não coincidir. Os termos usados para radiação eletromagnética ionizante de alta energia, em Química de Radiação, Radioquímica e Química Nuclear não estão incluídos ou discutidos.

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
comprimento de onda	λ		m	
velocidade da luz				
no vácuo	c_0	$c_0 = 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}$	m s^{-1}	1
em um meio	c	$c = c_0/n$	m s^{-1}	1
número de onda no vácuo	$\tilde{\nu}$	$\tilde{\nu} = \nu/c_0 = 1/\lambda$	m^{-1}	2
número de onda (em um meio)	σ	$\sigma = 1/\lambda$	m^{-1}	
frequência	ν	$\nu = c/\lambda$	Hz	
frequência angular, pulsação	ω	$\omega = 2\pi\nu$	s^{-1} , rad s^{-1}	
índice de refração	n	$n = c_0/c$	1	
constante de Planck	h		J s	
constante de Planck dividida por 2π	\hbar	$\hbar = h/2\pi$	J s	
energia radiante	Q, W		J	3
densidade de energia radiante	ρ, w	$\rho = dQ/dV$	J m^{-3}	3
densidade de energia radiante espectral				3
em função da frequência	ρ_ν, w_ν	$\rho_\nu = d\rho/d\nu$	$\text{J m}^{-3} \text{ Hz}^{-1}$	
em função do número de onda	$\rho_{\tilde{\nu}}, w_{\tilde{\nu}}$	$\rho_{\tilde{\nu}} = d\rho/d\tilde{\nu}$	J m^{-2}	
em função do comprimento de onda	ρ_λ, w_λ	$\rho_\lambda = d\rho/d\lambda$	J m^{-4}	
potência (ou fluxo) radiante (energia radiante por unidade de tempo)	P, Φ	$P = dQ/dt$	W	3
intensidade radiante	I_e	$I_e = dP/d\Omega$	W sr^{-1}	3, 4

(1) O subscrito que indica vácuo é geralmente omitido quando não existe risco de ambiguidade. n indica o índice de refração do meio.

(2) A unidade cm^{-1} é geralmente usada para a grandeza número de onda no vácuo.

(3) Os símbolos para grandezas tais como *energia radiante* e *intensidade radiante* são também usados para as grandezas correspondentes referentes à radiação no visível, por exemplo grandezas luminosas e grandezas fotônicas (*Port.: fotónicas*). Quando existir a possibilidade de haver confusão entre estas grandezas, podem ser adicionados os subscritos e para energia, v para visível e p para fôtons (*Port.: fotões*). As unidades para as grandezas luminosas são derivadas da unidade de base candela (cd) (vide Secção 3.3, p. 91).

Exemplos	intensidade radiante	$I_e, I_e = dP/d\Omega$	unidade SI: W sr^{-1}
	intensidade luminosa	I_v	unidade SI: cd
	intensidade fotônica	I_p	unidade SI: $\text{s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$

A intensidade radiante I_e deve ser diferenciada da intensidade simples ou irradiância I (vide nota 5). Se for necessário, podem ser usados subscritos adicionais para distinguir entre as grandezas de absorção (abs), de transmissão (tr) ou de reflexão (refl).

(4) A intensidade radiante é a potência radiante por unidade de ângulo sólido na direção do ponto do qual a fonte é observada. A excitância radiante é a potência radiante total por unidade de área da fonte de radiação (A_{fonte}), para todos os comprimentos de onda. A radiância é a intensidade radiante por unidade área da fonte de radiação; Θ é o ângulo entre a normal ao elemento de área e a direção de observação como vista desde a fonte.

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
excitância (ou emitância) radiante	M	$M = dP/dA_{\text{fonte}}$	W m^{-2}	3, 4
radiânciā	L	$I_e = \int L \cos \Theta dA_{\text{fonte}}$	$\text{W sr}^{-1} \text{m}^{-2}$	3, 4
intensidade, irradiação	I, E	$I = dP/dA$	W m^{-2}	3, 5
intensidade espectral, irradiância espectral	$I_{\tilde{\nu}}, E_{\tilde{\nu}}$	$I_{\tilde{\nu}} = dI/d\tilde{\nu}$	W m^{-1}	6
fluência	$F, (H)$	$F = \int I dt = \int (dP/dA) dt$	J m^{-2}	7
coeficiente de Einstein, emissão espontânea	A_{ij}	$dN_j/dt = - \sum_i A_{ij} N_j$	s^{-1}	8, 9
emissão estimulada ou induzida	B_{ij}	$dN_j/dt = - \sum_i \rho_{\tilde{\nu}}(\tilde{\nu}_{ij}) B_{ij} N_j$	s kg^{-1}	
absorção estimulada ou induzida	B_{ji}	$dN_i/dt = - \sum_j \rho_{\tilde{\nu}}(\tilde{\nu}_{ij}) B_{ji} N_i$	s kg^{-1}	
emissividade, emitância	ε	$\varepsilon = M/M_{\text{bb}}$	1	10
constante de Stefan-Boltzmann	σ	$M_{\text{bb}} = \sigma T^4$	$\text{W m}^{-2} \text{K}^{-4}$	10

(5) A intensidade ou irradiação é a potência radiante por unidade de área que incide numa superfície. A intensidade, símbolo I , é normalmente usada em discussões que envolvem feixes de luz colimados, como em aplicações da lei de Beer-Lambert para análise espectrométrica. A intensidade da radiação eletromagnética também pode ser definida como o módulo do vetor de Poynting (vide Secção 2.3, p. 18, e Secção 7.4, p. 154). Em Fotoquímica, o termo intensidade é algumas vezes usado como equivalente à intensidade radiante e não deve ser entendido como a irradiação, para a qual é preferido o símbolo E [60].

(6) As grandezas espetrais podem ser definidas com referência à frequência ν , ao comprimento de onda λ , ou ao número de onda $\tilde{\nu}$; vide a inserção para densidade de energia radiante espectral nesta tabela.

(7) Em Fotoquímica, a fluência é usada para especificar a energia por unidade de área fornecida num dado intervalo de tempo (por exemplo, por um pulso de laser); fluência é a/o integral sobre o tempo da velocidade de fluência. Às vezes é necessário distinguir entre irradiação e velocidade de fluência [60]; a velocidade de fluência reduz-se à irradiação para um feixe de luz incidente numa única direção perpendicular à superfície. A/O integral sobre o tempo da irradiação é chamada/o de exposição radiante.

(8) Os índices i e j referem estados individuais; $E_j > E_i$, $E_j - E_i = hc\tilde{\nu}_{ij}$, e $B_{ji} = B_{ij}$ nas equações de definição. Os coeficientes B são aqui definidos usando a densidade de energia $\rho_{\tilde{\nu}}$ em função do número de onda; alternativamente podem ser definidos usando a densidade de energia em função da frequência ρ_{ν} , caso em que as unidades de B são m kg^{-1} , e $B_{\nu} = c_0 B_{\tilde{\nu}}$, onde B_{ν} é definido usando frequência e $B_{\tilde{\nu}}$ usando número de onda. As equações de definição referem-se às contribuições *parciais* para a velocidade de variação.

(9) A relação entre os coeficientes de Einstein A e $B_{\tilde{\nu}}$ é $A = 8\pi h c_0 \tilde{\nu}^3 B_{\tilde{\nu}}$. O coeficiente de Einstein para absorção ou emissão estimulada B também pode ser relacionado com o momento de transição entre os estados i e j ; para uma transição de um dipolo elétrico, a relação é:

$$B_{\tilde{\nu},ij} = \frac{8\pi^3}{3h^2 c_0 (4\pi\varepsilon_0)} \sum_{\rho} |\langle i | \mu_{\rho} | j \rangle|^2$$

onde o somatório em relação a ρ é aplicado aos três eixos cartesianos fixos no espaço tridimensional, e μ_{ρ} é a componente especialmente fixa do operador de momento dipolar. Mais uma vez, estas equações estão baseadas na definição do coeficiente de Einstein B em função do número de onda (*i.e.*, $B_{\tilde{\nu}}$ em vez de B_{ν}).

(10) A emitância de uma amostra é a razão entre a excitância radiante emitida pela amostra e a excitância radiante emitida por um corpo negro à mesma temperatura; M_{bb} é esta última grandeza. Para o valor da constante de Stefan-Boltzmann, vide Capítulo 5, p. 116.

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
taxa de transferência (rendimento, E , (e) poder de coleta (<i>Port.</i> : recolha) de luz)		$E = A\Omega = P/L$	$\text{m}^2 \text{ sr}$	11
resolução	$\tilde{\delta\nu}$		m^{-1}	2, 12, 13
poder de resolução	R	$R = \tilde{\nu}/\tilde{\delta\nu}$	1	13
intervalo espectral livre	$\Delta\tilde{\nu}$	$\Delta\tilde{\nu} = 1/2l$	m^{-1}	2, 14
finesse	f	$f = \Delta\tilde{\nu}/\tilde{\delta\nu}$	1	14
fator de qualidade	Q	$Q = 2\pi\nu \frac{W}{-\text{d}W/\text{d}t}$	1	14, 15
primeira constante de radiação	c_1	$c_1 = 2\pi h c_0^2$	W m^2	
segunda constante de radiação	c_2	$c_2 = hc_0/k_B$	K m	16
transmitância, fator de transmissão	τ, T	$\tau = P_{\text{tr}}/P_0$	1	17, 18
absortividade, fator de absorção	α	$\alpha = P_{\text{abs}}/P_0$	1	17, 18
refletância, fator de reflexão	ρ, R	$\rho = P_{\text{refl}}/P_0$	1	17, 18
absorbância (na base 10)	A_{10}, A	$A_{10} = -\lg(1 - \alpha_i)$	1	17–20

(11) A taxa de transferência é uma característica de um instrumento óptico. É uma medida do **poder de coleta** de luz, *i.e.*, a potência transmitida por unidade de radiância da fonte. A é a área da fonte ou do anteparo da imagem; Ω é o ângulo sólido aceito/**te** de cada ponto da fonte pelo anteparo da abertura.

(12) A definição exata de resolução depende da forma da linha, mas geralmente é tomada como sendo a largura da linha à meia altura do máximo de intensidade (FWHM) numa escala de números de onda, $\tilde{\delta\nu}$, ou de frequências, $\delta\nu$. Frequentemente é preferível o uso do poder de resolução, de dimensão unitária.

(13) Esta grandeza caracteriza o desempenho de um **espectrômetro**, ou o grau no qual a linha espectral (ou o feixe de laser) é monocromática. Também pode ser definida usando frequência ν , ou comprimento de onda λ .

(14) Estas grandezas caracterizam uma cavidade de Fabry-Perot, ou cavidade de laser. l é o comprimento da cavidade, e $2l$ o comprimento do percurso completo de ida e volta. O intervalo espectral livre é o intervalo de números de onda entre os sucessivos modos longitudinais da cavidade.

(15) W é a energia armazenada na cavidade, e $-\text{d}W/\text{d}t$ é a velocidade de decaimento da energia armazenada. Q também está relacionado com a largura da linha de um modo único da cavidade: $Q = \nu/\delta\nu = \tilde{\nu}/\tilde{\delta\nu}$. Assim, cavidades com valores de Q altos dão larguras de linha estreitas.

(16) k_B é a constante de Boltzmann (vide Secção 2.9, p. 49, e Capítulo 5, p. 115).

(17) Se o espalhamento (*Port.*: dispersão) e a luminescência podem ser desprezados, $\tau + \alpha + \rho = 1$. Na Espectroscopia Óptica, as propriedades internas (indicadas pelo subscrito i) são definidas de modo a excluir os efeitos de superfície e da cubeta (*Port.*: célula), tais como perdas por reflexão, de forma que $\tau_i + \alpha_i = 1$ quando se puder desprezar o **espalhamento** e a luminescência. Isto leva à forma habitual da lei de Beer-Lambert, $P_{\text{tr}}/P_0 = I_{\text{tr}}/I_0 = \tau_i = 1 - \alpha_i = \exp(-\kappa cl)$. Então, $A_e = -\ln(\tau_i)$, $A_{10} = -\lg(\tau_i)$.

(18) Em Espectroscopia, todas estas grandezas são geralmente definidas em função da intensidade espectral, $I_{\tilde{\nu}}(\tilde{\nu})$, e por isso todas elas são consideradas como funções do número de onda $\tilde{\nu}$ (ou da frequência ν) em todo o espectro. Assim, por exemplo, o coeficiente de absorção $\alpha(\tilde{\nu})$ em termos do número de onda $\tilde{\nu}$ define o espectro de absorção da amostra; de forma análoga, $T(\tilde{\nu})$ define o espectro de transmitância. Os espectroscopistas usam $I(\tilde{\nu})$ em vez de $I_{\tilde{\nu}}(\tilde{\nu})$.

(19) As definições aqui fornecidas relacionam a **absorbância** A_{10} ou A_e à absortividade *interna* α_i (vide nota 17). Porém, o subscrito i é frequentemente omitido na absortividade α . Para que a **absorbância** tenha um significado absoluto, os dados experimentais devem incluir correções por reflexão, **espalhamento** e luminescência. Na prática, a **absorbância** é medida como o logaritmo da razão entre a luz transmitida através de uma **cubeta** de referência (apenas com solvente) e a luz transmitida através da **cubeta** com a amostra.

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Definição</i>	<i>Unidade SI</i>	<i>Notas</i>
absorbância neperiana	A_e, B	$A_e = -\ln(1 - \alpha_i)$	1	17–20
coeficiente de absorção (linear) na base 10	a, K	$a = A_{10}/l$	m^{-1}	18, 21
(linear) neperiano	α	$\alpha = A_e/l$	m^{-1}	18, 21
molar (na base 10)	ε	$\varepsilon = a/c = A_{10}/cl$	$\text{m}^2 \text{ mol}^{-1}$	18, 21, 22
molar neperiano	κ	$\kappa = \alpha/c = A_e/cl$	$\text{m}^2 \text{ mol}^{-1}$	18, 21, 22
secção de choque de absorção líquida	σ_{net}	$\sigma_{\text{net}} = \kappa/N_A$	m^2	23
coeficiente de absorção integrado sobre $\tilde{\nu}$	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
integrado sobre $\ln \tilde{\nu}$	Γ	$\Gamma = \int \kappa(\tilde{\nu}) \tilde{\nu}^{-1} d\tilde{\nu}$	$\text{m}^2 \text{ mol}^{-1}$	23, 24
secção de choque de absorção líquida integrada	G_{net}	$G_{\text{net}} = \int \sigma_{\text{net}}(\tilde{\nu}) \tilde{\nu}^{-1} d\tilde{\nu}$	m^2	23, 24
índice de absorção,	k	$k = \alpha/4\pi\tilde{\nu}$	1	26
índice de refração imaginário				
índice de refração complexo	\hat{n}	$\hat{n} = n + ik$	1	
refração molar,				
refratividade molar	R	$R = \left(\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \right) V_m$	$\text{m}^3 \text{ mol}^{-1}$	
ângulo de rotação óptica	α		1, rad	27
poder rotatório óptico específico	$[\alpha]_\lambda^\theta$	$[\alpha]_\lambda^\theta = \alpha/\gamma l$	$\text{rad m}^2 \text{ kg}^{-1}$	27
poder rotatório óptico molar	α_m	$\alpha_m = \alpha/cl$	$\text{rad m}^2 \text{ mol}^{-1}$	27

(20) Na referência [57] o símbolo A é usado para a absorbância na base 10, e B para a absorbância neperiana.

(21) l é o percurso óptico de absorção, e c é a concentração de quantidade (de substância).

(22) Na literatura publicada, o coeficiente de absorção molar na base 10 ε é às vezes chamado de “coeficiente de extinção”. Infelizmente, os valores numéricos do “coeficiente de extinção” são frequentemente informados sem especificar as unidades; a ausência de unidades geralmente significa que as unidades são $\text{mol}^{-1} \text{ dm}^3 \text{ cm}^{-1}$ (vide também [61]). A palavra “extinção” deveria ser mais apropriadamente reservada para a soma dos efeitos de absorção, espalhamento e luminescência.

(23) Note-se que estas grandezas fornecem o coeficiente de absorção líquido, κ , a secção de choque de absorção líquida σ_{net} , e os valores líquidos de A, S, \bar{S}, Γ , e G_{net} , no sentido que são as somas dos efeitos devidos à absorção e à emissão induzida (vide discussão na Secção 2.7.1, p. 42).

(24) A/O integral definida/o que define estas grandezas pode ser especificada/o através dos limites de integração entre parênteses, por exemplo $G(\tilde{\nu}_1, \tilde{\nu}_2)$. Em geral, considera-se que a integração deve ser feita sobre uma linha de absorção ou uma banda de absorção. A, \bar{S} , e Γ são medidas da intensidade da banda em termos de concentração de quantidade (de substância); $G_{\text{net}} = \Gamma/N_A$ e $S = A/N_A$ são as grandezas moleculares correspondentes. A relação destas grandezas com as probabilidades de transição de Einstein, para uma linha espectral individual, é discutida na Secção 2.7.1, p. 42. O símbolo \bar{A} pode ser usado para o coeficiente de absorção integrado A quando existir a possibilidade de ser confundido com o coeficiente de Einstein para emissão espontânea A_{ij} . O coeficiente de absorção integrado de uma transição eletrônica é frequentemente expresso em função da força do oscilador ou “valor de f ”, que é adimensional, ou em termos da probabilidade de transição de Einstein A_{ij} entre os estados envolvidos, com a unidade SI s^{-1} . Enquanto A_{ij} tem um significado simples e é adotado universalmente (vide nota 9, p. 39), existem usos diferenciados de f . Uma conversão prática usualmente utilizada é dada pela equação

$$f_{ij} = [(4\pi\varepsilon_0)m_e c_0 / 8\pi^2 e^2] \lambda^2 A_{ij} \quad \text{ou} \quad f_{ij} \approx (1,4992 \times 10^{-14}) (A_{ij}/\text{s}^{-1}) (\lambda/\text{nm})^2$$

onde λ é o comprimento de onda da transição, e i e j denotam os estados individuais. Para transições eletrônicas fortemente permitidas, f é da ordem da unidade.

2.7.1 Grandezas e símbolos relacionados com a medição de intensidade de absorção

Na maioria dos estudos experimentais dedicados à medição da intensidade de absorção espectral, as medidas fornecem a absorção líquida devida aos efeitos de absorção do nível de menor energia m para o nível de maior energia n , menos a emissão induzida de n para m . Como as populações dos estados dependem da temperatura, o mesmo ocorre com a absorção líquida medida. Este comentário é válido para todas as grandezas definidas na tabela para medir intensidades de absorção, embora a dependência com a temperatura seja pequena para transições em que $hc_0\tilde{\nu} \gg kT$ e à temperatura ambiente a emissão induzida possa geralmente ser desprezada para $\tilde{\nu} > 1000 \text{ cm}^{-1}$.

Numa abordagem mais fundamental, define-se a secção de choque $\sigma_{ji}(\tilde{\nu})$ para uma transição radiante induzida do estado i para o estado j (tanto na absorção como na emissão). Numa experiência de absorção ideal em que inicialmente somente o estado de menor energia i está ocupado, a secção de choque de absorção integrada para a transição $j \leftarrow i$ é dada por

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

Quando os níveis de energia superior e inferior possuem degenerescências, a intensidade da linha observada será dada pelo somatório sobre todas as transições entre todos os estados i do nível de energia inferior m e todos os estados j do nível de energia superior n , multiplicando cada termo pela fração da população p_i em cada estado inicial. Desprezando-se a emissão induzida, obtém-se

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

(Continuação das notas)

(25) A grandeza \bar{S} é usada somente para gases; é definida de forma similar a A , exceto que a concentração c é substituída pela pressão parcial p do gás. A baixas pressões $p_i \approx c_i RT$, de forma que \bar{S} e A estão relacionados pela equação $\bar{S} \approx A/RT$. Assim, a temperatura deverá ser especificada quando se utiliza \bar{S} para descrever as intensidades de linha ou de banda. I_0 é a intensidade incidente e I é a intensidade transmitida; então $\ln(I_0/I) = -\ln(I/I_0) = -\ln(1-P_{\text{abs}}/P_0) = A_e$ (vide também notas 17 e 19, p. 40).

(26) Na definição, α é o coeficiente de absorção neperiano.

(27) A convenção para o sinal do ângulo de rotação óptica é a seguinte: α é positivo quando o plano de polarização é desviado no sentido horário olhando na direção da fonte de luz. Se o sentido da rotação for anti-horário, α será negativo. A rotação óptica devida a um soluto em solução pode ser especificada por uma informação do tipo

$$\alpha(589, 3 \text{ nm}, 20^\circ\text{C}, \text{sacarose}, 10 \text{ g dm}^{-3} \text{ em H}_2\text{O, percurso óptico } 10 \text{ cm}) = +0,6647^\circ$$

A mesma informação pode ser fornecida citando o poder rotatório óptico específico $\alpha/\gamma l$, ou o poder rotatório óptico molar α/cl , onde γ é a concentração de massa, c a concentração de quantidade (de substância) e l o percurso óptico. A maioria das compilações listam o poder rotatório óptico específico, indicado por $[\alpha]_\lambda^\theta$. O comprimento de onda da luz usada λ (frequentemente a linha D do sódio) e a temperatura Celsius θ são convenientemente indicados como subscrito e superscrito do poder rotatório específico $[\alpha]$. Para líquidos e sólidos puros, $[\alpha]_\lambda^\theta$ é definido como $[\alpha]_\lambda^\theta = \alpha/\rho l$, onde ρ é a densidade de massa.

O poder rotatório óptico específico é habitualmente chamado de *rotação específica* e, infelizmente, os dados são geralmente citados sem indicação de unidades. Na ausência de unidades, usualmente pode-se supor que para líquidos puros e soluções as unidades sejam $^\circ \text{cm}^3 \text{ g}^{-1} \text{ dm}^{-1}$, e para sólidos $^\circ \text{cm}^3 \text{ g}^{-1} \text{ mm}^{-1}$, onde $^\circ$ é usado como símbolo para os graus do ângulo plano.

Quando a emissão induzida é significativa, a secção de choque integrada líquida é dada por

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

Aqui p_i e p_j indicam as frações das populações dos estados i e j ($p_i = \exp\{-E_i/kT\}/q$ em equilíbrio térmico, onde q é a função de partição); p_m e p_n indicam as frações de população correspondentes dos níveis de energia, e d_m e d_n as degenerescências ($p_i = p_m/d_m$, etc.). A intensidade de absorção G_{ji} , e os coeficientes de Einstein A_{ij} e B_{ji} , são medidas fundamentais da intensidade de linha entre os estados individuais i e j ; estão relacionados entre si pelas equações gerais

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

Finalmente, para uma transição de um dipolo elétrico, estas grandezas estão relacionadas com o quadrado do momento de transição pela equação

$$G_{ji} = hB_{\tilde{\nu},ji} = A_{ij}/(8\pi c_0 \tilde{\nu}^3) = \frac{8\pi^3}{3hc_0(4\pi\varepsilon_0)} |M_{ji}|^2$$

onde o momento de transição M_{ji} é dado por

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

Aqui a soma é feita sobre os eixos cartesianos fixos no espaço tridimensional e μ_{ρ} é uma componente fixa no espaço do momento dipolar elétrico. Inserindo valores numéricos para as constantes, a relação entre G_{ji} e M_{ji} pode ser escrita de forma prática como

$$(G_{ji}/\text{pm}^2) \approx 41,6238 |M_{ji}/\text{D}|^2$$

onde $1 \text{ D} \approx 3,335 \times 10^{-30} \text{ C m}$ (D é o símbolo para debye) [62].

As intensidades integradas líquidas das bandas de absorção são geralmente caracterizadas por alguma das grandezas A , S , \bar{S} , Γ , ou G_{liq} como definidas na tabela. A relação entre estas grandezas é dada pelas equações (aproximadas)

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

Note que apenas a primeira igualdade é exata. Para uma banda, a relação com A , \bar{S} e S envolve a divisão pelo número de onda do centro da banda $\tilde{\nu}_0$ para corrigir o fato que A , \bar{S} e S são obtidos integrando sobre o número de onda ao invés de sobre o logaritmo do número de onda usado para G_{liq} e Γ . Para uma banda, esta correção é apenas aproximada (embora um erro desprezável esteja envolvido para intensidades de uma única linha em gases). A relação com \bar{S} envolve a suposição que o gás seja ideal (o que é aproximadamente correto para baixas pressões), e também envolve a temperatura. Assim as grandezas Γ e G_{liq} relacionam-se de forma mais simples com grandezas mais fundamentais, tais como as probabilidades de transição de Einstein e o momento de transição, sendo as grandezas preferenciais para relatar intensidades de linha ou de banda integradas.

A situação fica ainda mais complicada quando alguns autores usam o símbolo S para qualquer uma das grandezas acima, especialmente para alguma das grandezas indicadas aqui por A , S e \bar{S} . Por isso, é extremamente importante especificar as grandezas e símbolos usados para descrever intensidades integradas.

Qualquer uma das grandezas mais fundamentais G_{ji} , $B_{\tilde{\nu},ji}$, A_{ij} , ou $|M_{ji}|$ pode ser usada para transições entre estados individuais; as relações são as dadas acima, e são exatas. O coeficiente de absorção integrado A não deve ser confundido com o coeficiente de Einstein A_{ij} (nem com a absorbância, para a qual também é usado o símbolo A). Quando essa confusão possa existir, recomenda-se escrever \bar{A} para a intensidade de banda expressa como um coeficiente de absorção integrado sobre o número de onda.

A unidade SI e as unidades usualmente utilizadas para A , S , \bar{S} , Γ e G são as da tabela abaixo. Nela também são fornecidos coeficientes numéricos, nas unidades habitualmente usadas, para a transformação de A , S , \bar{S} e Γ para G_{liq} .

<i>Grandeza</i>	<i>Unidade SI</i>	<i>Unidade comum</i>	<i>Coeficiente de transformação</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	

As grandezas relativas à intensidade de absorção espectral e as relações entre essas grandezas são discutidas nas referências [62–65], e uma listagem de medidas publicadas de intensidades de linha e de banda para espectros de infravermelho em fase gasosa pode ser encontrada nas referências [63–65]. Para relações entre intensidades de absorção espectroscópicas e velocidades de transições radiantes, vide também [66].

2.7.2 Convenções para intensidades de absorção em fases condensadas

A **absorbância**, o coeficiente de absorção e o coeficiente de absorção integrado, A , descritos acima podem ser usados para fases condensadas, desde que as medidas de transmissão sejam corrigidas de forma correta para levar em conta a reflexão e outras perdas. As correções geralmente usadas são adequadas para bandas fracas e médias em líquidos e sólidos puros e para bandas de solutos em soluções diluídas. Para fazer as correções das bandas intensas em líquidos e sólidos puros de forma precisa, é necessário determinar os índices de refração real e imaginário n e k , da amostra em todo o intervalo espectral. Então, os mesmos n e k resultantes fornecerão uma descrição completa da intensidade de absorção na fase condensada. Para líquidos, este procedimento requer o conhecimento de n e k das janelas da **cubeta**. Os espectros de reflexão também são processados para obter n e k . Para sólidos não isotrópicos, todas as propriedades de intensidade devem ser definidas em relação a eixos cristalinos específicos. A partir dos espectros para n e k , podem ser obtidos os espectros de qualquer propriedade óptica ou grandeza medida da amostra. Os físicos preferem usar a **permissividade** relativa complexa (vide Secção 2.3, p. 16), $\hat{\epsilon}_r = \epsilon_r' + i\epsilon_r'' = \text{Re } \hat{\epsilon}_r + i \text{Im } \hat{\epsilon}_r$, em vez do índice de refração complexo \hat{n} . $\epsilon_r' = \text{Re } \hat{\epsilon}_r$ indica a parte real e $\epsilon_r'' = \text{Im } \hat{\epsilon}_r$ a parte imaginária de $\hat{\epsilon}_r$, respectivamente. Estas propriedades estão relacionadas através de $\hat{\epsilon}_r = \hat{n}^2$, de forma que $\epsilon_r' = n^2 - k^2$ e $\epsilon_r'' = 2nk$.

Os índices de refração e as **permissividades** relativas são propriedades do seio da fase (fase maciça). Para obter informação sobre as moléculas no líquido, independente dos efeitos dielétricos no interior do líquido, deve ser determinado o campo local que age sobre as moléculas, \mathbf{E}_{loc} , em função do campo aplicado \mathbf{E} . Uma relação simples é o campo local de Lorentz, $\mathbf{E}_{\text{loc}} = \mathbf{E} + \mathbf{P}/3\epsilon_0$, onde \mathbf{P} é a polarização dielétrica. Este campo local está baseado na suposição de que as interações de longo alcance são isotrópicas, de forma que somente é adequado para líquidos e sólidos isotrópicos.

A utilização deste campo local resulta na fórmula de Lorentz-Lorenz (quando aplicada a campos estáticos, esta relação é geralmente chamada de fórmula de Clausius-Mossotti), estendida para tratar materiais que absorvem em qualquer número de onda.

$$\frac{\hat{\varepsilon}_r(\tilde{\nu}) - 1}{\hat{\varepsilon}_r(\tilde{\nu}) + 2} = \frac{1}{3\varepsilon_0 V_m} \hat{\alpha}_m(\tilde{\nu})$$

Aqui V_m é o volume molar e $\hat{\alpha}_m$ a polarizabilidade molar complexa (vide Secção 2.3, nota 7, p. 16). A parte imaginária α_m'' da polarizabilidade molar complexa descreve a absorção das moléculas no líquido, corrigida pelos efeitos dielétricos isotrópicos de longo alcance, mas influenciada pelo ambiente anisotrópico criado pelas moléculas vizinhas mais próximas. A parte real α_m' é a polarizabilidade molar (vide secções 2.3 e 2.5) no limite de frequência infinita.

O coeficiente de absorção integrado para uma banda de absorção molecular em fase condensada é descrito por [67, 68] (vide nota 1, abaixo)

$$C_j = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int_{\text{banda } j} \tilde{\nu} \alpha_m''(\tilde{\nu}) d\tilde{\nu}$$

Numa análise teórica geralmente supõe-se que a banda medida inclui a transição $j \leftarrow i$, com número de onda do centro da banda $\tilde{\nu}_0$, e todas as suas transições quentes. Então

$$C_j = \frac{N_A \pi}{3hc_0(4\pi\varepsilon_0)} \tilde{\nu}_0 g(|M_{ji}|^2)$$

onde $\tilde{\nu}_0 g(|M_{ji}|^2)$ é a soma, ponderada pela população, sobre todas as transições contribuintes nesse número de onda vezes o quadrado do momento dipolar elétrico da transição (em geral, g é uma função dependente da temperatura que inclui efeitos da estrutura não homogênea da banda). A relação tradicional entre os valores dos coeficientes de absorção nas fases gasosa e líquida para uma dada banda j é a equação de Polo-Wilson [69]

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

em que \bar{n} é o valor médio estimado de n sobre a banda de absorção. Esta relação é válida desde que:

- (i) as bandas sejam suficientemente fracas, *i.e.*, $2nk + k^2 \ll n^2$;
- (ii) a aproximação harmônica dupla forneça uma aproximação teórica satisfatória para a estrutura da banda; neste caso, a função g é aproximadamente independente da temperatura e os valores de g são iguais nas fases gasosa e líquida;
- (iii) $\tilde{\nu}_0 |M_{ji}|^2$ sejam idênticos nas fases gasosa e líquida.

Uma relação mais recente e mais geral que requer apenas a segunda e a terceira destas condições é $A_{\text{gas}} = 8\pi^2 C_j$. Consequentemente, para as bandas que obedecem a todas as três condições

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

Esta relação mostra que, enquanto o índice de refração n para um líquido fica automaticamente incorporado no coeficiente de absorção integrado C_j , o coeficiente de absorção tradicional A ainda tem de ser corrigido pela permissividade ou refração.

(1) A unidade SI para esta grandeza é m mol^{-1} . No sistema gaussiano, frequentemente adota-se a definição de C_j como $C_j = \int_{\text{banda } j} \tilde{\nu} \alpha_m''(\tilde{\nu}) d\tilde{\nu}$, com unidade cm mol^{-1} .

2.8 Estado sólido

As grandezas e símbolos aqui apresentados foram selecionados de listas mais extensas da IUPAP [4] e da ISO [5.n]. Vide também *International Tables for Crystallography*, Volume A [70].

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
vetor da/ de rede,				
vetor da/ de rede de Bravais	\mathbf{R}, \mathbf{R}_0		m	
vetores de translação fundamental para a rede cristalina	$\mathbf{a}_1; \mathbf{a}_2; \mathbf{a}_3, \quad \mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ $\mathbf{a}; \mathbf{b}; \mathbf{c}$		m	1
vetores de translação fundamental (angular) para a rede recíproca	$\mathbf{b}_1; \mathbf{b}_2; \mathbf{b}_3, \quad \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_k = 2\pi\delta_{ik}$ $\mathbf{a}^*; \mathbf{b}^*; \mathbf{c}^*$		m^{-1}	2
vetor da/ de rede recíproca (angular)	\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
dimensões da célula unitária	$a; b; c$		m	
ângulos da célula unitária	$\alpha; \beta; \gamma$		rad, 1	
dimensões da célula unitária recíproca	$a^*; b^*; c^*$		m^{-1}	
ângulos da célula unitária recíproca	$\alpha^*; \beta^*; \gamma^*$		rad, 1	
coordenadas fracionárias	$x; y; z$	$x = X/a$	1	4
fator de espalhamento atômico	f	$f = E_a/E_e$	1	5
fator de estrutura	$F(h, k, l)$	$F = \sum_{n=1}^N f_n e^{2\pi i(hx_n + ky_n + lz_n)}$	1	6
com índices h, k, l				
distância entre planos da rede	d		m	
ângulo de Bragg	θ	$n\lambda = 2d \sin\theta$	rad, 1	7
ordem de reflexão	n		1	
parâmetros de ordem, de curto alcance	σ		1	
de longo alcance	s		1	
vetor de Burgers	\mathbf{b}		m	
vetor de posição de uma partícula	$\mathbf{r}_j, \mathbf{R}_j$		m	8
vetor de posição de um íon em equilíbrio	\mathbf{R}_0		m	
vetor de deslocamento de um íon	\mathbf{u}	$\mathbf{u} = \mathbf{R} - \mathbf{R}_0$	m	

(1) n_1, n_2 e n_3 são inteiros. a, b e c são também denominados parâmetros de rede.

(2) Os vetores da rede recíproca são às vezes definidos por $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_k = \delta_{ik}$.

(3) m é um inteiro, com $m = n_1 h + n_2 k + n_3 l$.

(4) X denota a coordenada com dimensão de comprimento.

(5) E_a e E_e denotam as amplitudes de **espalhamento** para o átomo e o **elétron** isolado, respectivamente.

(6) N é o número de átomos na célula unitária.

(7) λ é o comprimento de onda da radiação incidente.

(8) Para distinguir entre vetores de posição de um **elétron** e de um **íon**, são usadas letras minúsculas e maiúsculas, respectivamente. O subscrito j corresponde à partícula j .

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Definição</i>	<i>Unidade SI</i>	<i>Notas</i>
fator de Debye-Waller	B, D	$D = e^{-2\langle(\mathbf{q} \cdot \mathbf{u})^2\rangle}$	1	9
número de onda angular de Debye	q_D, k_D	$k_D = (C_i 6\pi^2)^{1/3}$	m^{-1}	10
frequência angular de Debye	ω_D	$\omega_D = k_D c_0$	s^{-1}	10
frequência de Debye	ν_D	$\nu_D = \omega_D/2\pi$	s^{-1}	
número de onda de Debye	$\tilde{\nu}_D$	$\tilde{\nu}_D = \nu_D/c_0$	m^{-1}	10
temperatura de Debye	Θ_D	$\Theta_D = h\nu_D/k_B$	K	
parâmetro de Grüneisen	γ, Γ	$\gamma = \alpha V/\kappa C_V$	1	11
constante de Madelung	α, \mathcal{M}	$E_{\text{coul}} = \frac{\alpha N_A z_+ z_- e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0}$	1	12
densidade de estados	N_E	$N_E = dN(E)/dE$	$J^{-1} m^{-3}$	13
densidade (espectral) de modos vibracionais	N_ω, g	$N_\omega = dN(\omega)/d\omega$	$s m^{-3}$	14
tensor de resistividade	$\rho, (\rho_{ik})$	$\mathbf{E} = \rho \cdot \mathbf{j}$	Ωm	15
tensor de condutividade	$\sigma, (\sigma_{ik})$	$\mathbf{j} = \sigma \cdot \mathbf{E}$	$S m^{-1}$	15
resistividade residual	ρ_R		Ωm	
tensor de condutividade térmica	λ_{ik}	$\mathbf{J}_q = -\boldsymbol{\lambda} \cdot \nabla T$	$W m^{-1} K^{-1}$	15
tempo de relaxação	τ	$\tau = l/v_F$	s	16
coeficiente de Lorenz	L	$L = \lambda/\sigma T$	$V^2 K^{-2}$	17
coeficiente de Hall	A_H, R_H	$\mathbf{E} = \rho \mathbf{j} + R_H(\mathbf{B} \times \mathbf{j})$	$m^3 C^{-1}$	
força termoelétrica	E		V	18
coeficiente de Peltier	Π	$E = \Pi \frac{\Delta T}{T}$	V	18
coeficiente de Thomson	$\mu, (\tau)$	$\mu = \Pi/T$	$V K^{-1}$	
densidade de número, concentração de número	C, n, p		m^{-3}	19
energia da banda proibida	E_g		J	20
energia de ionização do doador	E_d		J	20
energia de ionização do aceitador	E_a		J	20
energia de Fermi	E_F, ε_F	$\varepsilon_F = \lim_{T \rightarrow 0} \mu$	J	20
função trabalho, função trabalho do elétron	Φ	$\Phi = E_\infty - E_F$	J	21
vetor de onda angular, vetor de propagação	\mathbf{k}, \mathbf{q}	$k = 2\pi/\lambda$	m^{-1}	22
função de Bloch	$u_k(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = u_k(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$	$m^{-3/2}$	23
densidade de carga de elétrons	ρ	$\rho(\mathbf{r}) = -e\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$	$C m^{-3}$	23, 24
massa efetiva	m^*		kg	25
mobilidade	μ	$\mathbf{v}_{\text{deriva}} = \mu \mathbf{E}$	$m^2 V^{-1} s^{-1}$	25
razão de mobilidade	b	$b = \mu_n/\mu_p$	1	
coeficiente de difusão	D	$\mathbf{j} = -D \nabla C$	$m^2 s^{-1}$	25, 26
comprimento de difusão	L	$L = \sqrt{D\tau}$	m	25, 26
temperatura característica (de Weiss)	θ, θ_W		K	
temperatura de Curie	T_C		K	
temperatura de Néel	T_N		K	

(9) $\hbar \mathbf{q}$ é a transferência de momento no **espalhamento de nêutrons**, $\langle \rangle$ indica a média térmica.

(10) C_i é a densidade de **fons**, c_0 é a velocidade da luz no vácuo. q_D é igual a 2π vezes o inverso do comprimento de onda de corte de Debye da onda elástica da rede.

(11) α é o coeficiente de expansão volumétrica, V o volume, κ a compressibilidade isotérmica, e C_V a capacidade **calorífica** a volume constante.

2.8.1 Símbolos para planos e direções em cristais

índices de Miller para uma face cristalina ou para um único plano da rede	(hkl) ou $(h_1h_2h_3)$
índices da reflexão de Bragg do conjunto de planos paralelos (hkl)	hkl ou $h_1h_2h_3$
índices do conjunto de todas as faces cristalinas ou planos da rede equivalentes por simetria	$\{hkl\}$ ou $\{h_1h_2h_3\}$
índices de uma direção reticular (eixo de zona)	$[uvw]$
índices de um conjunto de direções reticulares equivalentes por simetria	$\langle uvw \rangle$

Em cada um destes casos, quando as letras símbolos são substituídas por números, omitem-se as vírgulas. Para um único plano ou face cristalina, ou uma direção específica, um número negativo é indicado por uma barra sobre o número.

Exemplo ($\bar{1}10$) denota os planos paralelos $h = -1, k = 1, l = 0$.

(i) Símbolos para redes cristalinas

primitiva	P
de face centrada	F
de corpo centrado	I
de base centrada	A; B; C
romboédrica	R

(ii) Símbolos de Hermann-Mauguin para operações de simetria

Operação	Símbolo	Exemplos
n -ésima rotação	n	1; 2; 3; 4; 6
n -ésima roto-inversão	\bar{n}	$\bar{1}; \bar{2}; \bar{3}; \bar{4}; \bar{6}$
n -ésimo parafuso	n_k	$2_1; 3_1; 3_2; \dots$
reflexão	m	
deslizamento	$a; b; c; n; d$	

(Continuação das notas)

- (12) E_{coul} é a energia de interação eletrostática por mol de pares de íons com cargas z_+e e $-z_-e$.
- (13) $N(E)$ é o número total de estados com energia eletrônica menor que E , dividido pelo volume.
- (14) $N(\omega)$ é o número total de modos vibracionais com frequência angular menor que ω , dividido pelo volume.
- (15) Em meios isotrópicos, tensores podem ser substituídos por grandezas escalares correspondentes. \mathbf{J}_q é o vetor fluxo de calor ou densidade de corrente térmica.
- (16) A definição aplica-se a elétrons em metais; l é o percurso livre médio, e v_F é a velocidade dos elétrons na esfera de Fermi.
- (17) λ e σ são as condutividades térmica e elétrica em meios isotrópicos.
- (18) As substâncias às quais o símbolo se aplica são indicadas por subscritos. A força termoelétrica é uma diferença de potencial elétrico induzida por um gradiente de potencial químico.
- (19) Densidades de número específicas são indicadas por subscritos: para elétrons $n_n, n_-, (n)$; para buracos (lacunas), $n_p, n_+, (p)$; para doadores, n_d ; para aceitadores n_a ; para a densidade de número intrínseca $n_i (n_i^2 = n_+n_-)$.
- (20) A unidade habitualmente utilizada para esta grandeza é eV. μ é o potencial químico por entidade.
- (21) E_∞ é a energia do elétron em repouso a uma distância infinita [71].
- (22) \mathbf{k} é usado para partículas, \mathbf{q} para fônon (Port.: fonões). Aqui, λ é o comprimento de onda.
- (23) $\psi(\mathbf{r})$ é a função de onda de um elétron.
- (24) A densidade de carga total é obtida somando-se sobre o número total de elétrons.
- (25) Subscritos n e p ou - e + podem ser adicionados para indicar elétrons e buracos (lacunas), respectivamente.
- (26) j é a densidade de fluxo de partículas. D é o coeficiente de difusão e τ o tempo de vida.

2.9 Termodinâmica estatística

Os nomes e símbolos aqui apresentados estão em concordância com os recomendados pela IUPAP [4] e pela ISO [5.h].

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
número de entidades	N			1
densidade de número de entidades, concentração de número	C	$C = N/V$	m^{-3}	
constante de Avogadro	L, N_A	$L = N/n$	mol^{-1}	1
constante de Boltzmann	k, k_B		J K^{-1}	
constante dos gases (molar)	R	$R = Lk$	$\text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$	
vetor posição molecular	$\mathbf{r}(x, y, z)$			m
vetor velocidade molecular	$\mathbf{c}(c_x, c_y, c_z),$ $\mathbf{u}(u_x, u_y, u_z),$ $\mathbf{v}(v_x, v_y, v_z)$	$\mathbf{c} = d\mathbf{r}/dt$		m s^{-1}
vetor momento molecular	$\mathbf{p}(p_x, p_y, p_z)$	$\mathbf{p} = m\mathbf{c}$	kg m s^{-1}	2
função distribuição de velocidade	$f(c_x)$	$f = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} \times \exp \left(-\frac{mc_x^2}{2kT} \right)$	$\text{m}^{-1} \text{ s}$	2
função distribuição de velocidades	$F(c)$	$F = 4\pi c^2 \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \times \exp \left(-\frac{mc^2}{2kT} \right)$	$\text{m}^{-1} \text{ s}$	2
velocidade média	$\bar{c}, \bar{u}, \bar{v},$ $\langle c \rangle, \langle u \rangle, \langle v \rangle$	$\bar{c} = \int c F(c) dc$	m s^{-1}	
coordenada generalizada	q		(varia)	3
momento generalizado	p	$p = \partial L / \partial \dot{q}$	(varia)	3
volume no espaço de fase	Ω	$\Omega = (1/h) \int p dq$		1
probabilidade	P, p			1
peso estatístico, degenerescência	g, d, W, ω, β			1 4
número (cumulativo) de estados	W, N	$W(E) = \sum_i H(E - E_i)$		1 5, 6
densidade de estados	$\rho(E)$	$\rho(E) = dW(E)/dE$	J^{-1}	
função de partição, soma de todos os estados,				
molécula simples	q, z	$q = \sum_i g_i \exp(-E_i/kT)$		1 6

(1) n é a **quantidade de substância** (ou a quantidade química). Enquanto o símbolo N_A é usado em homenagem a Amedeo Avogadro, o símbolo L é usado em homenagem a Josef Loschmidt.

(2) m é a massa da partícula.

(3) Se q é um comprimento, então p é um momento. Na definição de p , L indica o lagrangiano.

(4) β é algumas vezes usado para indicar um peso estatístico de spin e a degenerescência é também chamada politropia. É o número de **autofunções** linearmente independentes para a mesma energia.

(5) $H(x)$ é a função de Heaviside (vide a Secção 4.2, p. 111), W ou $W(E)$ é o número total de estados quânticos com energia menor que E .

(6) E_i representa a energia do i -ésimo nível de uma molécula ou do sistema quântico considerado e g_i representa a sua degenerescência.

Nome	Símbolo	Definição	Unidades SI	Notas
ensemble canônico (<i>Port.</i> : canônico , sistema ou conjunto)	Q, Z	$Q = \sum_i g_i \exp(-E_i/kT)$	1	6
ensemble microcanônico função de partição, soma de estados, ensemble grande canônico	Ω, z, Z	$Z = \sum_{i=1}^Z 1$	1	
número de simetria	σ, s		1	
parâmetro do recíproco da energia para substituir a temperatura	β	$\beta = 1/kT$	J^{-1}	
temperatura característica	Θ, θ		K	7
atividade absoluta	λ	$\lambda_B = \exp(\mu_B/RT)$	1	8
operador densidade	$\hat{\rho}, \hat{\sigma}$	$\hat{\rho} = \sum_k p_k \Psi_k\rangle \langle \Psi_k $	1	9
matriz de densidade	\mathbf{P}, ρ	$\mathbf{P} = \{P_{mn}\}$	1	10
elemento da entropia estatística	P_{mn}, ρ_{mn}	$P_{mn} = \langle \phi_m \hat{\rho} \phi_n \rangle$	1	10
	S	$S = -k \sum_i p_i \ln p_i$	$J K^{-1}$	11

(7) Temperaturas características particulares são indicadas pelo uso de subscritos, por exemplo: rotacional $\Theta_r = hc\tilde{B}/k$, vibracional $\Theta_v = hc\tilde{\nu}/k$, de Debye $\Theta_D = hc\tilde{\nu}_D/k$, de Einstein $\Theta_E = hc\tilde{\nu}_E/k$. Θ deve ser preferido em vez de θ para evitar confusão com a temperatura Celsius.

(8) A definição aplica-se a entidades B. μ_B é o potencial químico (vide Secção 2.11, p. 61).

(9) $|\Psi_k\rangle$ refere-se ao estado quântico k do sistema e p_k à probabilidade deste estado num ensemble. Se $p_k = 1$ para um dado estado k , então temos um estado puro, caso contrário uma mistura.

(10) A matriz de densidade \mathbf{P} é definida pelos seus elementos de matriz P_{mn} num conjunto de estados de base ϕ_m . Alternativamente, pode-se escrever $P_{mn} = \sum_k p_k c_m^{(k)} c_m^{(k)*}$, onde $c_m^{(k)}$ é o coeficiente (complexo) de ϕ_m na expansão de $|\Psi_k\rangle$ nos estados de base $\{\phi_i\}$.

(11) Na expressão para a entropia estatística, k é a constante de Boltzmann e p_i é a população média ou probabilidade média para um nível quântico. A entropia no equilíbrio (máxima) para um conjunto microcanônico resulta em $S = k \ln Z$. Para além do microcanônico, podem ser ainda definidos vários outros ensembles, como o canônico e o grande canônico.

2.10 Química Geral

Os símbolos dados pela IUPAP [4] e pela ISO [5.d,5.h] estão de acordo com as recomendações que a seguir se indicam.

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
número de entidades (e.g. moléculas, átomos, íons, fórmulas unitárias)	N		1	
quantidade de substância, quantidade (quantidade química)	n	$n_B = N_B/L$	mol	1, 2
constante de Avogadro	L, N_A		mol^{-1}	3
massa de um átomo, massa atômica	m_a, m		kg	
massa de uma entidade (molécula, fórmula unitária)	m, m_f		kg	4
constante de massa atômica	m_u	$m_u = m_a(^{12}\text{C})/12$	kg	5
massa molar	M	$M_B = m/n_B$	kg mol^{-1}	2, 6, 7
constante de massa molar	M_u	$M_u = m_u N_A$	g mol^{-1}	7, 8
massa molecular relativa, (massa molar relativa, peso molecular)	M_r	$M_r = m_f/m_u$	1	8
massa atômica relativa (peso atômico)	A_r	$A_r = m_a/m_u$	1	8
volume molar	V_m	$V_{m,B} = V/n_B$	$\text{m}^3 \text{ mol}^{-1}$	2, 6, 7
fração mássica	w	$w_B = m_B/\sum_i m_i$	1	2

(1) As palavras “de substância” podem ser substituídas pela especificação da entidade, *e.g.*, “quantidade de átomos de oxigênio (*Port.:* oxigénio)” ou “quantidade de oxigênio (ou dioxigênio, O_2)”. Note que “quantidade de oxigênio” é ambígua e deve ser usada somente se o significado for claro a partir do contexto (vide também a discussão na Secção 2.10.1 (v), p. 57).

Exemplo Quando a quantidade de O_2 é igual a 3 mol, $n(\text{O}_2) = 3$ mol, a quantidade de $(1/2) \text{O}_2$ é igual a 6 mol, e $n((1/2) \text{O}_2) = 6$ mol. Portanto, $n((1/2) \text{O}_2) = 2n(\text{O}_2)$.

(2) A definição é aplicada a entidades B, as quais devem ser sempre indicadas por um subscrito ou em parênteses, *e.g.* n_B ou $n(B)$. Quando a composição química é escrita, devem ser usados parênteses, $n(\text{O}_2)$.

(3) O símbolo N_A é usado em homenagem a Amedeo Avogadro, o símbolo L é usado em homenagem a Josef Loschmidt.

(4) Note que “fórmula unitária” não é uma unidade (vide exemplos na Secção 2.10.1 (iii), p. 54).

(5) m_u é igual à unidade de massa atômica unificada, com símbolo u, *i.e.*, $m_u = 1$ u (vide Secção 3.7, p. 96). O dalton, símbolo Da, é usado como uma designação alternativa para a unidade de massa atômica unificada.

(6) A definição é aplicada a uma substância pura, onde m é a massa total e V é o volume total. No entanto, grandezas com caráter similar podem ser definidas também para uma mistura como m/n e V/n , onde $n = \sum_i n_i$. Estas grandezas são denominadas massa molar média e volume molar médio, respectivamente.

(7) Nestas designações, que incluem a palavra “molar”, infelizmente usa-se o nome de uma *unidade* na descrição de uma *grandeza*, o que em princípio deveria ser evitado.

(8) Por razões históricas, os termos “peso molecular” e “peso atômico” ainda são usados. Para moléculas, M_r é a massa molecular relativa ou “peso molecular”. Para átomos, M_r é a massa atômica relativa ou “peso atômico”, e pode usar-se o símbolo A_r . M_r também pode ser designada massa molar relativa, $M_{r,B} = M_B/M_u$, onde $M_u = 1 \text{ g mol}^{-1}$. Os pesos atómicos padrão estão listados na Secção 6.2, p. 121.

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
fração volúmica	ϕ	$\phi_B = V_B / \sum_i V_i$	1	2, 9
fração da quantidade de substância, fração molar, fração da quantidade	x, y	$x_B = n_B / \sum_i n_i$	1	2, 10
pressão (total)	$p, (P)$		Pa	2, 11
pressão parcial	p_B	$p_B = y_B p$	Pa	12
concentração de massa, (densidade de massa)	γ, ρ	$\gamma_B = m_B/V$	kg m^{-3}	2, 13, 14
concentração de número, densidade de número de entidades	C, n	$C_B = N_B/V$	m^{-3}	2, 13, 15
concentração de quantidade, concentração	$c, [B]$	$c_B = n_B/V$	mol m^{-3}	2, 13, 16
solubilidade	s	$s_B = c_B$ (solução saturada)	mol m^{-3}	2, 17
molalidade	m, b	$m_B = n_B/m_A$	mol kg^{-1}	2, 7, 14
concentração superficial	Γ	$\Gamma_B = n_B/A$	mol m^{-2}	2, 18
coeficiente estequiométrico	ν		1	19
extensão da reação, avanço	ξ	$\xi = (n_B - n_{B,0})/\nu_B$	mol	19
grau de reação	α	$\alpha = \xi/\xi_{\max}$	1	20

(9) Aqui, V_B e V_i são os volumes dos componentes apropriados antes da mistura. Como são possíveis outras definições, *e.g.* ISO 31 [5], o termo não deve ser usado em trabalhos precisos sem explicitar a definição.

(10) Para fases condensadas, usa-se x , e para misturas gasosas, pode usar-se y [72].

(11) A pressão é frequentemente expressa na unidade fora do SI bar, onde 1 bar = 10^5 Pa. A pressão padrão $p^\ominus = 1$ bar = 10^5 Pa (vide Secção 2.11.1 (v), p. 66, Secção 7.2, p. 144 e a tabela de conversão na p. 249). A pressão é muitas vezes também expressa em milibar ou hectopascal, sendo que 1 mbar = 10^{-3} bar = 100 Pa = 1 hPa.

(12) O símbolo e a definição aplicam-se a moléculas B, que devem ser especificadas. Para gases reais (não ideais), deve ter-se o cuidado de definir a pressão parcial.

(13) V é o volume da mistura. Grandezas que descrevem a composição de misturas podem ser encontradas em [72].

(14) Nesta definição, o símbolo m é usado com dois significados diferentes: m_B denota a *molalidade* do soluto B, m_A denota a *massa* do solvente A (daí a unidade mol kg^{-1}). Esta confusão de notação é evitada usando o símbolo b para a molalidade. Ocionalmente, uma solução de molalidade 1 mol kg^{-1} é denominada de solução 1 molal, denotada solução 1 m. No entanto, o símbolo m não deve ser tratado como um símbolo para a unidade mol kg^{-1} em combinação com outras unidades.

(15) O termo concentração de número e o símbolo C são preferidos para misturas. Deve-se tomar o cuidado de não usar o símbolo n onde ele possa ser erroneamente interpretado como denotando *quantidade de substância*.

(16) “Concentração de quantidade” é uma forma abreviada de “concentração de *quantidade de substância*”. (A Divisão de Química Clínica da IUPAC recomenda que concentração de *quantidade de substância* seja abreviada para “concentração de *substância*” [14, 73].) A palavra “concentração” é normalmente usada sozinha sempre que não haja risco de confusão, como em conjunção com o nome (ou símbolo) de uma substância química, ou como contraponto à molalidade (vide Secção 2.13, p. 74). Em Ciência dos Polímeros, a palavra “concentração” e o símbolo c são normalmente usados para concentração de massa. Na literatura mais antiga, esta grandeza era muitas vezes chamada *molaridade*, o que deve ser evitado devido ao risco de confusão com a grandeza *molalidade*. As unidades comumente usadas para concentração de quantidade são mol L^{-1} (ou mol dm^{-3}), mmol L^{-1} , $\mu\text{mol L}^{-1}$ etc., representadas, muitas vezes, por M, mM, μM etc. (pronunciadas molar, milimolar, micromolar etc.). Daí que M seja, com frequência, tratado como um símbolo para mol L^{-1} .

2.10.1 Outros símbolos e convenções em Química

(i) Símbolos dos elementos químicos

Os símbolos dos elementos químicos são (na maioria dos casos) derivados de seus nomes latinos e consistem de uma ou mais letras, as quais devem ser impressas sempre em tipo romano (na vertical). Uma lista completa é fornecida na Secção 6.2, p. 121. O símbolo não é seguido de um ponto final, exceto no final de uma frase.

Exemplos I, U, Pa, C

Os símbolos têm dois significados diferentes (o que também se reflete no seu uso em fórmulas e equações químicas):

(a) A nível *microscópico*, podem representar um átomo do elemento. Por exemplo, Cu representa um átomo de cobre com 29 **prótons** e 34 ou 36 **nêutrons** (resultando num número de massa de 63 ou 65), diferença que é ignorada. A sua massa é em média 63,546 u em amostras terrestres.

(b) A nível *macroscópico*, representam uma amostra da substância simples do elemento (*Port.*: **amostra do elemento**). Por exemplo, Fe representa uma amostra de ferro, e He uma amostra do gás hélio. Os símbolos também podem ser usados como uma forma abreviada de representar o elemento: “Fe é um dos elementos mais comuns na crosta da Terra.”

O termo *nuclídeo* implica um átomo de número **atômico** (número de **prótons**) e número de massa (número de **núcleons** (*Port.*: **nucleões**)) especificados. Um nuclídeo pode ser especificado adicionando o número de massa como sobrescrito à esquerda do *símbolo* do elemento, como em ^{14}C , ou escrevendo-o após o *nome* do elemento, como em carbono-14. Nuclídeos que têm o mesmo número **atômico** mas números de massa diferentes são denominados de nuclídeos isotópicos ou *isótopos*, como em ^{12}C , ^{14}C . Se não há qualquer sobrescrito à esquerda, o símbolo é interpretado como incluindo todos os isótopos na abundância natural: $n(\text{Cl}) = n(^{35}\text{Cl}) + n(^{37}\text{Cl})$. Nuclídeos que têm o mesmo número de massa mas números **atômicos** diferentes são denominados de nuclídeos isobáricos ou *isóbaros*: ^{14}C , ^{14}N . O número **atômico** pode ser indicado por um subscrito à esquerda: $^{14}_{\text{6}}\text{C}$, $^{14}_{\text{7}}\text{N}$. O número de carga de um **íon** é representado por um sobrescrito à direita, apenas pelo sinal quando o número de carga é igual a mais um ou menos um.

<i>Exemplos</i>	Na^+	um íon sódio positivo (cátion (<i>Port.</i> : catião))
	$^{79}\text{Br}^-$	um íon bromo-79 negativo (ânion (<i>Port.</i> : anião), íon brometo)
	Al^{3+} ou Al^{+3}	um íon alumínio triplamente positivo
	3S^{2-} ou 3S^{-2}	três íons enxofre duplamente negativos (íons sulfeto)

Al^{3+} é comumente usado em Química e recomendado por [74]. As formas Al^{+3} e S^{-2} , embora amplamente usadas, são obsoletas [74], bem como a antiga notação Al^{+++} , S^{--} .

(Continuação das notas)

(17) A solubilidade também pode ser expressa em quaisquer unidades correspondentes a grandezas que denotam composição relativa, tais como fração mássica, fração da quantidade, molalidade, fração volémica, etc.

(18) A denota a área superficial (de superfície).

(19) O coeficiente estequiométrico é definido por meio da equação estequiométrica. É negativo para reagentes e positivo para produtos. Os valores dos coeficientes estequiométricos dependem de como a equação da reação é escrita (vide Secção 2.10.1 (iv), p. 56). $n_{\text{B},0}$ denota o valor de n_{B} no “tempo zero”, quando $\xi = 0$ mol.

(20) ξ_{max} é o valor de ξ quando pelo menos um dos reagentes foi consumido por completo. Para reações específicas, são usados frequentemente termos como “grau de dissociação”, “grau de ionização”, etc.

Um sobrescrito à direita também é usado para dar outras informações. Estados eletrônicos excitados podem ser denotados por um asterisco.

Exemplos H*, Cl*

Os números de oxidação são representados por algarismos romanos positivos ou negativos ou por zero (vide também Secção 2.10.1 (iv), p. 56).

Exemplos Mn^{VII}, manganês(VII), O^{-II}, Ni⁰

A posição e o significado de índices em torno do símbolo de um elemento são resumidos como se segue:

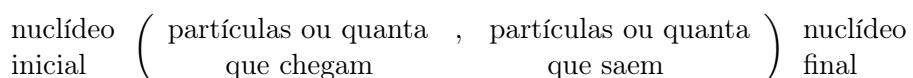
sobrescrito à esquerda	número de massa
subscrito à esquerda	número atômico
sobrescrito à direita	número de carga, número de oxidação, excitação
subscrito à direita	número de átomos por entidade (vide Secção 2.10.1 (iii) abaixo)

(ii) Símbolos para partículas e reações nucleares

próton	p, p ⁺	pósitron (Port.: positrão)	e ⁺ , β ⁺	trítón (Port.: tritão)	t
antípróton (Port.: antiprotão)	bar p	múon positivo	μ ⁺	hélon	h (³ He ²⁺)
nêutron (Port.: antineutrão)	n	múon negativo	μ ⁻	partícula α	α (⁴ He ²⁺)
antineutrão (Port.: neutrônio)	bar n	fóton	γ	neutrino do elétron	ν _e
elétron	e, e ⁻ , β ⁻	dêuteron (Port.: deuterão)	d	antineutrino do elétron	bar ν _e

Os símbolos de partículas são impressos em tipo romano (na vertical) (mas vide Capítulo 6, p. 117). A carga elétrica de partículas pode ser indicada adicionando-se o sobrescrito +, -, ou 0; *e.g.*, p⁺, n⁰, e⁻ etc. Se os símbolos p e e são usados sem carga, referem-se ao próton positivo e elétron negativo, respectivamente. Um resumo das designações recomendadas para átomos de muônio (Port.: muónio) e hidrogênio e seus íons pode ser encontrado em [75].

O significado da expressão simbólica que indica uma reação nuclear deve ser como se segue:



Exemplos ¹⁴N(α, p)¹⁷O, ⁵⁹Co(n, γ)⁶⁰Co, ²³Na(γ, 3n)²⁰Na, ³¹P(γ, pn)²⁹Si

Também se pode usar a notação padrão da Cinética (vide Secção 2.12, p. 67).

Exemplos ¹⁴₇N + α → ¹⁷₈O + p, n → p + e + bar ν_e

(iii) Fórmulas químicas

Como no caso dos símbolos químicos dos elementos, as fórmulas químicas têm dois significados diferentes:

(a) A nível *microscópico*, representam um átomo, uma molécula, um íon, um radical, etc. O número de átomos numa entidade (sempre um inteiro) é indicado por um subscrito à direita, omitindo-se o numeral 1. Grupos de átomos podem ser inseridos entre parênteses. Os números de carga de íons e os símbolos que descrevem os estados excitados são adicionados como sobrescritos à direita da fórmula. A natureza radicalar de uma entidade pode ser expressa adicionando-se um ponto ao símbolo. A nomenclatura para radicais, íons, íons-radicais e espécies relacionadas está descrita em [76, 77].

<i>Exemplos</i>	Xe, N ₂ , C ₆ H ₆ , Na ⁺ , SO ₄ ²⁻
	(CH ₃) ₃ COH (uma molécula de 2-metil-2-propanol)
	NO ₂ [*] (uma molécula excitada de dióxido de nitrogênio (<i>Port.</i> : azoto))
	NO (uma molécula de óxido de nitrogênio)
	NO [•] (uma molécula de óxido de nitrogênio, destacando o seu caráter de radical livre)

Ao escrever a fórmula de um **íon** complexo, pode introduzir-se um espaçamento antes do seu número de carga (em arranjo escalonado), ou usar parênteses: SO₄²⁻, (SO₄)²⁻. Atualmente recomenda-se o arranjo escalonado [74].

Os estados **eletrônicos** específicos de entidades (átomos, moléculas, **íons**) podem ser representados escrevendo o símbolo do termo **eletrônico** (vide Secção 2.6.3, p. 35) em parênteses. Os estados vibracionais e rotacionais podem ser especificados pelos correspondentes números quânticos (vide Secção 2.6, p. 27 e 36).

<i>Exemplos</i>	Hg(³ P ₁)	um átomo de mercúrio no estado tripleno P 1
	HF(<i>v</i> = 2, <i>J</i> = 6)	uma molécula de fluoreto de hidrogênio no estado vibracional <i>v</i> = 2 e no estado rotacional <i>J</i> = 6
	H ₂ O ⁺ (² A ₁)	um íon da molécula de água no estado duplo (ou dublet) A 1

(b) A nível *macroscópico*, uma fórmula denota uma amostra de uma substância química (não necessariamente estável, ou capaz de existir de forma isolada). A composição química é denotada por subscritos à direita (não necessariamente inteiros; o numeral 1 é omitido). Uma “fórmula unitária” (que *não* é uma unidade de uma grandeza!) é uma entidade especificada como um grupo de átomos (vide (iv) e (v) abaixo).

Exemplos Na, Na⁺, NaCl, Fe_{0,91}S, XePtF₆, NaCl

A fórmula pode ser usada em expressões como $\rho(\text{H}_2\text{SO}_4)$, densidade de massa de ácido sulfúrico. Quando se especifica uma **quantidade de substância**, frequentemente a fórmula é multiplicada por um fator, normalmente um inteiro pequeno ou uma fração, vide exemplos em (iv) e (v). Menos formalmente, a fórmula é frequentemente usada como uma descrição abreviada (“reagindo com H₂SO₄”). As fórmulas químicas podem ser escritas de diferentes maneiras, tendo em conta a informação que transmitem [15, 74, 78, 79]:

<i>Fórmula</i>	<i>Informação transmitida</i>	<i>Exemplo</i>	<i>Notas</i>
empírica	somente proporção estequiométrica	CH ₂ O	1
molecular	de acordo com a massa molecular	C ₃ H ₆ O ₃	
estrutural	arranjo estrutural de átomos	CH ₃ CH(OH)COOH	1
de conectividade	conectividade	$ \begin{array}{ccccc} & & & \text{O} & \\ & & & \diagdown & \\ & & \text{H} & & \text{OH} \\ & & & & / \\ \text{H} & - \text{C} & - \text{C} & - \text{C} & \diagup \\ & & & & \text{OH} \\ & & \text{H} & & \end{array} $	2

(1) Moléculas que diferem somente na composição isotópica são denominadas **isotopômeras** (*Port.*: **isotopómeras**) ou **isotopólogas**. Por exemplo, CH₂O, CHDO, CD₂O e CH₂¹⁷O são todas isotopômeras ou isotopólogas da molécula de formaldeído. Foi sugerido [16] que se reserve o termo **isotopômeras** para moléculas com a mesma composição isotópica mas com estrutura diferente, tais como CD₃CH(OH)COOH e CH₃CD(OD)COOD, para o que também se usa **isômero** (*Port.*: **isómero**) isotópico.

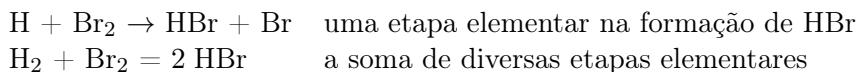
(2) As linhas nas fórmulas de conectividade, estereoquímica, ou de estrutura de ressonância representam ligações simples, duplas ou triplas. Também são usadas para representar pares isolados de **elétrons** (ligação monovalente).

Fórmula	Informação transmitida	Exemplo	Notas
estereoquímica	configuração estereoquímica		2
	projecção de Fischer		3
estrutura de ressonância	arranjo eletrônico		2, 4

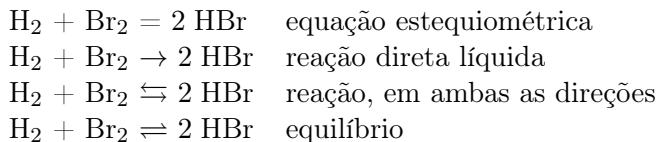
- (3) Na projecção de Fischer, os substituintes horizontais são interpretados como acima do plano do papel, enquanto os substituintes verticais são interpretados como estando atrás do plano do papel.
 (4) A seta dupla representa o arranjo de **elétrons** de valênci a em estruturas de ressonância, tais como benzeno C₆H₆, e não denota uma equação de uma reação (vide Secção 2.10.1 (iv), nesta página).

(iv) Equações para reações químicas

(a) A nível *microscópico*, a equação de uma reação representa uma reação elementar (um evento envolvendo átomos, moléculas e radicais isolados) ou a soma de um conjunto de tais reações. Os coeficientes estequiométricos são ±1 (às vezes ±2). Uma seta simples é usada para associar reagentes e produtos numa reação elementar. Um sinal de igual é usado para a reação “líquida”, o resultado de um conjunto de reações elementares (vide Secção 2.12.1, p. 72).



(b) A nível *macroscópico*, símbolos diferentes são usados para associar os reagentes e os produtos na equação de uma reação, com os seguintes significados:



A seta dupla ↔ não deve ser usada para reações, evitando-se, assim, confusão com estruturas de ressonância (vide Secção 2.10.1 (iii), p. 54).

Os coeficientes estequiométricos não são únicos. Uma mesma reacão pode ser expressa de diferentes maneiras (sem qualquer mudança de significado).

Exemplos A formação de brometo de hidrogênio a partir das substâncias simples pode ser escrita corretamente de qualquer um dos modos seguintes

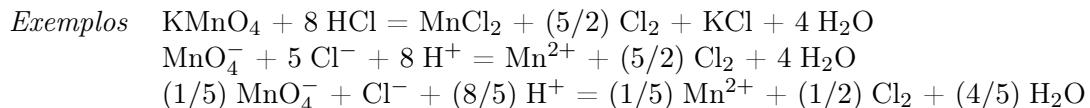
$$(1/2) \text{H}_2 + (1/2) \text{Br}_2 = \text{HBr}$$

$$\text{H}_2 + \text{Br}_2 = 2 \text{ HBr}$$

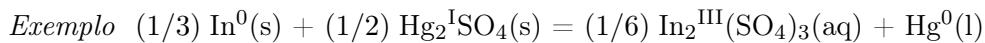
Ions que não participam numa reacão (“**ions** espectadores”) são frequentemente removidos das equações. As equações redox são muitas vezes escritas de modo que o valor do coeficiente estequiométrico para os **elétrons** transferidos (que normalmente são omitidos da equação global) seja igual a ±1.

Exemplo $(1/5) \text{KMn}^{\text{VII}}\text{O}_4 + (8/5) \text{HCl} = (1/5) \text{Mn}^{\text{II}}\text{Cl}_2 + (1/2) \text{Cl}_2 + (1/5) \text{KCl} + (4/5) \text{H}_2\text{O}$

A oxidação de cloreto por permanganato em solução ácida pode, portanto, ser representada de diversas maneiras (igualmente corretas).



De igual forma, uma reação numa célula eletroquímica pode ser escrita de modo que o número de **elétrons** da reação de célula eletroquímica, z , (vide Secção 2.13, p. 75) seja igual a um:

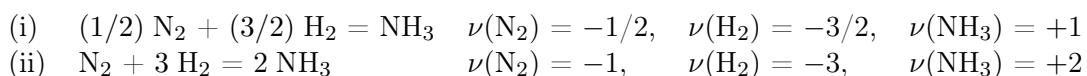


onde os símbolos entre parênteses denotam o estado de agregação (vide Secção 2.10.1 (vi), p. 58).

Notação Simbólica: Uma equação química geral pode ser escrita como

$$0 = \sum_j \nu_j \text{B}_j$$

onde B_j denota uma espécie reacional e ν_j o correspondente coeficiente estequiométrico (negativo, para reagentes, e positivo, para produtos). A síntese de amoníaco é corretamente representada das duas formas seguintes:



As mudanças $\Delta n_j = n_j - n_{j,0}$ nas quantidades de quaisquer reagentes e produtos j durante a ocorrência da reação são controladas por um parâmetro, a extensão da reação ξ , através da equação

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

A extensão da reação depende de como a reação é escrita, mas é independente da entidade usada na definição. Assim, para a reação (i), quando $\xi = 2$ mol, então $\Delta n(\text{N}_2) = -1$ mol, $\Delta n(\text{H}_2) = -3$ mol e $\Delta n(\text{NH}_3) = +2$ mol. Para a reação (ii), quando $\Delta n(\text{N}_2) = -1$ mol, então $\xi = 1$ mol.

Notação Matricial: Para sistemas multirreacionais, é conveniente escrever as equações químicas na forma de matriz

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

onde \mathbf{A} é a matriz de conservação (ou de fórmula), cujos elementos A_{ij} representam o número de átomos do i -ésimo elemento na j -ésima espécie reacional (entidade reagente ou produto) e $\boldsymbol{\nu}$ é a matriz de coeficientes estequiométricos, cujos elementos ν_{jk} são os coeficientes estequiométricos das j -ésimas espécies reacionais na k -ésima reação. Quando existem N_s espécies reagentes envolvidas num sistema constituído por N_e elementos, \mathbf{A} torna-se uma matriz $N_e \times N_s$. A sua nulidade, $N(\mathbf{A}) = N_s - \text{posto}(\mathbf{A})$, corresponde ao número de reações químicas independentes, N_r , e a matriz de coeficientes estequiométricos $N_s \times N_r$, $\boldsymbol{\nu}$, pode ser determinada como o espaço nulo de \mathbf{A} . $\mathbf{0}$ é uma matriz nula $N_e \times N_r$ [80].

(v) Quantidade de substância e a especificação de entidades

A grandeza “quantidade de substância” ou “quantidade química” (“Stoffmenge” em Alemão, “quantité de matière” em Francês) vem sendo usada pelos químicos, já há muito tempo, sem uma designação adequada. Tradicionalmente era simplesmente referida como o “número de moles”. Esta prática deve ser abandonada: a designação de uma grandeza física não deve conter o nome de uma unidade (poucos usariam “número de metros” como um sinônimo (*Port.*: sinónimo) para “comprimento”).

A quantidade de uma dada substância é proporcional ao número de entidades elementares especificadas daquela substância; a constante de proporcionalidade é a mesma para todas as substâncias,

sendo o inverso da constante de Avogadro. As entidades elementares podem ser escolhidas como for conveniente, não sendo necessariamente partículas individuais fisicamente reais. Nos exemplos abaixo, $(1/2) \text{Cl}_2$, $(1/5) \text{KMnO}_4$, etc., são artificiais no sentido em que nenhuma destas entidades elementares existe. Visto que a **quantidade de substância** e todas as grandezas físicas dela derivadas dependem desta escolha, é essencial especificar as entidades para evitar ambiguidades.

<i>Exemplos</i>	n_{Cl} , $n(\text{Cl})$	quantidade de Cl, quantidade de átomos de cloro
	$n(\text{Cl}_2)$	quantidade de Cl_2 , quantidade de moléculas de cloro
	$n(\text{H}_2\text{SO}_4)$	quantidade de (entidades) H_2SO_4
	$n((1/5) \text{KMnO}_4)$	quantidade de (entidades) $(1/5) \text{KMnO}_4$
	$M(\text{P}_4)$	massa molar de tetrafósforo P_4
	$c_{\text{Cl}^-}, c(\text{Cl}^-), [\text{Cl}^-]$	concentração de quantidade de Cl^-
	$\rho(\text{H}_2\text{SO}_4)$	densidade de massa de ácido sulfúrico
	$\Lambda(\text{MgSO}_4)$	condutividade molar de (entidades de) MgSO_4
	$\Lambda((1/2) \text{MgSO}_4)$	condutividade molar de (entidades de) $(1/2) \text{MgSO}_4$
	$\lambda(\text{Mg}^{2+})$	condutividade iônica de (entidades de) Mg^{2+}
	$\lambda((1/2) \text{Mg}^{2+})$	condutividade iônica de (entidades de) $(1/2) \text{Mg}^{2+}$

Usando as definições de diversas grandezas, podemos derivar equações como

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

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

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

(Vide também exemplos na Secção 3.3, p. 92.)

Note que “quantidade de enxofre” é uma afirmação ambígua, porque pode implicar $n(\text{S})$, $n(\text{S}_8)$, ou $n(\text{S}_2)$, etc. Na maioria dos casos, afirmações análogas são menos ambíguas. Assim, para compostos, a entidade implícita é, habitualmente, a molécula ou a fórmula unitária comum, e para metais sólidos é o átomo.

<i>Exemplos</i>	“2 mol de água” implica $n(\text{H}_2\text{O}) = 2 \text{ mol}$
	“0,5 mol de cloreto de sódio” implica $n(\text{NaCl}) = 0,5 \text{ mol}$
	“3 mmol de ferro” implica $n(\text{Fe}) = 3 \text{ mmol}$

Tais expressões devem ser evitadas sempre que possa haver ambiguidade.

Na equação $pV = nRT$ e em equações que envolvem propriedades coligativas, a entidade implicada na definição de n deve ser uma partícula com capacidade de translação independente (para um gás, uma molécula completa), cuja natureza não é importante. Grandezas que descrevem a composição de misturas podem ser encontradas em [72].

(vi) Estados de agregação

Os símbolos seguintes de uma, duas ou três letras são usados para representar os estados de agregação de espécies químicas [1.j]. As letras são apensas ao símbolo da fórmula entre parênteses, e devem ser impressas em tipo romano (na vertical) sem ponto final.

a, ads	espécie adsorvida sobre uma superfície	l	líquido
am	sólido amorfo	lc	cristal líquido
aq	solução aquosa	mon	forma monomérica
aq, ∞	solução aquosa infinitamente diluída	n	fase nemática
cd	fase condensada (<i>i.e.</i> , sólido ou líquido)	pol	forma polimérica
cr	cristalino	s	sólido
f	fase fluida (<i>i.e.</i> , gás ou líquido)	sln	solução
g	gás ou vapor	vit	substância vítreia

<i>Exemplos</i>	$HCl(g)$	cloreto de hidrogênio no estado gasoso	
	$C_V(f)$	capacidade calorífica de um fluido a volume constante	
	$V_m(lc)$	volume molar de um cristal líquido	
	$U(cr)$	energia interna de um sólido cristalino	
	$MnO_2(am)$	dióxido de manganês como um sólido amorfo	Os
	$MnO_2(cr, I)$	dióxido de manganês como cristal na forma I	
	$NaOH(aq)$	solução aquosa de hidróxido de sódio	
	$NaOH(aq, \infty)$	solução aquosa de hidróxido de sódio infinitamente diluída	
	$\Delta_f H^\circ(H_2O, l)$	entalpia de formação padrão da água líquida	

símbolos g, l, etc., que denotam fase gasosa, fase líquida, etc., às vezes também são usados como um sobrescrito à direita, e os símbolos em letra grega α , β , etc. podem ser, do mesmo modo, usados para denotar a fase α , a fase β , etc. numa notação geral.

Exemplos V_m^l , V_m^s volume molar da fase líquida, volume molar da fase sólida
 S_m^α , S_m^β entropia molar da fase α , volume molar da fase β

2.11 Termodinâmica Química

Os nomes e símbolos das grandezas mais utilizadas, aqui apresentados, estão em concordância com as recomendações da IUPAP [4] e da ISO [5.d,5.h]. Informações adicionais podem ser encontradas em [1.d,1.j] e [81].

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Definição</i>	<i>Unidade SI</i>	<i>Notas</i>
calor	Q, q		J	1
trabalho	W, w		J	1
energia interna	U	$dU = \delta Q + \delta W$	J	1
entalpia	H	$H = U + pV$	J	
temperatura termodinâmica	$T, (\Theta)$		K	
temperatura internacional	T_{90}		K	2
temperatura Celsius	θ, t	$\theta/^\circ\text{C} = T/\text{K} - 273,15$	°C	3
entropia	S	$dS = \delta Q_{\text{rev}}/T$	J K^{-1}	
energia de Helmholtz, (função de Helmholtz)	A, F	$A = U - TS$	J	4
energia de Gibbs, (função de Gibbs)	G	$G = H - TS$	J	
função de Massieu	J	$J = -A/T$	J K^{-1}	
função de Planck	Y	$Y = -G/T$	J K^{-1}	
tensão superficial	γ, σ	$\gamma = (\partial G/\partial A_s)_{T,p,n_i}$	$\text{J m}^{-2}, \text{N m}^{-1}$	
grandeza molar X	$X_m, (\bar{X})$	$X_m = X/n$	[X]/mol	5, 6
grandeza específica X	x	$x = X/m$	[X]/kg	5, 6
coeficiente de pressão	β	$\beta = (\partial p/\partial T)_V$	Pa K^{-1}	
coeficiente de pressão relativa	α_p	$\alpha_p = (1/p)(\partial p/\partial T)_V$	K^{-1}	
compressibilidade,				
isotérmica	κ_T	$\kappa_T = -(1/V)(\partial V/\partial p)_T$	Pa^{-1}	
isentrópica	κ_S	$\kappa_S = -(1/V)(\partial V/\partial p)_S$	Pa^{-1}	
coeficiente de expansão linear	α_l	$\alpha_l = (1/l)(\partial l/\partial T)$	K^{-1}	
coeficiente de expansão	α, α_V, γ	$\alpha = (1/V)(\partial V/\partial T)_p$	K^{-1}	7
volumétrica				
capacidade calorífica,				
a pressão constante	C_p	$C_p = (\partial H/\partial T)_p$	J K^{-1}	
a volume constante	C_V	$C_V = (\partial U/\partial T)_V$	J K^{-1}	
razão das capacidades caloríficas $\gamma, (\kappa)$	$\gamma = C_p/C_V$		1	

(1) Na forma diferencial, δ representa uma diferencial não exata (*Port:* um diferencial não exato). A equação dada na forma integral é $\Delta U = Q + W$. $Q > 0$ e $W > 0$ indicam um aumento da energia do sistema.

(2) Esta temperatura é definida pela “Escala Internacional de Temperatura de 1990 (ITS-90)” na qual se apresentam as definições específicas [82–84]. Contudo, a CIPM, na sua 94^a Reunião de Outubro de 2005, aprovou a Recomendação T3 (2005) da Comissão Consultiva de Termometria, na qual a ITS-90 passou a ser uma das várias “mises en pratique” da definição do kelvin. Este Relatório Técnico (2005) encontra-se disponível como o Doc. CCT_05_33 [85]. Trata da definição de composições isotópicas de referência do hidrogênio e da água, quando usadas para a concretização dos pontos fixos de referência das “mises en pratique”.

(3) Esta grandeza é, algumas vezes, indevidamente denominada “temperatura centígrada” ou “temperatura centesimal”.

(4) O símbolo F é, algumas vezes, usado para a energia de Helmholtz.

(5) Esta definição aplica-se a substâncias puras. No entanto, os conceitos de grandezas molares e específicas (vide Secção 1.4, p. 6) também podem ser aplicados a misturas. n é a **quantidade de substância** (vide Secção 2.10, notas 1 e 2, p. 51).

Nome	Símbolo	Definição	unidade SI	Notas
coeficiente de Joule-Thomson	μ, μ_{JT}	$\mu = (\partial T / \partial p)_H$	$K \text{ Pa}^{-1}$	
potência térmica	Φ, P	$\Phi = dQ/dt$	W	
coeficiente do virial, segundo	B	$pV_m = RT(1 + B/V_m + C/V_m^2 + \dots)$	$\text{m}^3 \text{ mol}^{-1}$	8
terceiro	C		$\text{m}^6 \text{ mol}^{-2}$	8
parâmetros da equação de van der Waals	a	$(p + a/V_m^2)(V_m - b) = RT$	$J \text{ m}^3 \text{ mol}^{-2}$	9
fator de compressão (fator de compressibilidade)	b		$\text{m}^3 \text{ mol}^{-1}$	9
grandeza molar parcial X	Z	$Z = pV_m/RT$	1	
potencial químico (energia de Gibbs molar parcial)	$X_B, (\bar{X}_B)$	$X_B = (\partial X / \partial n_B)_{T,p,n_j \neq B}$	$[X]/\text{mol}$	10
potencial químico padrão	μ	$\mu_B = (\partial G / \partial n_B)_{T,p,n_j \neq B}$	$J \text{ mol}^{-1}$	11
atividade absoluta	μ°, μ^\diamond		$J \text{ mol}^{-1}$	12
atividade (relativa)	λ	$\lambda_B = \exp(\mu_B/RT)$	1	11
	a	$a_B = \exp\left(\frac{\mu_B^\circ - \mu_B^\diamond}{RT}\right)$	1	11, 13
entalpia molar parcial padrão	H_B°	$H_B^\circ = \mu_B^\circ + TS_B^\circ$	$J \text{ mol}^{-1}$	11, 12
entropia molar parcial padrão	S_B°	$S_B^\circ = -(\partial \mu_B^\circ / \partial T)_p$	$J \text{ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$	11, 12

(Continuação das notas)

(6) X é uma grandeza extensiva, cuja unidade SI é $[X]$. No caso de grandezas molares as entidades devem ser especificadas.

Exemplo $V_{m,B} = V_m(B) = V/n_B$ representa o volume molar de B

(7) Esta grandeza também é chamada de coeficiente de expansão térmica ou coeficiente de expansibilidade.

(8) Um outro conjunto de “coeficientes do virial de pressão” pode ser definido por

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

(9) Para um gás que satisfaz a equação de estado de van der Waals, dada na definição, o segundo coeficiente do virial relaciona-se com os parâmetros a e b da equação de van der Waals por

$$B = b - a/RT$$

(10) O símbolo aplica-se a entidades B que devem ser especificadas. Quando necessário, para se distinguir o X molar parcial de X pode usar-se uma barra sobre o símbolo.

Exemplo O volume molar parcial do Na_2SO_4 em solução aquosa pode ser representado por $\bar{V}(\text{Na}_2\text{SO}_4, \text{aq})$, para o distinguir do volume da solução $V(\text{Na}_2\text{SO}_4, \text{aq})$.

(11) A definição aplica-se a entidades B que devem ser especificadas. O potencial químico pode ser definido de maneira equivalente pelas derivadas parciais de outras funções termodinâmicas (U, H, A).

(12) Os símbolos $^\circ$ ou $^\diamond$ são utilizados para indicar condições padrão. Ambos são aceitáveis. As definições de estado padrão são discutidas na Secção 2.11.1 (iv), p. 65. Sempre que se utilizar um potencial químico padrão μ° , uma constante de equilíbrio padrão K° ou outra grandeza padrão, o estado padrão deve ser especificado.

(13) Na equação de definição dada, a dependência da atividade com a pressão foi desprezada, como se faz, habitualmente, para fases condensadas à pressão atmosférica.

Uma definição equivalente é $a_B = \lambda_B/\lambda_B^\circ$, onde $\lambda_B^\circ = \exp(\mu_B^\circ/RT)$. A definição de μ° depende da escolha do estado padrão (vide Secção 2.11.1 (iv), p. 65).

Nome	Símbolo	Definição	Unidades SI	Notas
(função de) energia de Gibbs de reação padrão	$\Delta_r G^\ominus$	$\Delta_r G^\ominus = \sum_B \nu_B \mu_B^\ominus$	J mol ⁻¹	12, 14 15, 16
afinidade de reação	A, \mathcal{A}	$A = -(\partial G / \partial \xi)_{p,T}$ $= - \sum_B \nu_B \mu_B$	J mol ⁻¹	15
entalpia de reação padrão	$\Delta_r H^\ominus$	$\Delta_r H^\ominus = \sum_B \nu_B H_B^\ominus$	J mol ⁻¹	12, 14 15, 16
entropia de reação padrão	$\Delta_r S^\ominus$	$\Delta_r S^\ominus = \sum_B \nu_B S_B^\ominus$	J mol ⁻¹ K ⁻¹	12, 14, 15
quociente de reação	Q	$Q = \prod_B a_B^{\nu_B}$	1	17
constante de equilíbrio	K^\ominus, K	$K^\ominus = \exp(-\Delta_r G^\ominus / RT)$	1	12, 15, 18
constante de equilíbrio, com base em pressão	K_p	$K_p = \prod_B p_B^{\nu_B}$	Pa ^{$\Sigma \nu_B$}	15, 19
com base em concentração K_c		$K_c = \prod_B c_B^{\nu_B}$	(mol m ⁻³) ^{$\Sigma \nu_B$}	15, 19
com base em molalidade K_m		$K_m = \prod_B m_B^{\nu_B}$	(mol kg ⁻¹) ^{$\Sigma \nu_B$}	15, 19
fugacidade	f, \tilde{p}	$f_B = \lambda_B \lim_{p \rightarrow 0} (p_B / \lambda_B)_T$	Pa	11
coeficiente de fugacidade	ϕ	$\phi_B = f_B / p_B$	1	
constante da lei de 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

(14) O símbolo r indica uma reação genérica. Em casos particulares, r pode ser substituído por outro subscrito adequado, por exemplo, $\Delta_f H^\ominus$ indica a entalpia de formação molar padrão; vide Secção 2.11.1 (i), p. 63 para uma lista de subscritos. Δ_r pode ser interpretado como o símbolo de um operador, $\Delta_r \stackrel{\text{def}}{=} \partial / \partial \xi$.

(15) A reação para a qual a grandeza se aplica deve ser especificada.

(16) As entalpias de reação (e as energias de reação em geral) são normalmente expressas em kJ mol⁻¹. Na literatura antiga era comum o uso de kcal mol⁻¹. No entanto, existem vários tipos de calorias. Para a caloria termoquímica, 1 kcal = 4,184 kJ (vide Secção 7.2, p. 143).

(17) Esta grandeza aplica-se geralmente a sistemas que não estão em equilíbrio.

(18) Esta grandeza é igual ao valor de Q no equilíbrio, quando a afinidade é zero. É adimensional e o seu valor depende da escolha do estado padrão, o qual deve ser especificado. A ISO [5.h] e a Comissão de Termodinâmica da IUPAC [81] recomendam o símbolo K^\ominus e a designação “constante de equilíbrio padrão”. Muitos químicos preferem o símbolo K e o nome “constante de equilíbrio termodinâmica”.

(19) Estas grandezas, geralmente, não são adimensionais. É possível definir de maneira análoga uma constante de equilíbrio com base em fugacidade K_f , etc. A pressões baixas, K_p relaciona-se de maneira aproximada com K^\ominus pela equação $K^\ominus \approx K_p / (p^\ominus)^{\Sigma \nu_B}$, e de forma semelhante, em soluções diluídas, K_c relaciona-se aproximadamente com K^\ominus pela equação $K^\ominus \approx K_c / (c^\ominus)^{\Sigma \nu_B}$; no entanto, as relações exatas envolvem coeficientes de fugacidade ou coeficientes de atividade [81].

A constante de equilíbrio de dissolução de um eletrólito (descrevendo o equilíbrio entre a fase sólida e os íons solvatados) é frequentemente denominada produto de solubilidade e representada por K_{sol} ou K_s (ou K_{sol}^\ominus ou K_s^\ominus quando for o caso). Indica-se do mesmo modo a constante de equilíbrio para a dissociação de um ácido K_a , para a hidrólise de uma base K_b e para a dissociação da água K_w .

(20) A lei de Henry é algumas vezes expressa com base em molalidade ou concentração e as unidades da constante desta lei são então, respectivamente, Pa kg mol⁻¹ ou Pa m³ mol⁻¹.

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Definição</i>	<i>Unidade SI</i>	<i>Notas</i>
coeficiente de atividade				
referenciado à lei de Raoult	f	$f_B = a_B/x_B$	1	11, 21
referenciado à lei de Henry				
com base em molalidade	γ_m	$a_{m,B} = \gamma_{m,B} m_B / m^\ominus$	1	11, 22
com base em concentração	γ_c	$a_{c,B} = \gamma_{c,B} c_B / c^\ominus$	1	11, 22
com base em fração molar	γ_x	$a_{x,B} = \gamma_{x,B} x_B$	1	10, 21
força iônica				
com base em molalidade	I_m, I	$I_m = (1/2) \sum_i m_i z_i^2$	mol kg ⁻¹	
com base em concentração	I_c, I	$I_m = (1/2) \sum_i c_i z_i^2$	mol m ⁻³	
coeficiente osmótico				
com base em molalidade	ϕ_m	$\phi_m = \frac{\mu_A^* - \mu_A}{RT M_A \sum_B m_B}$	1	23, 24
com base em fração molar	ϕ_x	$\phi_x = -\frac{\mu_B^* - \mu_B}{RT \ln x_B}$	1	22, 23
pressão osmótica	Π	$\Pi = -(RT/V_A) \ln a_A$	Pa	23, 25

(21) Esta grandeza aplica-se a fases puras, substâncias em misturas, ou solventes.

(22) Esta grandeza aplica-se aos solutos.

(23) A é o solvente, B representa um ou mais solutos.

(24) As entidades B são moléculas independentes de soluto, íons etc., independentemente da sua natureza. As respetivas quantidades são algumas vezes expressas em osmols (significando um mol de entidades osmoticamente ativas), porém esta prática deve ser evitada.

(25) Esta definição de pressão osmótica aplica-se a um fluido incompressível.

2.11.1 Outros símbolos e convenções em Termodinâmica Química

Uma descrição mais extensa sobre este assunto pode ser encontrada em [81].

(i) Símbolos usados como subscritos para indicar processos ou reações físico-químicos
Estes símbolos devem ser impressos em tipos romanos (letra vertical) e sem ponto final.

adsorção	ads
atomização	at
reação de combustão	c
diluição (de uma solução)	dil
deslocamento	dlt
reação de formação	f
imersão	im
fusão (sólido → líquido)	fus
mistura de fluidos	mis
reação em geral	r
solução (de soluto em solvente)	sol
sublimação (sólido → gás)	sub
transição (entre duas fases)	trs
ponto triplo	pt
vaporização, evaporação (líquido → gás)	vap

(ii) Sobrescritos recomendados

complexo ativado, estado de transição	\ddagger, \neq
aparente	ap
grandeza de excesso	E
ideal	id
diluição infinita	∞
substância pura	*
padrão	\ominus, \circ

(iii) Exemplos do uso do símbolo Δ

O símbolo Δ representa a variação de uma grandeza termodinâmica extensiva num processo. A adição de um subscrito ao Δ indica uma variação na propriedade.

Exemplos $\Delta_{\text{vap}}H = \Delta_{\text{l}}^g H = H(\text{g}) - H(\text{l})$ para a entalpia de vaporização molar.

$\Delta_{\text{vap}}H = 40,7 \text{ kJ mol}^{-1}$ para a água a 100 °C sob sua própria pressão de vapor.

É possível escrever também ΔH_{vap} , porém esta prática não é recomendada.

O subscrito r é usado para indicar variações associadas a uma *reação química*. Símbolos como $\Delta_r H$ são definidos por equações do tipo

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

Assim, é essencial especificar a equação estequiométrica da reação, quando se der valores numéricos a essas grandezas, de modo a definir a extensão da reação ξ e os valores dos coeficientes estequiométricos ν_B .

Exemplo $\text{N}_2(\text{g}) + 3 \text{ H}_2(\text{g}) = 2 \text{ NH}_3(\text{g}), \quad \Delta_r H^\ominus(298, 15 \text{ K}) = -92,4 \text{ kJ mol}^{-1}$
 $\Delta_r S^\ominus(298, 15 \text{ K}) = -199 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$

O mol^{-1} nestas unidades identifica as grandezas neste exemplo como a variação por unidade de extensão da reação. Podem ser chamadas de entalpia e entropia de reação molar, adicionando ao símbolo o subscrito m para enfatizar a diferença em relação à grandeza integral.

As *grandezas de reação padrão* são particularmente importantes. São definidas pelas equações

$$\begin{aligned}\Delta_r H^\ominus &= \sum_B \nu_B H_B^\ominus \\ \Delta_r S^\ominus &= \sum_B \nu_B S_B^\ominus \\ \Delta_r G^\ominus &= \sum_B \nu_B \mu_B^\ominus\end{aligned}$$

É importante especificar cuidadosamente a notação destes símbolos. A relação com a afinidade de reação é

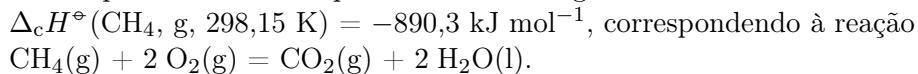
$$-A = \Delta_r G = \Delta_r G^\ominus + RT \ln \left(\prod_B a_B^{\nu_B} \right)$$

e a relação com a constante de equilíbrio padrão é $\Delta_r G^\ominus = -RT \ln K^\ominus$. O produto das atividades é o quociente de reação Q , vide p. 62.

O termo *combustão* e o símbolo c indicam a oxidação completa de uma substância. Para a definição da uma oxidação completa de uma substância contendo outros elementos que não sejam

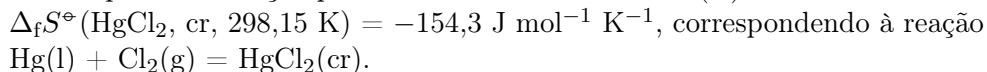
C, H e O, vide [86]. A correspondente equação da reação é escrita de forma que o coeficiente estequiométrico ν da substância em questão seja igual a -1 .

Exemplo A entalpia de combustão padrão do metano gasoso é



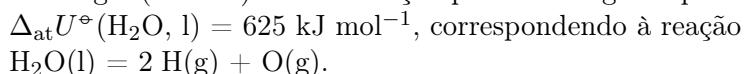
O termo *formação* e o símbolo f indicam a formação de uma substância a partir das substâncias simples dos seus elementos nos seus estados de referência (geralmente o estado mais estável de cada substância simples a uma temperatura escolhida e à pressão padrão). A correspondente equação da reação é escrita de forma que o coeficiente estequiométrico ν da substância em questão seja igual a $+1$.

Exemplo A entropia de formação padrão do cloreto de mercúrio(II) cristalino é



O termo *atomização*, símbolo at , indica um processo em que uma substância é separada nos seus átomos constituintes no estado fundamental em fase gasosa. A correspondente equação da reação é escrita de forma que o coeficiente estequiométrico ν da substância em questão seja igual a -1 .

Exemplo A energia (interna) de atomização padrão da água líquida é



(iv) Estados padrão [1.j] e [81]

O potencial químico padrão de uma substância B à temperatura T , $\mu_B^\ominus(T)$, é o valor do potencial químico nas condições padrão, especificadas a seguir.

Para uma fase gasosa. O estado padrão para uma substância gasosa, pura ou numa mistura gasosa, é o estado (hipotético) da substância B pura na fase gasosa à pressão padrão $p = p^\ominus$ e apresentando um comportamento de gás ideal. O potencial químico padrão é definido como

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

Para uma fase pura, uma mistura ou um solvente, em estado líquido ou sólido. O estado padrão para uma substância líquida ou sólida, pura ou numa mistura, ou para um solvente, é o estado da substância B pura em fase líquida ou sólida à pressão padrão $p = p^\ominus$. O potencial químico padrão é definido como

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

Para um soluto em solução. Para um soluto numa solução líquida ou sólida, o estado padrão refere-se ao comportamento ideal do soluto diluído. É o estado (hipotético) do soluto B na molalidade padrão, m^\ominus , pressão padrão p^\ominus , e comportando-se como numa solução infinitamente diluída. O potencial químico padrão é definido como

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

O potencial químico do soluto B é uma função da molalidade m_B à pressão constante $p = p^\ominus$ e é dado pela expressão

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

Algumas vezes a concentração c é usada como variável em lugar da molalidade m ; então, em ambas as equações acima o símbolo m é substituído pelo símbolo x . Ocionalmente, a fração molar x é

usada em vez de m ; neste caso, em ambas as equações surge c em vez de m , e $x^\ominus = 1$. Embora o estado padrão de um soluto seja sempre referenciado ao comportamento ideal diluído, a definição do estado padrão e o valor do potencial químico padrão μ^\ominus são diferentes, dependendo se são utilizadas como variáveis a molalidade m , a concentração c ou a fração molar x .

(v) Pressão padrão, molalidade padrão e concentração padrão

Em princípio pode-se escolher qualquer valor para a pressão padrão p^\ominus , para a molalidade padrão m^\ominus e para a concentração padrão c^\ominus , embora a escolha deva ser especificada. Por exemplo, na tabulação de dados apropriados à química de alta pressão, pode ser conveniente escolher um valor de $p^\ominus = 100 \text{ MPa} (= 1 \text{ kbar})$. Na prática, contudo, as escolhas mais comuns são:

$$\begin{aligned} p^\ominus &= 0,1 \text{ MPa} = 100 \text{ kPa} (= 1 \text{ bar}) \\ m^\ominus &= 1 \text{ mol kg}^{-1} \\ c^\ominus &= 1 \text{ mol dm}^{-3} \end{aligned}$$

Estes valores para m^\ominus e c^\ominus são universais. O valor para $p^\ominus = 100 \text{ kPa}$ é a recomendação da IUPAC desde 1982 [1.j] e é aconselhado para a tabulação de dados termodinâmicos. Antes de 1982, a pressão padrão geralmente considerada era $p^\ominus = 101\,325 \text{ Pa} (= 1 \text{ atm, denominada atmosfera padrão})$. Em qualquer caso, o valor para p^\ominus deve ser especificado.

A conversão de valores correspondentes a diferentes p^\ominus está descrita em [87–89]. O novo valor de p^\ominus , 100 kPa, é algumas vezes denominado *pressão do estado padrão*.

(vi) Estados padrão em Bioquímica

Frequentemente são escolhidos estados padrão especiais, próximos das condições fisiológicas. O estado padrão em Bioquímica é geralmente escolhido a $[\text{H}^+] = 10^{-7} \text{ mol dm}^{-3}$. As concentrações dos solutos podem ser consideradas em conjunto. Por exemplo, pode especificar-se a concentração total de fosfato, em vez da concentração de cada componente, H_3PO_4 , H_2PO_4^- , HPO_4^{2-} e PO_4^{3-} , separadamente. O estado padrão e outros estados de referência devem sempre ser especificados com cuidado [90, 91].

(vii) Propriedades termodinâmicas

Os valores de muitas grandezas termodinâmicas representam propriedades químicas básicas das substâncias e são utilizados em cálculos posteriores. Existem tabelas extensas, por exemplo em [92–96]. Devem ser tomados cuidados especiais ao relatar os dados e as suas incertezas [97, 98].

(viii) Estado de referência (de uma substância simples)

É o estado no qual uma substância simples é estável à pressão do estado padrão escolhida e a uma dada temperatura [16].

2.12 Cinética Química e Fotoquímica

As recomendações aqui apresentadas estão baseadas nas recomendações prévias da IUPAC [1.c,1.k] e nas apresentadas em [17], que não coincidem completamente. As recomendações referentes à Fotoquímica podem ser consultadas em [60]. Vide também [99] para recomendações sobre como informar dados de Cinética Química. Um glossário dos termos usados em Cinética Química está disponível em [100].

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
velocidade de variação da grandeza X	\dot{X}	$\dot{X} = dX/dt$	(variação)	1
velocidade de conversão	$\dot{\xi}$	$\dot{\xi} = d\xi/dt$	mol s^{-1}	2
velocidade de variação da concentração r_B, v_B (devido a reação química)	r_B, v_B	$r_B = dc_B/dt$	$\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$	3, 4
velocidade de reação (com base em concentração de quantidade)	v, v_c	$v = \nu_B^{-1}dc_B/dt$ $= \dot{\xi}/V$	$\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$	2, 4
velocidade de reação (com base em concentração de número), (velocidade de reação)	v, v_C	$v_C = \nu_B^{-1}dC_B/dt$	$\text{m}^{-3} \text{s}^{-1}$	
ordem de reação parcial	m_B, n_B	$v = k \prod_B c_B^{m_B}$	1	5
ordem de reação global	m, n	$m = \sum_B m_B$	1	
constante de velocidade, coeficiente de velocidade	$k, k(T)$	$v = k \prod_B c_B^{m_B}$	$(\text{m}^3 \text{ mol}^{-1})^{m-1} \text{s}^{-1}$	6

(1) Por exemplo, velocidade de variação da pressão $\dot{p} = dp/dt$, para a qual a unidade SI é Pa s^{-1} , ou velocidade de variação de entropia dS/dt , com unidade SI $\text{J K}^{-1} \text{s}^{-1}$.

(2) A reação para a qual se aplica esta grandeza deve ser especificada por meio da equação estequiométrica.

(3) O símbolo e a definição são aplicados às espécies B.

(4) Note-se que r_B e v também podem ser definidos, de maneira análoga, com base na pressão parcial, concentração de número, concentração superficial, etc. Quando for necessário, as velocidades de reação definidas em diferentes formas podem ser distinguidas usando um subscrito, por exemplo $v_p = \nu_B^{-1}dp_B/dt$, etc. Note-se que a velocidade de reação apenas pode ser definida para uma reação de estequiometria conhecida e independente do tempo, baseada numa equação de reação especificada. Também, a segunda equação para a velocidade de reação surge da primeira somente quando o volume V é constante e c_B permanece sempre uniforme no meio (de forma mais geral, a definição é aplicada a concentrações locais). As derivadas devem ser as devidas à reação química propriamente dita; em sistemas abertos, como sistemas de fluxo, tanto os efeitos devidos aos processos de entrada e saída como os processos de transporte em geral devem ser considerados separadamente através da equação

$$(dc_B/dt)_{\text{total}} = (dc_B/dt)_{\text{reação}} + (dc_B/dt)_{\text{transporte}}$$

(5) O símbolo é aplicado ao reagente B. O símbolo m é usado para evitar confusão com n , usado para [quantidade de substância](#). A ordem de reação só é definida quando uma lei de velocidade específica se aplica. m é um número real.

(6) As constantes de velocidade k e os fatores pré-exponenciais A são geralmente indicados em $(\text{dm}^3 \text{ mol}^{-1})^{m-1} \text{s}^{-1}$, ou na escala molecular em $(\text{cm}^3)^{m-1} \text{s}^{-1}$ ou $(\text{cm}^3 \text{ molécula}^{-1})^{m-1} \text{s}^{-1}$. Note-se que “molécula” não é uma unidade, mas é frequentemente incluída para maior clareza, embora não esteja em conformidade com as normas. $k(T)$ é escrito para salientar a dependência com a temperatura. As constantes de velocidade são frequentemente indicadas na forma de logaritmos de base 10.

Exemplo reação de segunda ordem $k = 10^{8,2} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{s}^{-1}$ ou $\lg(k/\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{s}^{-1}) = 8,2$
ou alternativamente $k = 10^{-12,6} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$ ou $\lg(k/\text{cm}^3 \text{s}^{-1}) = -12,6$

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
constante de velocidade de uma reação unimolecular a alta pressão	k_{uni} , $k_{\text{uni}}(T, c_M)$	$v = k_{\text{uni}} c_B$	s^{-1}	7
a baixa pressão	k_∞	$k_{\text{uni}}(c_M \rightarrow \infty)$	s^{-1}	7
constante de Boltzmann	k_0	$v = k_0 c_M c_B$	$\text{m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$	7
meia-vida	$t_{1/2}$	$c(t_{1/2}) = c(0)/2$	s	
tempo de relaxação, tempo de vida, vida-média	τ	$\Delta c(\tau) = \Delta c(0)/e$	s	8
energia de ativação (de Arrhenius)	E_A, E_a	$E_A = RT^2 d(\ln k)/dT$	J mol^{-1}	9
fator pré-exponencial, fator de frequência	A	$A = k \exp(E_A/RT)$	$(\text{m}^3 \text{ mol}^{-1})^{m-1} \text{ s}^{-1}$	9, 10
raio de esfera rígida	r		m	
diâmetro de colisão	d_{AB}	$d_{AB} = r_A + r_B$	m	
secção de choque de colisão	σ	$\sigma = \pi d_{AB}^2$	m^2	11
velocidade relativa média entre A e B	\bar{c}_{AB}	$\bar{c}_{AB} = (8kT/\pi\mu)^{1/2}$	m s^{-1}	12

(7) As velocidades das reações unimoleculares mostram uma dependência com a concentração c_M da espécie M com a qual colidem. Indica-se $k_{\text{uni}}(T, c_M)$ para salientar a dependência com a temperatura e a “pressão”. Para pressões altas $c_M(\rightarrow \infty)$, a dependência desaparece. Para pressões baixas $c_M(\rightarrow 0)$, a ordem de reação parcial para c_M é 1. Neste caso, define-se a constante de velocidade de segunda ordem k_0 .

(8) τ é definido como o intervalo de tempo em que a perturbação da concentração Δc cai para $1/e$ do seu valor inicial $\Delta c(0)$. Se uma certa concentração inicial de uma substância decai para zero quando $t \rightarrow \infty$, como em decaimentos radioativos, então o tempo de relaxação é o tempo de vida médio dessa substância (radioisótopo). Este tempo de vida ou tempo de decaimento deve ser diferenciado da meia-vida.

(9) Pode-se usar como equação de definição

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

O termo energia de ativação de Arrhenius deve ser usado apenas para a grandeza empírica definida na tabela. Também são usadas outras equações empíricas com “energias de ativação” diferentes, tais como

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

Nestas expressões A' , n , e E_a' são considerados como sendo parâmetros independentes da temperatura.

O termo energia de ativação é também usado para o limiar de energia que aparece no potencial eletrônico (altura da barreira de energia eletrônica). Para esta “energia de ativação”, são preferidos o símbolo E_0 e o termo limiar de energia, mas E_a também é usado comumente. Por outro lado, E_0 pode incluir, ou não, as correções para as energias de ponto zero dos reagentes e do estado de transição.

Assim, recomenda-se que seja sempre especificada com rigor qual a energia de ativação considerada, e se reserve o termo energia de ativação (de Arrhenius) somente e especificamente para a grandeza definida na tabela. E_A depende da temperatura e pode ser escrita como $E_A(T)$.

(10) A depende da temperatura e pode ser escrito como $A(T)$.

(11) A secção de choque de colisão σ é uma constante no modelo de colisões de esferas rígidas, mas em geral depende da energia. Também é possível definir uma secção de choque de colisão média dependente da temperatura (vide nota 16). C indica a concentração de número.

(12) μ é a massa reduzida, $\mu = m_A m_B / (m_A + m_B)$.

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
frequência de colisão de A com A	$z_A(A)$	$z_A(A) = \sqrt{2} C_A \sigma \bar{c}$	s^{-1}	11
de A com B	$z_A(B)$	$z_A(B) = C_B \sigma \bar{c}_{AB}$	s^{-1}	11
densidade de colisões, número de colisões				
de A com A	Z_{AA}	$Z_{AA} = C_A z_A(A)$	$\text{s}^{-1} \text{ m}^{-3}$	13
de A com B	Z_{AB}	$Z_{AB} = C_A z_A(B)$	$\text{s}^{-1} \text{ m}^{-3}$	13
fator de frequência de colisões	z_{AB}	$z_{AB} = Z_{AB}/L c_A c_B$	$\text{m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$	13
percurso livre médio	λ	$\lambda = \bar{c}/z_A$	m	
parâmetro de impacto	b		m	14
ângulo de espalhamento	θ		1, rad	15
secção de choque diferencial	I_{ji}	$I_{ji} = d\sigma_{ji}/d\Omega$	$\text{m}^2 \text{ sr}^{-1}$	16
secção de choque total	σ_{ji}	$\sigma_{ji} = \int I_{ji} d\Omega$	m^2	16
matriz de espalhamento	S		1	17
probabilidade de transição	P_{ji}	$P_{ji} = S_{ji} ^2$	1	16, 17
entalpia de ativação	$\Delta^\ddagger H^\ominus, \Delta H^\ddagger$	$k(T) = \frac{kT}{h} \exp\left(\frac{\Delta^\ddagger S^\ominus}{R}\right)$ $\times \exp\left(\frac{-\Delta^\ddagger H^\ominus}{RT}\right)$	J mol^{-1}	18
padrão				
volume de ativação	$\Delta^\ddagger V^\ominus, \Delta V^\ddagger$	$\Delta^\ddagger V^\ominus = -RT(\partial(\ln k)/\partial p)_T$	$\text{m}^3 \text{ mol}^{-1}$	
energia interna de ativação padrão	$\Delta^\ddagger U^\ominus, \Delta U^\ddagger$		J mol^{-1}	18

(13) Z_{AA} e Z_{AB} são os números totais de colisões AA ou AB por unidade de tempo e volume num sistema contendo somente moléculas A, ou contendo dois tipos de moléculas, A e B. Colisões tríplices, ou entre três corpos, podem ser tratadas de forma similar.

(14) O parâmetro de impacto b caracteriza uma colisão individual entre duas partículas; é definido como a menor distância de aproximação que resultaria se as trajetórias das partículas não fossem desviadas pela colisão.

(15) $\theta = 0$ significa que não há deflexão.

(16) Em todas estas grandezas matriciais, o primeiro índice diz respeito à trajetória final e o segundo à trajetória inicial. i e j indicam as trajetórias de reagentes e produtos, respectivamente, e Ω indica o ângulo sólido; $d\sigma_{ji}/d\Omega$ é igual ao (fluxo de partículas espalhadas por unidade de ângulo sólido) dividido pelo (fluxo de partículas incidentes por unidade de área). **Espalhamento** elástico significa que $i = j$. Tanto I_{ji} como σ_{ji} dependem da energia cinética relativa total, e podem ser escritas como $I_{ji}(E)$ e $\sigma_{ji}(E)$. A teoria geral de colisões conduz a uma expressão para o coeficiente de velocidade em termos da secção **de choque** total dependente da energia,

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

onde E é a energia translacional de colisão e μ a massa reduzida (vide nota 12). A/O integral pode ser entendida/o como a média térmica da secção **de choque** de colisão $\langle \sigma_{ji} \rangle$, que deve ser usada para calcular a frequência de colisões sob condições térmicas (vide nota 11).

(17) A matriz de **espalhamento** S é utilizada na teoria quântica de **espalhamento** [101]. S é uma matriz unitária $SS^\dagger = \mathbf{1}$. $P_{ji} = |S_{ji}|^2$ é a probabilidade dos parceiros de colisão incidentes na trajetória i emergirem pela trajetória j .

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
entropia de ativação padrão	$\Delta^\ddagger S^\ominus$, ΔS^\ddagger		$J \text{ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$	18
energia de Gibbs de ativação padrão	$\Delta^\ddagger G^\ominus$, ΔG^\ddagger	$\Delta^\ddagger G^\ominus = \Delta^\ddagger H^\ominus - T\Delta^\ddagger S^\ominus$	$J \text{ mol}^{-1}$	18
função de partição molecular para o estado de transição	$q^\ddagger, q^\ddagger(T)$	$k_\infty = \kappa \frac{k_B T}{h} \frac{q^\ddagger}{q_A} \exp(-E_0/k_B T)$	1	18
coeficiente de transmissão	κ, γ	$\kappa = \frac{k_\infty h}{k_B T} \frac{q_A}{q^\ddagger} \exp(E_0/k_B T)$	1	18
função de partição molecular por unidade de volume	\tilde{q}	$\tilde{q} = q/V$	m^{-3}	18
constante de velocidade específica para reação unimolecular com E, J	$k_{\text{uni}}(E, J)$	$k_{\text{uni}}(E, J) = -\frac{d(\ln c_A(E, J))}{dt}$	s^{-1}	19
constante de velocidade específica para reação bimolecular com energia de colisão E_t	$k_{\text{bi}}(E_t)$	$k_{\text{bi}}(E_t) = \sigma(E_t) \sqrt{2E_t/\mu}$	$\text{m}^3 \text{ s}^{-1}$	11

(Continuação das notas)

(18) As grandezas $\Delta^\ddagger H^\ominus$, $\Delta^\ddagger U^\ominus$, $\Delta^\ddagger S^\ominus$ e $\Delta^\ddagger G^\ominus$ são usadas na teoria do estado de transição de reações químicas. Tais grandezas são usadas corretamente apenas quando se referem a reações elementares. De uma forma mais geral, a relação entre a constante de velocidade k e essas grandezas é

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

onde k tem as dimensões de uma constante de velocidade de primeira ordem. As constantes de velocidade para reações de ordem n são obtidas multiplicando por $(c^\ominus)^{1-n}$. Para uma reação bimolecular de um gás ideal, deve-se multiplicar por $V^\ominus = (c^\ominus)^{-1} = (kT/p^\ominus)$. κ é o coeficiente de transmissão, e $\Delta^\ddagger G^\ominus = \Delta^\ddagger H^\ominus - T\Delta^\ddagger S^\ominus$. Às vezes, o símbolo que designa o estado padrão \ominus é omitido, e estas grandezas são frequentemente escritas como $\Delta^\ddagger H$, $\Delta^\ddagger U$, $\Delta^\ddagger S$ e $\Delta^\ddagger G$. Porém, a omissão da especificação do estado padrão gera ambiguidades nos valores das grandezas. Em geral, a escolha de p^\ominus e c^\ominus afeta os valores de $\Delta^\ddagger H^\ominus$, $\Delta^\ddagger S^\ominus$ e $\Delta^\ddagger G^\ominus$.

A formulação mecânico-estatística da teoria do estado de transição resulta na equação para k_∞ dada na tabela para a reação unimolecular no limite de altas pressões. Para uma reação bimolecular, tem-se (frequentemente supondo $\kappa = 1$)

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

onde q^\ddagger é a função de partição do estado de transição e $\tilde{q}^\ddagger, \tilde{q}_A, \tilde{q}_B$ são as funções de partição por unidade de volume para o estado de transição e para o par de reagentes A e B. E_0 é o limiar de energia para a reação, abaixo do qual se supõe que a reação não ocorre. Na teoria do estado de transição, esta energia é a diferença entre a energia do nível de ponto zero do estado de transição e a do nível de ponto zero dos reagentes.

(19) Na teoria de reações unimoleculares, é importante considerar as constantes de velocidade para um conjunto de moléculas de concentração $c_A(E, J, \dots)$ com energia E bem definida (e possivelmente outros números quânticos, como o de momento angular J , etc.). Expressões equivalentes às da teoria do estado de transição surgem no contexto da teoria de quase-equilíbrio, a teoria de Rice-

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
densidade de estados	$\rho(E, J, \dots)$	$\rho(E, J, \dots) = dN(E, J, \dots)/dE$	J^{-1}	19
número (soma) de estados	$N(E), W(E)$	$N(E) = \int_0^E \rho(E') dE'$	1	19
densidade de estados do estado de transição	$\rho^\ddagger(E)$	$\rho^\ddagger(E) = dN^\ddagger(E)/dE$	J^{-1}	19
número de estados do estado de transição	$N^\ddagger(E), W^\ddagger(E)$	$N^\ddagger(E) = \int_{E_0}^E \rho^\ddagger(E') dE'$	1	19
número de trajetórias de reação adiabáticas abertas	$W(E)$	$W(E) = \sum_a H(E - V_a^{\max})$	1	19
constante de Michaelis	K_M	$v = \frac{V [S]}{K_M + [S]}$	mol m^{-3}	20
matriz (dos coeficientes de velocidade)	\mathbf{K}, K_{fi}	$-\frac{dc}{dt} = \mathbf{K} \mathbf{c}$	s^{-1}	21

(19) (continuação) Ramsperger-Kassel-Marcus (RRKM) do modelo estatístico de trajetórias adiabáticas (às vezes, referido pelo **acrônimo** SACM, de *statistical adiabatic channel model*). A constante de velocidade unimolecular é dada, então, pela expressão da teoria RRKM

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

onde $\rho(E)$ é a densidade de estados da molécula, $N(E)$ o número total de estados da molécula com energia menor que E ,

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

e $N^\ddagger(E)$ o respectivo número de estados do estado de transição. No contexto do modelo estatístico de trajetórias adiabáticas, tem-se que

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

V_a^{\max} é o máximo do potencial na trajetória adiabática a , $H(x)$ a função de Heaviside (vide Secção 4.2, p. 111) e J o número quântico de momento angular [102]. Podem haver outras constantes de movimento para além de J que aqui se especifica.

(20) A constante de Michaelis surge no tratamento de mecanismos de catálise enzimática



onde E é a enzima, S o substrato, ES o complexo enzima-substrato e P o produto. V é denominada de velocidade limitante [100].

(21) No caso geral das cinéticas de primeira ordem, a equação de velocidade pode ser escrita em forma de equação matricial, usando o vetor concentração $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T$ e os coeficientes de velocidade de primeira ordem K_{fi} como elementos da matriz.

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
rendimento quântico, rendimento fotoquímico	Φ, ϕ		1	22
constante de velocidade de fluorescência	k_f	$\frac{d[h\nu]_f}{dt} = k_f c^* \text{ s}^{-1}$		23, 24
tempo de vida natural	τ_0	$\tau_0 = 1/k_f$	s	23
largura de linha natural	Γ, Γ_f	$\Gamma = \hbar k_f$	J	23
largura de linha de pré-dissociação	$\Gamma_p, \Gamma_{\text{diss}}$	$\Gamma_p = \hbar k_p$	J	23

(22) O rendimento quântico ϕ é definido, em geral, pelo *número de eventos determinados* dividido pelo *número de fótons absorvidos* [60]. Para uma reação fotoquímica pode ser definido como

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

que é a *velocidade de conversão* dividida pela *velocidade de absorção de fótons*.

(23) Para um decaimento exponencial por emissão espontânea (fluorescência), tem-se para o decaimento da concentração do estado excitado c^*

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

A largura à meia altura do máximo (FWHM) Γ de uma linha de absorção lorentziana está relacionada com a constante de velocidade de fluorescência. Para uma pré-dissociação, Γ_p está relacionada com a constante de velocidade de pré-dissociação k_p . Porém, na prática, as larguras de linha podem ter outras contribuições.

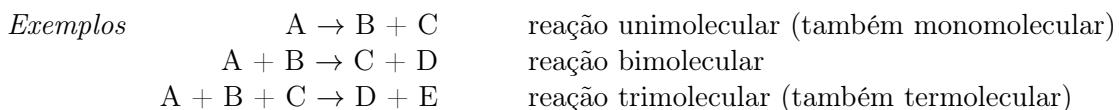
(24) Às vezes, o einstein é usado como a unidade de *quantidade de substância* de fótons, onde um einstein corresponde a 1 mol de fótons, ou como a unidade de energia, onde um einstein corresponde à energia $Lh\nu$ de 1 mol de fótons de frequência ν .

2.12.1 Outros símbolos, termos e convenções usados em Cinética Química

Descrições adicionais podem ser encontradas em [100].

(i) Reações elementares

As reações que ocorrem numa única etapa, a nível molecular, são chamadas *reações elementares*. A convenção é defini-las como unidirecionais, indicadas com uma seta simples sempre da esquerda para a direita. O número de partículas de reagente que são relevantes no lado esquerdo da equação é chamado de *molecularidade* da reação elementar.



(ii) Mecanismos compostos

Quando uma reação envolve mais de uma reação elementar, diz-se que ocorre por um mecanismo composto. Comumente, são também usados os termos mecanismo complexo, mecanismo indireto e mecanismo por etapas. Tipos especiais de mecanismos incluem mecanismos de reações em cadeia, mecanismos de reações catalíticas, etc.

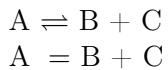
Exemplos Um mecanismo simples é composto pelas reações direta e inversa



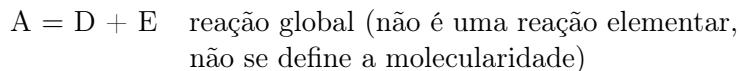
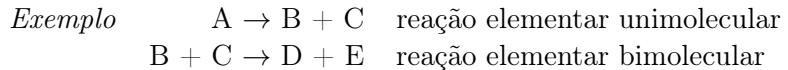
Neste caso particular, é usual escrever estas reações como



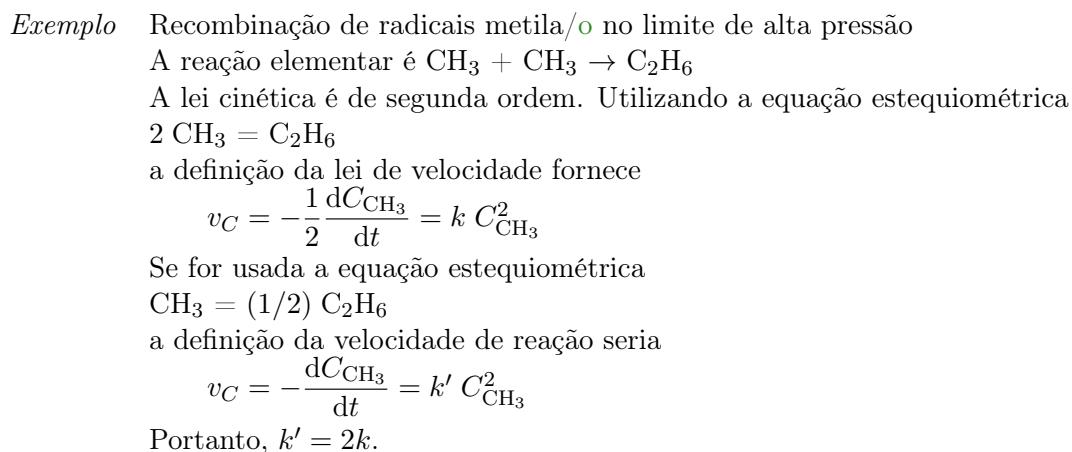
No entanto, em cinética é útil distinguir esta equação da usada para descrever uma reação global, que é escrita ou com duas semi-setas unidirecionais ou com um sinal de “igual”



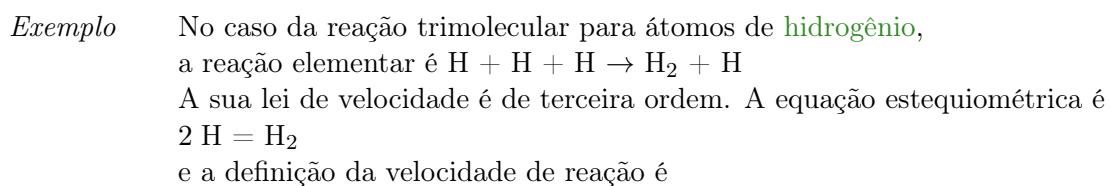
Quando se combina um mecanismo composto para obter uma reação global, não se deve usar a seta simples na equação resultante.



Além disso, é útil distinguir a equação estequiométrica, que define a velocidade de reação e a constante de velocidade, da equação que define a reação elementar e a lei de velocidade.



Da mesma forma que as entalpias de reação, as constantes de velocidade somente são definidas para uma dada equação estequiométrica. Para evitar ambiguidades, é recomendado especificar sempre explicitamente a equação estequiométrica e a equação diferencial para a velocidade de reação. Se não for feito nenhum outro esclarecimento, os coeficientes estequiométricos devem ser os mesmos da equação da reação (para reações elementares). Porém, nem sempre é possível usar a equação de reação como equação estequiométrica.



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

Por outro lado, a reação bimolecular $\text{H} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2$, com a mesma equação estequiométrica, é uma reação elementar *diferente* (e muito pouco provável), não sendo o mesmo que a reação trimolecular.

Outros exemplos incluem reações catalisadas, tais como $\text{X} + \text{A} \rightarrow \text{X} + \text{B}$, com equação estequiométrica $\text{A} = \text{B}$ e velocidade $v_c = -d[\text{A}]/dt = k[\text{A}][\text{X}] (\neq d[\text{X}]/dt = 0)$. Mais uma vez, a reação unimolecular $\text{A} \rightarrow \text{B}$ existe, mas é uma reação elementar *diferente*, embora com a mesma estequiometria.

2.13 Eletroquímica

Os conceitos, a terminologia e os símbolos eletroquímicos encontram-se descritos com mais detalhes em [1.i] e [103–107]. Para a área de Engenharia Eletroquímica vide [108], para eletroquímica de semicondutores e conversão foto-eletroquímica de energia vide [109], para nomenclatura de corrosão vide [110], para impedâncias em sistemas eletroquímicos vide [111], para fenômenos (*Port.: fenómenos*) eletrocinéticos vide [112], para biossensores eletroquímicos vide [113], e para eletrodos (*Port.: elétrodos*) quimicamente modificados (EQM) vide [114].

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Definição</i>	<i>Unidade SI</i>	<i>Notas</i>
carga elementar	e	carga do próton	C	
constante de Faraday	F	$F = eN_A$	C mol^{-1}	
número de carga de um íon	z	$z_B = Q_B/e$	1	1
força iônica ,				
com base em molalidade	I_m, I	$I_m = (1/2) \sum_i m_i z_i^2$	mol kg^{-1}	
com base em concentração	I_c, I	$I_c = (1/2) \sum_i c_i z_i^2$	mol m^{-3}	2
molalidade iônica média	m_{\pm}	$m_{\pm}^{(\nu_+ + \nu_-)} = m_+^{\nu_+} m_-^{\nu_-}$	mol kg^{-1}	3
coeficiente de atividade iônica média	γ_{\pm}	$\gamma_{\pm}^{(\nu_+ + \nu_-)} = \gamma_+^{\nu_+} \gamma_-^{\nu_-}$	1	3
atividade iônica média	a_{\pm}	$a_{\pm} = m_{\pm} \gamma_{\pm} / m^\ominus$	1	3, 4, 5
atividade de um eletrólito	$a(A_{\nu_+} B_{\nu_-})$	$a(A_{\nu_+} B_{\nu_-}) = a_{\pm}^{(\nu_+ + \nu_-)}$	1	3
pH	pH	$\text{pH} = -\lg(a_{\text{H}^+})$	1	5, 6
potencial elétrico externo	ψ		V	7
potencial elétrico superficial (de superfície)	χ		V	8
potencial elétrico interno	ϕ	$\phi = \chi + \psi$	V	
diferença de potencial de Volta	$\Delta\psi$	$\Delta_{\alpha}^{\beta}\psi = \psi^{\beta} - \psi^{\alpha}$	V	9

(1) A definição é aplicada a entidades B.

(2) Para evitar confusão com a corrente catódica, símbolo I_c (note o subscrito em fonte romana), o símbolo I ou, às vezes, μ (quando a corrente é denotada por I) é usado para a força **iônica** expressa com base em concentração.

(3) ν_+ e ν_- são os números de **cátions** e de **ânions** por formula unitária de um eletrólito $A_{\nu_+} B_{\nu_-}$.

Exemplo Para $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$, $\nu_+ = 2$ e $\nu_- = 3$.

m_+ e m_- , e γ_+ e γ_- , são as molalidades e coeficientes de atividade de **cátions** e **ânions**. Se a molalidade de $A_{\nu_+} B_{\nu_-}$ é m , então $m_+ = \nu_+ m$ e $m_- = \nu_- m$. Uma definição semelhante é usada na escala de concentração para a concentração **iônica** média c_{\pm} .

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

(5) Para um **íon** individual, nem a atividade a_+, a_- nem o coeficiente de atividade γ_+, γ_- são experimentalmente mensuráveis.

(6) A definição de pH está discutida na Secção 2.13.1 (viii), p. 79. O símbolo pH é uma exceção às regras gerais para os símbolos de grandezas físicas (Secção 1.3.1, p. 4), dado que é um símbolo de duas letras e é sempre impresso em fonte romana (vertical).

(7) ψ^{β} é o potencial eletrostático da fase β devido à carga elétrica Q da fase, que pode ser calculado a partir da eletrostática clássica. Por exemplo, para uma esfera condutora com excesso de carga Q e raio r , no vácuo, $\psi = Q/4\pi\varepsilon_0 r$.

(8) O potencial superficial (de superfície) é definido como o trabalho (dividido pela carga) necessário para transferir uma carga positiva ideal (*i.e.*, desprovida de massa) através de uma camada dipolar na interface entre as fases α e β . O valor absoluto de χ não pode ser determinado, somente diferenças são mensuráveis.

(9) $\Delta\psi$ é a diferença de potencial devido à carga nas fases α e β . É uma grandeza mensurável.

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
diferença de potencial de Galvani potencial eletroquímico	$\Delta\phi$ $\tilde{\mu}_B^\alpha$	$\Delta_\alpha^\beta \phi = \phi^\beta - \phi^\alpha$ $\tilde{\mu}_B^\alpha = (\partial G / \partial n_B^\alpha)_{T,p,n_j \neq B}$ $= \mu_B^{\alpha\circ} + RT \ln a_B$ $+ z_B F \phi^\alpha$	V J mol ⁻¹	10 1, 11
densidade de carga superficial (de superfície)	σ	$\sigma = Q_s/A$	C m ⁻²	12
potencial de eletrodo	E, U		V	13
diferença de potencial de uma célula eletroquímica, potencial de célula	E_{cel}, U_{cel}	$E_{cel} = E_D - E_E$	V	14
número de elétrons de uma reação eletroquímica (número de carga)	z, n	$z = \nu_e $	1	15

(10) $\Delta\phi$ é a diferença de potencial interno entre pontos no seio das fases α e β ; é mensurável apenas se as fases forem de composição idêntica.

(11) O potencial eletroquímico do **ión** B numa fase é a energia de Gibbs molar parcial do **ión**. O nome especial “potencial eletroquímico”, e o til no símbolo $\tilde{\mu}_B$, são utilizados para lembrar que para um **ión** a energia de Gibbs molar parcial depende do potencial interno ϕ , bem como da composição química. A diferença de potencial eletroquímico do **ión** B entre duas fases α e β de composição química e potencial interno diferentes é dada por

$$\tilde{\mu}_B^\alpha - \tilde{\mu}_B^\beta = \mu_B^{\alpha\circ} - \mu_B^{\beta\circ} + RT \ln(a_B^\alpha/a_B^\beta) + z_B F(\phi^\alpha - \phi^\beta)$$

Geralmente não é possível separar o termo dependente da composição do termo dependente do potencial interno, porque não é possível medir nem a atividade relativa a_B de um **ión**, nem a diferença de potencial interno entre duas fases de composição química diferente. O potencial eletroquímico, contudo, é sempre bem definido e, num sistema multifásico com fases com diferentes potenciais internos, o equilíbrio referente à transferência do **ión** B entre fases é alcançado quando o seu potencial eletroquímico é o mesmo em todas as fases.

(12) Q_s é a carga em um dos lados da interface, A é a área superficial (de superfície). Para o caso de **eletrodos** metálicos e semicondutores, por convenção a carga refere-se ao lado do **eletrodo**.

(13) O valor absoluto do potencial de **eletrodo** não pode ser medido, e por esta razão E é sempre indicado em relação ao potencial de um **eletrodo** de referência, *e.g.*, um **eletrodo** de hidrogênio padrão (EHP) (vide Secção 2.13.1 (vi), p. 79). O conceito de um potencial de **eletrodo absoluto** é discutido em [106].

(14) Os dois **eletrodos** de uma célula eletroquímica podem ser distinguidos pelos subscritos E (esquerda) e D (direita), ou 1 e 2. Isto facilita a representação da célula num diagrama de célula (vide Secção 2.13.1 (iii), p. 78). E_E e E_D são os potenciais desses dois **eletrodos**. Em Engenharia Eletroquímica, a voltagem da célula é exclusivamente denotada por U . O valor limite de E_{cel} , quando a corrente que flui na célula é zero, estando estabelecidos todos os equilíbrios de transferência de carga e químicos locais, foi anteriormente denominado de **fem** (força eletromotriz). O nome força eletromotriz e o símbolo **fem** já não são recomendados, visto que uma diferença de potencial não é uma força.

(15) z (ou n) é o número de **elétrons** na reação de **eletrodo** balanceada (*Port.: acertada*). É um número inteiro positivo, igual a $|\nu_e|$, quando ν_e é o coeficiente estequiométrico do **elétron** na reação de **eletrodo**. O símbolo n é comumente utilizado sempre que não haja risco de confusão com a **quantidade de substância**.

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
potencial de eletrodo padrão	E^\ominus	$E^\ominus = -\Delta_r G^\ominus / zF$	V	16, 17
potencial de eletrodo de equilíbrio (de uma reação eletroquímica)	E_{eq}	$E_{\text{eq}} = E^\ominus - (RT/zF) \sum_i \nu_i \ln a_i$	V	15–18
potencial formal	$E^{\oplus'}$	$E_{\text{eq}} = E^{\oplus'} - (RT/zF) \sum_i \nu_i \ln(c_i/c^\ominus)$	V	15, 19
potencial de junção líquida	E_j			20
corrente elétrica	I	$I = dQ/dt$	A	21
densidade de corrente elétrica	j, \mathbf{j}	$j = I/A$	A m^{-2}	22
corrente faradaica	I_F	$I_F = I_c + I_a$	A	23
constante de velocidade de redução	k_c	$I_c = -nFAk_c \prod_B (c_B')^{n_B}$	(varia)	1, 15, 24
constante de velocidade de oxidação	k_a	$I_a = nFAk_a \prod_B (c_B')^{n_B}$	(varia)	1, 15, 24

(16) Os símbolos $^\ominus$ e $^\oplus$ são ambos utilizados para indicar o estado padrão, e são igualmente aceitos/tes.

(17) O potencial padrão é o valor do *potencial de equilíbrio* de um eletrodo sob condições padrão. $\Delta_r G^\ominus$ é a energia de Gibbs padrão dessa reação de eletrodo, escrita como uma redução, referida à do eletrodo de hidrogênio padrão (vide também Secção 2.13.1 (vi), p. 79). O potencial de eletrodo atinge seu *valor de equilíbrio* se nenhuma corrente flui através da célula e estão estabelecidos todos os equilíbrios locais de transferência de carga através das fronteiras de fase que são representadas no diagrama de célula (exceto para possíveis junções eletrólito-eletrólito) bem como os equilíbrios químicos locais dentro das fases.

(18) Equação de Nernst. $\sum \nu_i \ln a_i$ diz respeito à reação de eletrodo, onde a_i são as atividades das espécies que nela participam; ν_i são os coeficientes estequiométricos dessas espécies na equação para a reação de eletrodo, escrita como uma redução, ν_i é positivo para produtos e negativo para reagentes. O potencial de equilíbrio é também chamado de *potencial de Nernst*, ou *potencial reversível*.

(19) $E^{\oplus'}$ é calculado em experimentos (*Port.*: experiências) eletroquímicos/as nos/as quais as concentrações das várias espécies são conhecidas, mas não as suas atividades. O seu valor depende da composição da solução eletrolítica. O argumento de \ln é adimensional, a concentração c_i é normalizada através da divisão pela concentração padrão c^\ominus , sendo que usualmente $c^\ominus = 1 \text{ mol dm}^{-3}$ para espécies solúveis.

(20) E_j é a diferença de potencial de Galvani entre duas soluções eletrolíticas em contato.

(21) Q é a carga transferida através do circuito externo da célula.

(22) Formalmente, a densidade de corrente é um vetor, $dI = \mathbf{j} \cdot \mathbf{e}_n dA$ (vide Secção 2.3, nota 2, p. 16).

(23) I_F é a corrente que atravessa a interface eletrodo|solução, resultante da transferência de carga devida à reação de eletrodo reagentes $+ ne^- \rightarrow$ produtos. I_c é a corrente *catódica* parcial devido à reação de redução, I_a é a corrente *anódica* parcial devido à reação de oxidação. Por definição I_c é negativa e I_a positiva. No potencial de equilíbrio, $I_a = -I_c = I_0$ (a corrente de troca) e $j_a = -j_c = j_0$ (a densidade de corrente de troca). I ou j podem alcançar valores limites, indicados pelo subscrito lim, em adição aos subscritos F, c, ou a.

(24) Para uma reação de primeira ordem, a unidade SI é m s^{-1} . Aqui n (ou z) é o número de elétrons transferidos na reação eletroquímica, c_B' é a concentração na interfase, n_B é a ordem da reação com respeito à entidade B. Os símbolos anteriormente usados k_{red} , k_f e \overleftarrow{k} (para k_c) e k_{ox} , k_b e \overleftarrow{k} (para k_a) não são recomendados.

Nome	Símbolo	Definição	unidade SI	Notas
coeficiente de transferência	α, α_c	$\alpha_c = -(RT/nF)d(\ln k_c)/dE$	1	15, 25
sobrepotencial	η, E_η	$\eta = E - E_{\text{eq}}$	V	
coeficiente de Tafel	b	$b = (\partial E / \partial \ln I_F)_{c_i, T, p}$	V	26
coeficiente de transferência de massa	k_d	$k_{d,B} = \nu_B I_{\text{lim},B} / nFcA$	m s^{-1}	1, 15, 27
potencial eletrocinético (potencial ζ)	ζ		V	
condutividade	$\kappa, (\sigma)$	$\mathbf{j} = \kappa \mathbf{E}$	S m^{-1}	22, 28
mobilidade elétrica	$u, (m)$	$u_B = v_B / \mathbf{E} $	$\text{m}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$	1, 29
condutividade iônica, condutividade molar de um íon	λ	$\lambda_B = z_B F u_B$	$\text{S m}^2 \text{ mol}^{-1}$	1, 30, 31
condutividade molar	Λ	$\Lambda(A_{\nu+}B_{\nu-}) = \nu_+\lambda_+ + \nu_-\lambda_-$	$\text{S m}^2 \text{ mol}^{-1}$	1, 30, 31
número de transporte	t	$t_B = \lambda_{BCB} / \sum_i \lambda_i c_i = j_B / \sum_i j_i$	1	1

(25) α ou α_c também é designado *coeficiente de transferência catódico*. Analogamente, o *coeficiente de transferência anódico* é definido como $\alpha_a = (RT/nF)d(\ln k_a)/dE$. No mesmo potencial, $\alpha_a = 1 - \alpha_c$. O *fator de simetria*, β , é o coeficiente de transferência catódico, α_i , de uma etapa de reação elementar i , na qual somente um *elétron* é transferido.

(26) O coeficiente de Tafel b é uma grandeza experimental a partir da qual podem ser obtidas informações cinéticas.

(27) O coeficiente de transferência de massa é o fluxo dividido pela concentração. Para uma transferência de massa no estado estacionário, $k_{d,B} = D_B / \delta_B$, onde δ_B é a espessura da camada difusa (a qual depende do modelo adotado) e D_B é o coeficiente de difusão da entidade B. Para mais informações, vide [17].

(28) Anteriormente, a condutividade era chamada de condutância específica. \mathbf{E} é o vetor intensidade do campo elétrico.

(29) v_B é a velocidade de migração de entidades B e $|\mathbf{E}|$ é a intensidade do campo elétrico dentro da fase em questão.

(30) Muitas vezes, usa-se a unidade $\text{S cm}^2 \text{ mol}^{-1}$ para a condutividade molar. A condutividade é igual a $\kappa = \sum \lambda_i c_i$.

(31) É importante especificar a entidade a que a condutividade molar se refere. É prática normal escolher a entidade como sendo $1/z_B$ de um íon de número de carga z_B , com a finalidade de normalizar a carga iônica, de modo que, por exemplo, as condutividades molares para os íons potássio, bário e lantâno sejam indicadas como $\lambda(K^+)$, $\lambda((1/2) Ba^{2+})$, ou $\lambda((1/3) La^{3+})$, a assim chamada condutividade molecular de *entidades equivalentes* (anteriormente chamada de *condutividade equivalente*) [115].

2.13.1 Convenções de sinal e notação em Eletroquímica⁹

(i) Células eletroquímicas

Células eletroquímicas consistem em pelo menos dois condutores de *elétrons* (usualmente metálicos) em contato com condutores *iônicos* (eletrólitos). O fluxo de corrente nas células eletroquímicas pode ser zero ou diferente de zero. Células eletroquímicas com fluxo de corrente podem operar tanto como *células galvânicas*, nas quais reações químicas ocorrem espontaneamente e energia química é convertida em energia elétrica, quanto como *células eletrolíticas*, nas quais energia elétrica é

⁹De acordo com a “Convenção de Estocolmo” de 1953 [103].

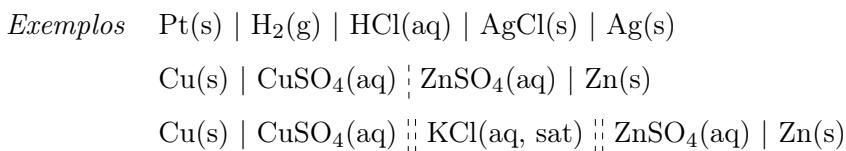
convertida em energia química. Em ambos os casos, parte da energia é convertida em calor (positivo ou negativo).

(ii) Eletrodo

Atualmente existem dois usos para o termo **eletrodo**, que são ou (i) o condutor de **elétrons** (usualmente um metal) conectado a circuitos externos ou (ii) a meia-célula formada por um condutor de **elétrons** e, pelo menos, um condutor **iônico**. Geralmente a última variante tem sido favorecida em Eletroquímica.

(iii) Representação de células eletroquímicas

Células eletroquímicas são representadas por diagramas, tais como os dos exemplos a seguir:



Deve ser usada uma única barra vertical (|) para representar uma fronteira de fase, uma barra vertical tracejada (|) para representar uma junção entre líquidos miscíveis, e barras verticais duplas tracejadas (||) para representar uma junção líquida, na qual o potencial de junção é suposto ser suprimido.

(iv) Diferença de potencial de uma célula eletroquímica

A diferença de potencial de uma célula eletroquímica é medida entre um condutor metálico ligado ao **eletrodo** do lado direito do diagrama da célula e um condutor metálico idêntico ligado ao **eletrodo** do lado esquerdo. Diferenças de potencial elétrico podem ser medidas somente entre dois pedaços de material da mesma composição. Na prática, são quase sempre dois pedaços de cobre ligados aos **eletrodos** da célula.

Na fronteira cobre | material do **eletrodo** há uma diferença de potencial devida ao contato; o seu valor está incorporado na constante à qual o potencial do **eletrodo** está referenciado.

Devido às diferentes velocidades de difusão dos **ânions** e **cátions** de uma solução para a outra, surgem potenciais de junção líquida, E_j , sempre que duas soluções de composição diferentes são imiscíveis ou são separadas por uma membrana ou algum outro meio para evitar que se misturem. Se o equilíbrio não é atingido nessas junções, as células podem incluir potenciais de junção desconhecidos. Comumente, utilizam-se pontes salinas (ver, por exemplo, a terceira célula na Secção 2.13.1 (iii)) para minimizar ou para estabilizar as contribuições de potenciais de junção (líquida), na interface de duas soluções eletrolíticas miscíveis, para a diferença de potencial medida. Na interface de duas soluções eletrolíticas imiscíveis, pode ser atingida uma distribuição termodinâmica de potencial devido à partição de carga no equilíbrio.

(v) Potencial padrão de uma reação de célula eletroquímica

Se nenhuma corrente flui através da célula, e todos os equilíbrios de transferência de carga locais e equilíbrios químicos locais de cada reação de **eletrodo** são atingidos, a diferença de potencial da célula relaciona-se com a energia de Gibbs da reação total da célula pela equação

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

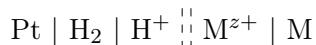
supondo-se que os potenciais de junção são desprezáveis. Se a reação da célula eletroquímica como escrita ocorre espontaneamente, $\Delta_r G$ é negativo e E_{cel} positivo. Se a célula é escrita com os **eletrodos** na ordem inversa, $\Delta_r G$ é positivo e E_{cel} é negativo. O potencial de equilíbrio da célula, *i.e.*, quando nenhuma corrente flui, é dado por

$$E_{\text{cel,eq}} = E^\ominus_{\text{cel,eq}} - \frac{RT}{zF} \sum_i \nu_i \ln a_i$$

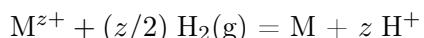
a_i refere-se às atividades das espécies que participam da reação da célula e ν_i são os coeficientes estequiométricos dessas espécies na equação escrita para a reação de célula (vide também notas 15 e 16, p. 76).

(vi) Potencial de eletrodo padrão (de uma reação eletroquímica)

O *potencial de eletrodo padrão* de uma reação eletroquímica, abreviado como potencial padrão, é definido como o potencial padrão de uma célula hipotética, na qual o *eletrodo* (meia-célula) da esquerda do diagrama da célula é o *eletrodo de hidrogênio padrão* (EHP) e o *eletrodo* da direita é o *eletrodo* em foco. Isso implica que a reação de célula envolve sempre a oxidação de hidrogênio molecular. O *eletrodo de hidrogênio padrão* é um *eletrodo* de platina em contato com uma solução de H^+ com atividade unitária e saturada com H_2 gasoso com uma fugacidade referenciada à pressão padrão de 10^5 Pa (vide Secção 2.11.1 (v), p. 66). Para um *eletrodo* metálico em equilíbrio com íons solvatados, o diagrama de célula é



e relaciona-se com a reação



Esse diagrama pode ser abreviado como $E(M^{z+}/M)$, mas a ordem dos símbolos não deve ser invertida. Note-se que o *eletrodo de hidrogênio padrão* como definido é restrito a soluções aquosas. Para mais informações sobre medidas de potenciais de *eletrodo* em sistemas aquosos e não aquosos, vide [103, 107].

(vii) Ânodo, cátodo

Os termos ânodo e cátodo somente podem ser aplicados a células eletroquímicas em que flui uma corrente líquida. Numa célula em equilíbrio, são usados os termos polo positivo e polo negativo. Um *ânodo* é um *eletrodo* no qual a reação eletroquímica predominante é uma oxidação; *elétrons* são produzidos (numa célula galvânica) ou extraídos (numa célula eletrolítica). Um *cátodo* é um *eletrodo* no qual a reação eletroquímica predominante é uma redução que consome os *elétrons* provenientes do ânodo e que chegam ao cátodo através do circuito externo. Visto que *elétrons* fluem de potenciais elétricos mais baixos para mais altos (mais positivos), numa célula galvânica eles fluem do ânodo (o *eletrodo* negativo) para o cátodo (o *eletrodo* positivo), enquanto que numa célula eletrolítica os *elétrons* extraídos do ânodo (o *eletrodo* positivo) por uma fonte externa fluem para o cátodo (o *eletrodo* negativo).

Note-se que em baterias recarregáveis como a bateria de chumbo-ácido (acumulador de chumbo), o *eletrodo* positivo é um cátodo durante a descarga e um ânodo durante a carga, e o *eletrodo* negativo é o ânodo durante a descarga e o cátodo durante a carga. Para evitar confusão, recomenda-se que para baterias recarregáveis somente sejam usados os termos *eletrodos* (ou placas) positivo e negativo. Para informações mais detalhadas sobre potenciais de *eletrodo*, vide [109].

(viii) Definição de pH [116]

A grandeza pH é definida em termos da atividade de íons hidrogênio($1+$) (*íons hidrogênio*) em solução:

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

onde a_{H^+} é a atividade do hidrogênio($1+$) (*ion hidrogênio*) em solução, $H^+(aq)$, e γ_{m, H^+} é o coeficiente de atividade de $H^+(aq)$ com base em molalidade para a molalidade m_{H^+} . O símbolo p é interpretado como um operador ($px = -\lg x$) [116, 117] (vide Secção 4.1, p. 107), tendo como única exceção o símbolo pH [117]. O símbolo pH é também uma exceção às regras para símbolos e grandezas (vide Secção 1.3.1, p. 5). A molalidade padrão m^\ominus é escolhida como sendo igual a 1 mol kg^{-1} . Dado que o pH é definido em termos de uma grandeza que não pode ser medida independentemente, a equação acima só pode ser considerada como uma definição *nacional*.

O estabelecimento de padrões primários de pH requer a aplicação do conceito do “método primário de medida” [116], garantindo-se total rastreabilidade dos resultados de todas as medidas e correspondentes incertezas. Qualquer limitação na teoria ou na determinação de variáveis experimentais deve ser incluída na incerteza estimada do método.

O método primário de medida de pH envolve o uso de uma célula sem transferência, conhecida como *célula de Harned* [118]:



A aplicação da equação de Nernst à célula acima leva à relação

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

onde E é a diferença de potencial da célula e E^\ominus o potencial padrão do *eletrodo* AgCl|Ag. Pode-se rearranjar esta equação, obtendo-se

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

E é determinada experimentalmente e a grandeza $-\lg(a_{\text{H}^+}\gamma_{\text{Cl}^-})$ é obtida por extração a $m_{\text{Cl}^-}/m^\ominus = 0$. O valor de γ_{Cl^-} é calculado usando-se a convenção de Bates-Guggenheim [117], baseada na teoria de Debye-Hückel. Seguidamente a grandeza $-\lg(a_{\text{H}^+})$ é calculada e identificada como pH(PP), onde PP significa padrão primário. As incertezas nas duas estimativas são tipicamente $\pm 0,001$ em $-\lg(a_{\text{H}^+}\gamma_{\text{Cl}^-})^\ominus$, e $\pm 0,003$ em pH, respectivamente.

Materiais para tampões de pH padrões primários devem também atender aos requisitos apropriados para materiais de referência incluindo pureza e estabilidade química, e aplicabilidade da convenção de Bates-Guggenheim para a estimativa de $\lg(\gamma_{\text{Cl}^-})$. Esta convenção requer que a força iônica seja $\leq 0,1 \text{ mol kg}^{-1}$. Tampões padrões primários também devem levar a potenciais de junção líquida pequenos quando usados em células com junções líquidas. Existem também padrões secundários, pH(PS), mas estes envolvem um maior grau de incerteza nos valores medidos.

Na medição experimental de pH, geralmente usam-se células que envolvem junções líquidas nas quais, consequentemente, estão presentes potenciais de junção líquida E_j [116]. Normalmente, não são realizadas medidas de pH usando o *eletrodo* de Pt|H₂, mas sim o *eletrodo* de vidro (ou outro seletivo a H⁺), cujo fator de resposta (dE/dpH) geralmente se desvia do coeficiente angular de Nernst. As incertezas associadas são significativamente maiores que as associadas às medidas fundamentais usando-se a célula de Harned. Não obstante, a incorporação das incertezas para o método primário, e para todas as medidas posteriores, permite que as incertezas para todos os procedimentos sejam vinculadas aos padrões primários através de uma cadeia ininterrupta de comparações.

Existem valores de referência para padrões em D₂O e misturas aquosas-solventes orgânicos [119].

2.14 Química de Coloides e de Superfícies

As presentes recomendações baseam-se noutras mais abrangentes da IUPAC [1.e–1.h] e [120–123]. A caracterização de catalisadores está descrita em [124] e as grandezas relacionadas com macromoléculas em [125].

Nome	Símbolo	Definição	Unidade SI	Notas
área superficial específica	a_s, a, s	$a_s = A/m$	$\text{m}^2 \text{ kg}^{-1}$	1
quantidade superficial de B	n_B^s		mol	2
quantidade adsorvida de B	n_B^a		mol	2
quantidade de excesso superficial de B	n_B^σ		mol	3
concentração de excesso superficial de B	$\Gamma_B, (\Gamma_B^\sigma)$	$\Gamma_B = n_B^\sigma/A$	mol m^{-2}	3
concentração de excesso superficial total	$\Gamma, (\Gamma^\sigma)$	$\Gamma = \sum_i \Gamma_i$	mol m^{-2}	
área por molécula	a, σ	$a_B = A/N_B^a$	m^2	4
área por molécula em uma monocamada preenchida	a_m, σ_m	$a_{m,B} = A/N_{m,B}$	m^2	4
cobertura superficial	θ	$\theta = N_B^a/N_{m,B}$	1	4
ângulo de contato	θ		rad, 1	
espessura do filme	t, h, δ		m	
espessura da camada	τ, δ, t		m	
(superficial ou interfacial)				
tensão superficial, tensão interfacial	γ, σ	$\gamma = (\partial G/\partial A_s)_{T,p,n_i}$	$\text{N m}^{-1}, \text{J m}^{-2}$	
tensão do filme	Σ_f	$\Sigma_f = (\partial G/\partial A_f)_{T,p,n_i}$	N m^{-1}	5
comprimento de Debye da camada difusa	L_D	$L_D = \kappa^{-1}$	m	6
massas molares médias				
média em número	M_n	$M_n = \sum_i n_i M_i / \sum_i n_i$	kg mol^{-1}	
média em massa	M_m, M_w	$M_m = \sum_i n_i M_i^2 / \sum_i n_i M_i$	kg mol^{-1}	
média z	M_z	$M_z = \sum_i n_i M_i^3 / \sum_i n_i M_i^2$	kg mol^{-1}	
coeficiente de sedimentação	s	$s = v/a$	s	7
constante de van der Waals	λ		J	
constante de van der Waals	β, B		J	
retardada				
constante de van der Waals-Hamaker	A_H		J	
pressão superficial	π	$\pi = \gamma^0 - \gamma$	N m^{-1}	8

(1) O subscrito s designa qualquer área superficial em que possa ocorrer a absorção ou deposição de espécies. m designa a massa de um absorvente sólido.

(2) O valor de n_B^s depende da espessura atribuída à camada superficial (vide também nota 1, p. 51).

(3) Os valores de n_B^σ e γ_B dependem da convenção usada para definir a posição da superfície de Gibbs. Esses valores são obtidos através da quantidade de excesso superficial de B, ou da concentração superficial de B em relação aos valores que seriam aplicados se cada uma das duas fases fosse homogênea até a superfície demarcadora de Gibbs. Vide [1.e], e também as recomendações adicionais na próxima página.

Recomendações adicionais

O sobreescrito s denota as propriedades de uma superfície ou camada interfacial. Na presença de adsorção, pode ser substituído pelo sobreescrito a .

<i>Exemplos</i>	energia de Helmholtz da camada interfacial	A^s
	quantidade de substância adsorvida	n^a
	quantidade de O_2 adsorvido	$n^a(O_2)$ ou $n(O_2, a)$
	área por molécula B em uma monocamada	$a(B), a_B$

O sobreescrito σ é usado para denotar uma propriedade de excesso superficial em relação à superfície de Gibbs.

<i>Exemplo</i>	quantidade de excesso superficial (ou quantidade de Gibbs superficial) de B	n_B^σ
----------------	--	--------------

Em geral os valores de Γ_A e Γ_B dependem da posição escolhida para a superfície demarcadora de Gibbs. Contudo, as duas grandezas, $\Gamma_B^{(A)}$ e $\Gamma_B^{(n)}$ (e correspondentemente $n_B^{\sigma(A)}$ e $n_B^{\sigma(n)}$), podem ser definidas de tal modo que os seus valores passam a ser independentes dessa escolha (vide [1.e]). $\Gamma_B^{(A)}$ é a concentração de excesso superficial *relativo* de B em relação a A, ou de modo mais simples a adsorção relativa de B; é o valor de Γ_B quando a superfície é escolhida de tal modo que $\Gamma_A = 0$. $\Gamma_B^{(n)}$ é denominada concentração de excesso superficial *reduzido* de B ou, de modo mais simples, adsorção reduzida de B; esta grandeza corresponde ao valor de Γ_B quando a superfície escolhida é tal que o excesso total $\Gamma = \sum_i \Gamma_i = 0$.

As propriedades das fases (α, β, γ) podem ser denotadas por meio dos sobreescritos correspondentes.

<i>Exemplos</i>	tensão superficial da fase α	γ^α
	tensão interfacial entre as fases α e β	$\gamma^{\alpha\beta}$

Normalmente, os símbolos de grandezas termodinâmicas divididas pela área superficial são as letras minúsculas correspondentes; uma alternativa é usar-se um acento circunflexo.

<i>Exemplo</i>	entropia interfacial por unidade de área	$s^s (= \hat{s}^s) = S^s/A$
----------------	--	-----------------------------

As abreviações a seguir descritas são usadas em Química de Coloides:

ccc	concentração de coagulação crítica
cmc	concentração micelar crítica
pie	ponto isoelétrico
pcz	ponto de carga zero

(Continuação das notas)

(4) N_B^a é o número de moléculas adsorvidas ($N_B^a = L n_B^a$), e $N_{m,B}^a$ é o número de moléculas adsorvidas numa monocamada preenchida. A definição aplica-se a entidades B.

(5) Na equação, A_f é a área do filme.

(6) O comprimento de Debye característico [1.e] e [123] ou comprimento de blindagem de Debye [123] L_D surge na teoria de Gouy-Chapman e na teoria de carga espacial de semicondutores.

(7) Na definição, v é a velocidade de sedimentação e a é a aceleração da gravidade ou de centrifugação. O símbolo para um coeficiente de sedimentação limite é $[s]$, para um coeficiente de sedimentação reduzido s^0 , e para um coeficiente de sedimentação reduzido limite $[s^0]$; para mais detalhes, vide [1.e].

(8) Na definição, γ^0 corresponde à tensão superficial da superfície limpa e γ à da superfície recoberta.

2.14.1 Estrutura de superfícies [126]

(i) Designações de faces monocristalinas e de vetores

Os índices de Miller 3D (hkl) são usados para especificar uma face correspondente a um plano reticular (hkl). As famílias de faces simetricamente equivalentes são designadas por hkl . As direções vetoriais são designadas como $[hkl]$ e as famílias de direções vetoriais simetricamente equivalentes por $\langle hkl \rangle$.

(ii) Notações para superfícies escalonadas (para redes terminadas idealmente)

As superfícies escalonadas (que frequentemente consistem em degraus de altura monoatômica e terraços com largura arbitrária) com índices de Miller gerais (hkl) são visualizadas como sendo constituídas por planos alternados com baixos índices de Miller ($h_s k_s l_s$) para os espelhos dos degraus e ($h_t k_t l_t$) para os planos dos terraços. Usando-se a notação para degraus, uma superfície como esta é designada como

$$(hkl) = n(h_t k_t l_t) \times (h_s k_s l_s)$$

onde n se refere à largura do terraço em unidades de colunas de átomos.

Exemplo A superfície (755) de um sólido cfc (cúbico de faces centradas) com terraços orientados na direção (111) e faces dos degraus orientadas na direção (100) é designada, na notação escalonada, por $6(111) \times (100)$.

A notação para microfacetas permite descrever extremidades superficiais mais complexas, usando-se a decomposição, em três orientações independentes, de facetas com baixos índices ($h_1 k_1 l_1$), ($h_2 k_2 l_2$) e ($h_3 k_3 l_3$):

$$(hkl) = a_\lambda^1(h_1 k_1 l_1) + a_\mu^2(h_2 k_2 l_2) + a_\nu^3(h_3 k_3 l_3).$$

Os fatores a^β são coeficientes de decomposição vetorial simples de (hkl) nos três vetores das microfacetas representados pelos índices de Miller, enquanto que os subscritos λ , μ e ν indicam os tamanhos relativos das facetas em termos de células unitárias 2D sobre cada faceta.

Exemplo A superfície (10,8,7) de um sólido cúbico de faces centradas (cfc), com terraços orientados em (111) e degraus em zigue-zague com orientações alternadas (11̄1) e (100), é designada na notação para microfacetas como
 $(10,8,7) = [(15/2)_{15}(111) + (1/2)_1(11\bar{1}) + 2_2(100)]$.

(iii) Notações para super-redes em superfícies

Notação matricial: uma super-rede 2D com vetores de base $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ num substrato de, por exemplo, natureza maciça, com vetores de base de superfície 2D $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ pode ser descrita pelas relações: $\mathbf{b}_1 = m_{11}\mathbf{a}_1 + m_{12}\mathbf{a}_2$ e $\mathbf{b}_2 = m_{21}\mathbf{a}_1 + m_{22}\mathbf{a}_2$, definindo assim uma matriz $M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}$ que especifica inequivocamente a super-rede. Se os elementos da matriz são todos inteiros, a super-rede é descrita como sendo comensurável com a rede do substrato.

Notação de Wood: em muitos casos, a super-rede pode ser indicada como $i \left(\frac{\mathbf{b}_1}{a_1} \times \frac{\mathbf{b}_2}{a_2} \right) R\alpha^\circ$, onde i é substituído por c para super-redes centradas ou por p para super-redes primitivas (frequentemente, p é omitido), e α é um ângulo de rotação em relação aos vetores de base do substrato (quando $\alpha = 0$, omite-se a sua descrição).

Exemplo Um tabuleiro de xadrez, constituído por casas pretas e brancas, é uma super-rede em relação ao conjunto subjacente de todas as casas.

Esta super-rede pode ser designada por uma matriz $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$, que é equivalente à indicação de Wood $(\sqrt{2} \times \sqrt{2}) R45^\circ$ ou pela descrição alternativa: $c(2 \times 2)$.

(iv) Símbolos

a_1, a_2	vetores de base de um substrato 2D
a_1^*, a_2^*	vetores de base de um substrato recíproco 2D
b_1, b_2	vetores de base de uma super-rede 2D
b_1^*, b_2^*	vetores de base de uma super-rede recíproca 2D
g	vetor de uma rede recíproca 2D
hk	índices de Miller 2D
hkl	índices de Miller 3D
M	matriz para a notação de uma super-rede
z	coordenada perpendicular à superfície
θ	cobertura superficial
Θ_D	temperatura de Debye
$\Delta\phi_W$	variação da função trabalho
λ_e	percurso livre médio do elétron
ϕ_W	função trabalho

2.15 Propriedades de transporte

Os nomes e símbolos aqui recomendados estão de acordo com os recomendados pela IUPAP [4] e ISO [5.m]. Informações adicionais sobre **fenômenos** de transporte em sistemas eletroquímicos podem ser encontradas em [104].

Nas definições são usados os seguintes símbolos: massa (m), tempo (t), volume (V), área (A), densidade (ρ), velocidade (v), comprimento (l), viscosidade (η), pressão (p), aceleração da gravidade (g), coeficiente de expansão volumétrica (α), temperatura termodinâmica (T), tensão superficial (γ), velocidade do som (c), percurso livre médio (λ), frequência (f), difusividade térmica (a), coeficiente de transferência de calor (h), condutividade térmica (k), capacidade **calorífica** específica a pressão constante (c_p), coeficiente de difusão (D), fração da quantidade (x), coeficiente de transferência de massa (k_d), permeabilidade (μ), condutividade elétrica (κ), e densidade de fluxo magnético (B).

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Definição</i>	<i>Unidade SI</i>	<i>Notas</i>
fluxo de massa m	q_m	$q_m = dm/dt$	kg s^{-1}	1
densidade de fluxo de massa m	J_m	$J_m = q_m/A$	$\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$	2, 3
fluxo de calor, potênciia térmica	Φ, P	$\Phi = dQ/dt$	W	1
densidade de fluxo de calor	J_q	$J_q = \Phi/A$	W m^{-2}	3
condutância térmica	G	$G = \Phi/\Delta T$	W K^{-1}	
resistência térmica	R	$R = 1/G$	K W^{-1}	
condutividade térmica	λ, k	$\lambda = -J_q/(dT/dl)$	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	
coeficiente de transferência de calor $h, (k, K, \alpha)$	$h = J_q/\Delta T$		$\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$	
difusividade térmica	a	$a = \lambda/\rho c_p$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	
coeficiente de difusão	D	$D = -J_n/(dc/dl)$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	4
viscosidade, viscosidade dinâmica	η	$\eta = -\tau_{xz}(\partial V_x/\partial z)^{-1}$	Pa s	5
viscosidade volumétrica	κ	$\kappa = -\tau_{xx}(\nabla \cdot \mathbf{V})^{-1}$	Pa s	5
coeficiente de difusão térmica	D^T	$D^T = J_x c^{-1} (dT/dx)^{-1}$	$\text{m}^2 \text{K}^{-1} \text{s}^{-1}$	

(1) Pode definir-se uma grandeza vetorial, $\mathbf{q}_m = (dm/dt) \mathbf{e}$, onde \mathbf{e} é o vetor unitário na direção do escoamento, por vezes denominada “velocidade de escoamento” de m . Definições similares podem ser aplicadas a qualquer grandeza extensiva.

(2) A densidade de fluxo de moléculas, J_N , determina ou a velocidade à qual a superfície ficaria coberta, se cada molécula ficasse ligada à superfície, ou a velocidade de efusão através dum buraco na superfície. Ao estudar a exposição, $\int J_N dt$, de uma superfície a um gás, considerou-se útil usar o produto da pressão pelo tempo como uma medida dessa exposição, dado que este produto é igual à densidade de fluxo de moléculas, J_N , multiplicada pelo tempo: $J_N t = (1/4) C \bar{u} t$, onde C é a densidade de número de moléculas e \bar{u} a sua velocidade média. A unidade langmuir (símbolo L) corresponde à exposição de uma superfície a um gás a 10^{-6} Torr durante 1 s.

(3) Em edições anteriores, o termo “fluxo” foi usado para o que é agora denominado “densidade de fluxo”, em concordância com a IUPAP [4]. Para grandezas escalares, geralmente o termo “densidade” no nome de uma grandeza física significa “grandeza extensiva dividida pelo volume”, porém, para grandezas vetoriais que denotam escoamento ou fluxo, significa “grandeza extensiva dividida pela área”.

(4) c é a concentração de quantidade.

(5) Vide também Secção 2.2, p. 15; τ é o tensor tensão de cisalhamento.

2.15.1 Números característicos de transporte: grandezas de dimensão unitária

Nome	Símbolo	Definição	Notas
número de Reynolds	Re	$Re = \rho v l / \eta$	
número de Euler	Eu	$Eu = \Delta p / \rho v^2$	
número de Froude	Fr	$Fr = v / (lg)^{1/2}$	
número de Grashof	Gr	$Gr = l^3 g \alpha \Delta T \rho^2 / \eta^2$	
número de Weber	We	$We = \rho v^2 l / \gamma$	
número de Mach	Ma	$Ma = v / c$	
número de Knudsen	Kn	$Kn = \lambda / l$	
número de Strouhal	Sr	$Sr = lf / v$	
número de Fourier	Fo	$Fo = at / l^2$	
número de Péclet	Pe	$Pe = vl / a$	
número de Rayleigh	Ra	$Ra = l^3 g \alpha \Delta T \rho / \eta a$	
número de Nusselt	Nu	$Nu = hl / k$	
número de Stanton	St	$St = h / \rho v c_p$	
número de Fourier para transferência de massa	Fo^*	$Fo^* = Dt / l^2$	1
número de Péclet para transferência de massa	Pe^*	$Pe^* = vl / D$	1
número de Grashof para transferência de massa	Gr^*	$Gr^* = l^3 g \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)_{T,p} \left(\frac{\Delta x \rho}{\eta^2} \right)$	1
número de Nusselt para transferência de massa	Nu^*	$Nu^* = k_d l / D$	1, 2
número de Stanton para transferência de massa	St^*	$St^* = k_d / v$	1
número de Prandtl	Pr	$Pr = \eta / \rho a$	
número de Schmidt	Sc	$Sc = \eta / \rho D$	
número de Lewis	Le	$Le = a / D$	
número de Reynolds magnético	Rm, Re_m	$Rm = v \mu k l$	
número de Alfvén	Al	$Al = v (\rho \mu)^{1/2} / B$	
número de Hartmann	Ha	$Ha = Bl (\kappa / \eta)^{1/2}$	
número de Cowling	Co	$Co = B^2 / \mu \rho v^2$	

(1) Esta grandeza aplica-se ao transporte de matéria em misturas binárias [72].

(2) O nome número de Sherwood e o símbolo Sh têm sido amplamente usados para esta grandeza.

3 DEFINIÇÕES E SÍMBOLOS PARA UNIDADES

3.1 O Sistema Internacional de Unidades (SI)

O Sistema Internacional de Unidades (SI) foi adotado pela 11^a Conferência Geral de Pesos e Medidas (CGPM) em 1960 [3]. É um sistema de unidades coerente construído a partir de sete *unidades de base do SI*, uma para cada uma de sete grandezas de base dimensionalmente independentes (vide Secção 1.2, p. 4): metro, kilograma ou quilograma, segundo, ampere, kelvin, mol e candela para as grandezas de base comprimento, massa, tempo, corrente elétrica, temperatura termodinâmica, **quantidade de substância** e intensidade luminosa, respectivamente. As definições das unidades de base do SI são dadas na Secção 3.3, p. 91. As *unidades SI derivadas* são expressas como produtos de potências de unidades de base, por analogia com as correspondentes relações entre grandezas físicas. Se nenhum fator numérico diferente de 1 for usado nas equações que definem as unidades derivadas, então as unidades derivadas definidas deste modo são denominadas *unidades derivadas coerentes*. As unidades de base do SI e as unidades SI derivadas sem quaisquer prefixos de múltiplo ou submúltiplo formam um conjunto de unidades coerente, as quais são designadas como as *unidades SI coerentes*.

No Sistema Internacional de Unidades existe apenas uma unidade SI coerente para cada grandeza física. Esta é ou a própria unidade de base do SI apropriada (vide Secção 3.2, p. 90) ou a unidade SI derivada apropriada (vide Secções 3.4 e 3.5, p. 93 e 94, respectivamente). No entanto, qualquer um dos prefixos decimais aprovados, denominados *prefixos SI*, pode ser usado para obter múltiplos ou submúltiplos decimais de unidades do SI (vide Secção 3.6, p. 95). As unidades do SI e os múltiplos e submúltiplos decimais obtidos com os prefixos SI são denominados de *conjunto completo de unidades SI*, ou simplesmente as *unidades SI*, ou as *unidades do SI*.

Recomenda-se que sejam usadas apenas unidades SI em ciência e tecnologia (com prefixos SI onde apropriado). Quando houver razões especiais para criar uma exceção a esta regra, recomenda-se que se definam sempre as unidades em termos de unidades SI.

3.2 Nomes e símbolos para as unidades de base do SI

Os símbolos aqui listados foram acordados internacionalmente e não devem ser alterados noutras línguas ou grafias. Sobre a impressão de símbolos para unidades, vide Secções 1.3 e 1.4, p. 4 e p. 6.

<i>Grandeza de base</i>	<i>Nome</i>	<i>Unidade de base do SI</i>	<i>Símbolo</i>
comprimento	metro		m
massa	kilograma ou quilograma		kg
tempo	segundo		s
corrente elétrica	ampere		A
temperatura termodinâmica	kelvin		K
quantidade de substância	mol		mol
intensidade luminosa	candela		cd

3.3 Definições das unidades de base do SI

As seguintes definições das sete unidades de base do SI correspondem às adotadas pela Conferência Geral de Pesos e Medidas (CGPM) [3].

metro (símbolo: m)

O metro é o comprimento do trajeto percorrido pela luz no vácuo durante um intervalo de tempo de $1/299\,792\,458$ de segundo.

(17^a CGPM, 1983)

kilograma ou quilograma (símbolo: kg)

O kilograma é a unidade de massa; é igual à massa do protótipo internacional do kilograma.

(3^a CGPM, 1901)¹⁰

segundo (símbolo: s)

O segundo é a duração de 9 192 631 770 períodos da radiação correspondente à transição entre os dois níveis hiperfinos do estado fundamental do átomo de césio-133.

(13^a CGPM, 1967)

Esta definição refere-se a um átomo de césio em repouso à temperatura de 0 K.
(CIPM, 1997)

Nesta definição, subentende-se que o átomo de Cs à temperatura de $T = 0$ K não está perturbado por radiação de corpo negro. A frequência de padrões primários de frequência deve, portanto, ser corrigida pelo desvio de frequência devido à radiação ambiente, como recomendado pela Comissão Consultiva para Tempo e Frequência (CCTF, 1999).

ampere (símbolo: A)

O ampere é a intensidade de uma corrente elétrica constante que, se mantida em dois condutores paralelos, retilíneos, de comprimento infinito, de secção circular desprezável, e situados à distância de 1 metro entre si, no vácuo, produz entre estes condutores uma força igual a 2×10^{-7} newton por metro.
(9^a CGPM, 1948)

kelvin (símbolo: K)

O kelvin, unidade de temperatura termodinâmica, é a fração 1/273,16 da temperatura termodinâmica do ponto triplo da água.

(13^a CGPM, 1967)

Essa definição refere-se à água com a composição isotópica definida exatamente pelas razões entre as seguintes **quantidades de substância**: 0,000 155 76 mol de ^2H por mol de ^1H , 0,000 379 9 mol de ^{17}O por mol de ^{16}O , e 0,002 005 2 mol de ^{18}O por mol de ^{16}O .
(CIPM, 2005)¹¹

¹⁰O kilograma é a única unidade de base que não é definida por meio de uma medida efetuada num sistema definido por constantes microscópicas naturais ou numa montagem experimental derivada de um tal sistema. Ao contrário, é definido por um artefato humano (o protótipo internacional do kilograma). Consequentemente, estão atualmente em discussão definições alternativas do kilograma [127–129].

¹¹Vide também Secção 2.11, nota 2, p. 60.

mol (símbolo: mol)

1. O/A mol é a **quantidade de substância** de um sistema que contém tantas entidades elementares quantos átomos existem em 0,012 kilograma de carbono-12; o seu símbolo é “mol”.

2. Quando se utiliza o/a mol, as entidades elementares devem ser especificadas, podendo ser átomos, moléculas, íons, elétrons, assim como outras partículas ou agrupamentos especificados de tais partículas.

(14^a CGPM, 1971)

Nesta definição, entende-se que se faz referência a átomos não ligados de carbono-12, em repouso e no seu estado fundamental.

(CIPM, 1980)

Exemplos do uso do/da mol

1 mol de $^1\text{H}_2$ contém cerca de $6,022 \times 10^{23}$ moléculas de $^1\text{H}_2$, ou $12,044 \times 10^{23}$ átomos de ^1H

1 mol de HgCl tem uma massa de 236,04 g

1 mol de Hg_2Cl_2 tem uma massa de 472,09 g

1 mol de Hg_2^{2+} tem uma massa de 401,18 g e uma carga de 192,97 kC

1 mol de $\text{Fe}_{0,91}\text{S}$ tem uma massa de 82,88 g

1 mol de e^- tem uma massa de 548,58 µg e uma carga de -96,49 kC

1 mol de **fótons** cuja frequência é 5×10^{14} Hz tem uma energia de cerca de 199,5 kJ

A especificação da entidade não implica que as entidades sejam idênticas: pode-se ter 1 mol de uma mistura de isótopos ou de uma mistura de gases.

candela (símbolo: cd)

A candela é a intensidade luminosa, numa dada direção, de uma fonte que emite uma radiação monocromática de frequência 540×10^{12} hertz e que tem uma intensidade radiante nessa direção de 1/683 watt por esferorradiano.

(16^a CGPM, 1979)

3.4 Unidades SI derivadas com nomes e símbolos especiais

<i>Grandeza derivada</i>	<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Expressa em termos de outras unidades SI</i>	<i>Notas</i>
ângulo plano	radiano	rad	$m\ m^{-1} = 1$	1
ângulo sólido	esferoradiano	sr	$m^2\ m^{-2} = 1$	1
frequência	hertz	Hz	s^{-1}	2
força	newton	N	$m\ kg\ s^{-2}$	
pressão, tensão	pascal	Pa	$N\ m^{-2} = m^{-1}\ kg\ s^{-2}$	
energia, trabalho, calor	joule	J	$N\ m = m^2\ kg\ s^{-2}$	
potência, fluxo energético	watt	W	$J\ s^{-1} = m^2\ kg\ s^{-3}$	
carga elétrica	coulomb	C	A s	
potencial elétrico, tensão elétrica	volt	V	$J\ C^{-1} = m^2\ kg\ s^{-3}\ A^{-1}$	
resistência elétrica	ohm	Ω	$V\ A^{-1} = m^2\ kg\ s^{-3}\ A^{-2}$	
condutância elétrica	siemens	S	$\Omega^{-1} = m^{-2}\ kg^{-1}\ s^3\ A^2$	
capacitância elétrica	farad	F	$C\ V^{-1} = m^{-2}\ kg^{-1}\ s^4\ A^2$	
fluxo magnético	weber	Wb	$V\ s = m^2\ kg\ s^{-2}\ A^{-1}$	
densidade de fluxo magnético	tesla	T	$Wb\ m^{-2} = kg\ s^{-2}\ A^{-1}$	
indutância	henry	H	$V\ A^{-1}\ s = m^2\ kg\ s^{-2}\ A^{-2}$	
temperatura Celsius	grau Celsius	$^{\circ}\text{C}$	K	3
fluxo luminoso	lúmen	lm	cd sr = cd	
iluminância	lux	lx	$lm\ m^{-2} = cd\ m^{-2}$	
atividade, (radioatividade) referida a um radionuclídeo	becquerel	Bq	s^{-1}	4
dose absorvida, kerma	gray	Gy	$J\ kg^{-1} = m^2\ s^{-2}$	4
dose equivalente (índice de dose equivalente)	sievert	Sv	$J\ kg^{-1} = m^2\ s^{-2}$	4
atividade catalítica	katal	kat	$mol\ s^{-1}$	4, 5

(1) O radiano e o esferoradiano são unidades derivadas. Visto que são de dimensão unitária, isto deixa aberta a possibilidade de serem incluídos ou omitidos em expressões de unidades SI derivadas. Na prática isto significa que rad e sr podem ser usados quando apropriado e podem ser omitidos se não ocorrer perda de clareza.

(2) Para frequência angular e para velocidade angular, deve-se usar a unidade rad s^{-1} , ou simplesmente s^{-1} , e esta *não* deve ser substituída por Hz. A unidade Hz deve ser usada *somente* para frequência no sentido de ciclos por segundo.

(3) A temperatura Celsius t é definida pela equação

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

A unidade SI de temperatura Celsius é o grau Celsius, $^{\circ}\text{C}$, que é igual ao kelvin, K. $^{\circ}\text{C}$ deve ser tratado como um único símbolo, sem espaço entre o sinal $^{\circ}$ e o C. Os símbolos $^{\circ}\text{K}$ ou $^{\circ}$ não devem ser usados para a unidade de temperatura termodinâmica.

(4) Becquerel é a unidade básica a ser usada em Química Nuclear e Radioquímica; becquerel, gray e sievert são aceitos/tes por razões de salvaguarda da saúde humana [3].

(5) Quando a quantidade de um catalisador não pode ser expressa como um número de entidades elementares, uma quantidade de substância, ou uma massa, uma “atividade catalítica” pode ainda ser definida como uma propriedade do catalisador medida por uma velocidade de conversão catalisada em condições otimizadas especificadas. O katal, 1 kat = 1 mol s^{-1} , deve ser usado no lugar de “unidade de atividade enzimática (ou unidade de enzima)”, 1 U = $\mu\text{mol min}^{-1} \approx 16,67\text{ nkat}$ [130].

3.5 Unidades SI derivadas para outras grandezas

Esta tabela contém exemplos de outras unidades SI derivadas; a listagem é meramente ilustrativa.

Grandeza derivada	Símbolo	Unidade SI derivada	
		Expressa em termos de unidades de base do SI	Notas
eficiência	W W^{-1}	$= 1$	
área	m^2		
volume	m^3		
velocidade	m s^{-1}		
velocidade angular	rad s^{-1}	$= \text{s}^{-1}$	
aceleração	m s^{-2}		
momento de uma força	N m	$= \text{m}^2 \text{ kg s}^{-2}$	
número de onda	m^{-1}		1
densidade, densidade de massa	kg m^{-3}		
volume específico	$\text{m}^3 \text{ kg}^{-1}$		
concentração de quantidade	mol m^{-3}		2
volume molar	$\text{m}^3 \text{ mol}^{-1}$		
capacidade calorífica, entropia	J K^{-1}	$= \text{m}^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ K}^{-1}$	
capacidade calorífica molar, entropia molar	$\text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$	$= \text{m}^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$	
capacidade calorífica específica, entropia específica	$\text{J K}^{-1} \text{ kg}^{-1}$	$= \text{m}^2 \text{ s}^{-2} \text{ K}^{-1}$	
energia molar	J mol^{-1}	$= \text{m}^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ mol}^{-1}$	
energia específica	J kg^{-1}	$= \text{m}^2 \text{ s}^{-2}$	
densidade de energia	J m^{-3}	$= \text{m}^{-1} \text{ kg s}^{-2}$	
tensão superficial	N m^{-1}	$= \text{kg s}^{-2}$	
densidade de fluxo de calor, irradiação	W m^{-2}	$= \text{kg s}^{-3}$	
condutividade térmica	$\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$	$= \text{m kg s}^{-3} \text{ K}^{-1}$	
viscosidade cinemática, coeficiente de difusão	$\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$		
viscosidade dinâmica, viscosidade de cisalhamento	Pa s	$= \text{m}^{-1} \text{ kg s}^{-1}$	
densidade de carga elétrica	C m^{-3}	$= \text{m}^{-3} \text{ s A}$	
densidade de corrente elétrica	A m^{-2}		
condutividade	S m^{-1}	$= \text{m}^{-3} \text{ kg}^{-1} \text{ s}^3 \text{ A}^2$	
condutividade molar	$\text{S m}^2 \text{ mol}^{-1}$	$= \text{kg}^{-1} \text{ s}^3 \text{ A}^2 \text{ mol}^{-1}$	
permissividade	F m^{-1}	$= \text{m}^{-3} \text{ kg}^{-1} \text{ s}^4 \text{ A}^2$	
permeabilidade	H m^{-1}	$= \text{m kg s}^{-2} \text{ A}^{-2}$	
intensidade do campo elétrico	V m^{-1}	$= \text{m kg s}^{-3} \text{ A}^{-1}$	
intensidade do campo magnético	A m^{-1}		
exposição (raios X e γ)	C kg^{-1}	$= \text{kg}^{-1} \text{ s A}$	
taxa de dose absorvida	Gy s^{-1}	$= \text{m}^2 \text{ s}^{-3}$	

(1) A expressão “número de onda” significa “inverso do comprimento de onda”. O seu uso generalizado para o associar à unidade cm^{-1} deve ser desencorajado.

(2) A expressão “concentração de quantidade” é uma forma resumida para “concentração de **quantidade de substância**”. Quando não for provável que possa haver qualquer ambiguidade, esta grandeza pode ser denominada simplesmente de “concentração”.

3.6 Prefixos SI e prefixos para múltiplos binários

Os prefixos abaixo [3] são usados para denotar múltiplos e submúltiplos decimais de unidades SI.

Submúltiplo	Prefixo		Múltiplo	Prefixo	
	Nome	Símbolo		Nome	Símbolo
10^{-1}	deci	d	10^1	deca	da
10^{-2}	centi	c	10^2	hecto	h
10^{-3}	milli	m	10^3	kilo ou quilo	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

Símbolos de prefixos devem ser escritos em tipo romano (na vertical), sem espaço entre o prefixo e o símbolo da unidade.

Exemplo kilometro (*Port.: kilómetro*) ou quilometro (*Port.: quilómetro*), km

Quando um prefixo é usado com um símbolo de unidade, a combinação é considerada como um novo símbolo, o qual pode ser elevado a qualquer potência sem o uso de parênteses.

Exemplos

$$1 \text{ cm}^3 = (10^{-2} \text{ m})^3 = 10^{-6} \text{ m}^3$$

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

$$1 \text{ V/cm} = 1 \text{ V}/(10^{-2} \text{ m}) = 10^2 \text{ V/m}$$

$$1 \text{ mmol/dm}^3 = 10^{-3} \text{ mol}/(10^{-3} \text{ m}^3) = 1 \text{ mol m}^{-3}$$

Um prefixo nunca deve ser usado sozinho, e prefixos não devem ser combinados em prefixos compostos.

Exemplo pm, não $\mu\mu\text{m}$

Os nomes e símbolos de múltiplos e submúltiplos decimais da unidade de base do SI para massa, o kilograma ou quilograma, símbolo kg, que já contém um prefixo, são obtidos adicionando-se o prefixo apropriado ao nome grama e ao símbolo g.

Exemplos mg, não μkg ; Mg, não kkg

A Comissão Eletrotécnica Internacional (IEC) padronizou os seguintes prefixos para múltiplos binários, usados principalmente em Tecnologia da Informação, para serem distintos dos prefixos SI para múltiplos decimais [7].

Múltiplo	Prefixo		Origem
	Nome	Símbolo	
$(2^{10})^1 = (1024)^1$	kibi	Ki	kilobinário
$(2^{10})^2 = (1024)^2$	mebi	Mi	megabinário
$(2^{10})^3 = (1024)^3$	gibi	Gi	gigabinário
$(2^{10})^4 = (1024)^4$	tebi	Ti	terabinário
$(2^{10})^5 = (1024)^5$	pebi	Pi	petabinário
$(2^{10})^6 = (1024)^6$	exbi	Ei	exabinário
$(2^{10})^7 = (1024)^7$	zebi	Zi	zettabinário
$(2^{10})^8 = (1024)^8$	yobi	Yi	yottabinário

3.7 Unidades fora do SI em uso com o SI

As seguintes unidades não fazem parte do SI, mas a CGPM [3] reconhece que elas poderão continuar a ser usadas em contextos apropriados. Prefixos SI podem ser associados a algumas dessas unidades, tais como: mililitro, mL; megaelétron-volt, MeV; kilotonelada, kt. Uma lista mais extensa de unidades fora do SI, com fatores de conversão às correspondentes unidades SI, é fornecida no Capítulo 7, p. 135.

Grandeza física	Nome	Símbolo	Unidade adequada para uso com o SI	
			Valor em unidades SI	Notas
tempo	minuto	min	= 60 s	
tempo	hora	h	= 3600 s	
tempo	dia	d	= 86 400 s	
ângulo plano	grau	°	= $(\pi/180)$ rad	
ângulo plano	minuto	'	= $(\pi/10\ 800)$ rad	
ângulo plano	segundo	"	= $(\pi/648\ 000)$ rad	
volume	litro	l, L	= 1 dm ³ = 10 ⁻³ m ³	1
massa	tonelada	t	= 1 Mg = 10 ³ kg	
nível de uma grandeza de campo, nível de uma grandeza de potência	neper	Np	= ln e = (1/2) ln e ² = 1	2
nível de uma grandeza de campo, nível de uma grandeza de potência	bel	B		2
energia	elétron-volt	eV (= $e \cdot 1$ V)	= 1,602 176 6208(98) × 10 ⁻¹⁹ J	3
massa	dalton, unidade de massa atômica unificada	Da u (= $m_a(^{12}\text{C})/12$)	= 1,660 539 040(20) × 10 ⁻²⁷ kg = 1 Da	3, 4
comprimento	milha náutica unidade astronômica	M ua	= 1852 m = 1,495 978 707 00 × 10 ¹¹ m	5 6

(1) O símbolo alternativo L é a única exceção à regra geral que afirma que símbolos para unidades devem ser impressos em letras minúsculas, a menos que o nome da unidade seja epônimo (*Port.: epónimo*) de um nome próprio. Para evitar o risco de confusão entre a letra l e o número 1, aceita-se que se use L. No entanto, a ISO e a IEC usam apenas a letra minúscula l.

(2) Para grandezas que envolvem uma razão logarítmica e suas unidades, vide [131].

(3) Os valores destas unidades nas correspondentes unidades SI não são exatos, visto que dependem dos valores das constantes físicas e (para elétron-volt) e $m_a(^{12}\text{C})$ ou N_A (para a unidade de massa atômica unificada), que são determinados experimentalmente, vide Capítulo 5, p. 115.

(4) O dalton, com símbolo Da, e a unidade de massa atômica unificada, com símbolo u, são nomes alternativos para a mesma unidade. O dalton pode ser combinado com prefixos SI para expressar as massas de entidades grandes ou pequenas.

(5) Não há um símbolo acordado para a milha náutica. Na Brochura do SI usa-se o símbolo M.

(6) A unidade **astronômica** é uma unidade de comprimento aproximadamente igual à distância média Terra-Sol. O seu valor é tal que, quando usada para descrever o movimento de corpos no Sistema Solar, a constante gravitacional heliocêntrica é $(0,017\ 202\ 098\ 95)^2\ \text{ua}^3\ \text{d}^{-2}$ (vide também [3]).

3.8 Unidades coerentes e análise dimensional

Quando as equações entre valores numéricos têm a mesma forma que as equações entre grandezas físicas, então o sistema de unidades definido em termos de unidades de base evita fatores numéricos entre unidades, sendo reconhecido como um *sistema coerente*. Por exemplo, a energia cinética T de uma partícula de massa m , movimentando-se com uma velocidade v é definida pela equação

$$T = (1/2) mv^2$$

mas a unidade SI de energia cinética é o joule, definido pela equação

$$J = \text{kg} (\text{m/s})^2 = \text{kg m}^2 \text{s}^{-2}$$

onde o fator $(1/2)$ não aparece. Na realidade, o joule, símbolo J , é simplesmente um nome especial e símbolo para o produto de unidades $\text{kg m}^2 \text{s}^{-2}$.

O Sistema International (SI) é um sistema de unidades coerente. A vantagem de um sistema de unidades coerente é que se o valor de cada grandeza for substituído pelo símbolo da grandeza em qualquer equação de grandezas, então as unidades podem ser canceladas, restando uma equação entre valores numéricos que é exatamente similar (incluindo todos os fatores numéricos) à equação original entre as grandezas. A verificação de que as unidades se cancelam deste modo é às vezes descrita como verificação dimensional da equação.

O uso de um sistema de unidades coerente não é essencial. Em particular, o uso de prefixos múltiplos ou submúltiplos destrói a coerência do SI, mas, de qualquer modo, tal uso é muitas vezes conveniente.

3.9 Constantes físicas fundamentais usadas como unidades

Em certos campos especializados da Ciência, às vezes usam-se constantes físicas fundamentais, ou outras grandezas físicas bem definidas, como se elas fossem unidades. Por exemplo, em Astronomia pode ser mais conveniente expressar a massa de uma estrela em termos da massa do Sol, e expressar o período dos planetas nas suas órbitas em termos do período da órbita da Terra, em vez de usar unidades SI. Do mesmo modo, em Física Atômica e Molecular é mais conveniente expressar massas em termos da massa do elétron, m_e , ou em termos da unidade de massa atômica unificada, 1 u = $m_u = m(^{12}\text{C}/12)$, e expressar cargas em termos da carga elementar e , em vez de usar unidades SI. Um motivo para se usarem grandezas físicas como se fossem unidades resulta da natureza das medidas experimentais ou cálculos num determinado domínio especializado, que podem ser tais que os resultados sejam naturalmente obtidos nesses termos e só possam ser convertidos para unidades SI num estágio posterior. Quando grandezas físicas são usadas como unidades, a sua relação com o SI deve ser determinada experimentalmente, o que está sujeito a uma incerteza, e o fator de conversão pode mudar à medida que novas experiências mais precisas forem efectuadas. Outro motivo para se usarem tais unidades é que a incerteza no fator de conversão para o SI pode ser maior que a incerteza na razão entre as medidas expressas em termos da constante física como unidade. Ambos os motivos podem fazer com que seja preferível apresentar resultados experimentais sem os converter para unidades SI.

Três de tais grandezas físicas que foram reconhecidas como unidades pelo CIPM são o elétron-volt (eV), o dalton (Da) ou a unidade de massa atômica unificada (u), e a unidade astronômica (ua), listados abaixo [3]. O elétron-volt é o produto de uma constante fundamental (a carga elementar, e) e a unidade SI de diferença de potencial (o volt, V). O dalton está relacionado à massa do nuclídeo carbono-12, e é assim uma constante fundamental. A unidade astronômica é uma constante conveniente para os astrônomos e que é definida mais arbitrariamente. No entanto, existem muitas outras grandezas físicas ou constantes fundamentais que às vezes são usadas como se fossem unidades, de modo que dificilmente se podem listar todas elas.

<i>Grandeza física</i>	<i>Nome da unidade</i>	<i>Símbolo para a unidade</i>	<i>Valor em unidade SI</i>	<i>Notas</i>
energia	elétron-volt	eV	$1 \text{ eV} = 1,602\ 176\ 6208(98) \times 10^{-19} \text{ J}$	1
massa	dalton, unidade de massa atômica unificada	Da, u	$1 \text{ Da} = 1,660\ 539\ 040(20) \times 10^{-27} \text{ kg}$	2
comprimento	unidade astronômica	ua	$1 \text{ ua} = 1,495\ 978\ 707\ 00 \times 10^{11} \text{ m}$	3

(1) O elétron-volt é a energia cinética adquirida por um elétron após atravessar uma barreira de potencial de 1 V no vácuo.

(2) O dalton e a unidade de massa atômica unificada são nomes alternativos para a mesma unidade. O dalton pode ser combinado com os prefixos SI para expressar as massas de grandes moléculas em kilodalton (kDa) ou megadalton (MDa).

(3) O valor da unidade astronômica em unidades SI é definido de tal modo que, quando usado para descrever o movimento de corpos no sistema solar, a constante gravitacional heliocêntrica é $(0,017\ 202\ 098\ 95)^2 \text{ ua}^3 \text{ d}^{-2}$. O valor deve ser obtido experimentalmente e, portanto, não é exatamente conhecido (vide também [3]).

3.9.1 Unidades atômicas [22] (vide também Secção 7.3, p. 149)

Um grupo particular de constantes físicas que são usadas como se fossem unidades merece menção especial. São as denominadas *unidades atômicas*, que surgem em cálculos de funções de onda eletrônicas para átomos e moléculas, isto é, em Química Quântica. As cinco primeiras unidades atômicas na tabela abaixo têm nomes e símbolos especiais. Somente quatro dessas são independentes; todas as outras podem ser derivadas da forma habitual por multiplicação e divisão, como se exemplifica na tabela. A relação entre as cinco unidades atômicas mencionadas pode ser expressa por qualquer uma das equações

$$E_h = \hbar^2/m_e a_0^2 = e^2/4\pi\epsilon_0 a_0 = m_e e^4/(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2$$

A relação de unidades atômicas com as correspondentes unidades SI envolve valores de constantes físicas fundamentais e, portanto, não é exata. Os valores numéricos na tabela foram compilados pela CODATA [23] e são baseados nas constantes fundamentais fornecidas no Capítulo 5, p. 115. Os valores numéricos de cálculos em Química Teórica são frequentemente dados em unidades atômicas, ou como valores numéricos na forma *grandeza física* dividida por *unidade atômica*, para permitir ao leitor fazer a conversão usando as melhores estimativas atualizadas das constantes físicas.

Grandeza física	Nome da unidade	Símbolo para a unidade	Valor em unidades SI	Notas
massa	massa do elétron	m_e	$= 9,109\ 383\ 56(11) \times 10^{-31}$ kg	
carga	carga elementar	e	$= 1,602\ 176\ 620\ 8(98) \times 10^{-19}$ C	
ação, (momento angular)	constante de Planck dividida por 2π	\hbar	$= 1,054\ 571\ 800(13) \times 10^{-34}$ J s	1
comprimento	raio de Bohr	a_0	$= 5,291\ 772\ 1067(12) \times 10^{-11}$ m	1
energia	energia de Hartree	E_h	$= 4,359\ 744\ 650(54) \times 10^{-18}$ J	1
tempo		\hbar/E_h	$= 2,418\ 884\ 326\ 509(14) \times 10^{-17}$ s	
velocidade		$a_0 E_h / \hbar$	$= 2,187\ 691\ 262\ 77(50) \times 10^6$ m s ⁻¹	2
força		E_h / a_0	$= 8,238\ 723\ 36(10) \times 10^{-8}$ N	
momento linear		\hbar / a_0	$= 1,992\ 851\ 882(24) \times 10^{-24}$ N s	
corrente elétrica		$e E_h / \hbar$	$= 6,623\ 618\ 183(41) \times 10^{-3}$ A	
campo elétrico		$E_h / e a_0$	$= 5,142\ 206\ 707(32) \times 10^{11}$ V m ⁻¹	
momento dipolar elétrico		$e a_0$	$= 8,478\ 353\ 552(52) \times 10^{-30}$ C m	
momento		$e a_0^2$	$= 4,486\ 551\ 484(28) \times 10^{-40}$ C m ²	
quadrupolar elétrico		$e^2 a_0^2 / E_h$	$= 1,648\ 777\ 2731(11) \times 10^{-41}$ C ² m ² J ⁻¹	
polarizabilidade elétrica		$e^3 a_0^3 / E_h^2$	$= 3,206\ 361\ 329(20) \times 10^{-53}$ C ³ m ³ J ⁻²	
1 ^a hiperpolarizabilidade		$e^4 a_0^4 / E_h^3$	$= 6,235\ 380\ 085(77) \times 10^{-65}$ C ⁴ m ⁴ J ⁻³	
2 ^a hiperpolarizabilidade		$\hbar / e a_0^2$	$= 2,350\ 517\ 550(14) \times 10^5$ T	
densidade de fluxo magnético		$e \hbar / m_e$	$= 1,854\ 801\ 999(11) \times 10^{-23}$ J T ⁻¹	3
momento dipolar magnético		$e^2 a_0^2 / m_e$	$= 7,891\ 036\ 5886(90) \times 10^{-29}$ 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) O valor numérico da velocidade da luz, quando expresso em unidades atômicas (ua), é igual ao inverso da constante de estrutura fina α :

$c/(ua \text{ de velocidade}) = e \hbar / a_0 E_h = \alpha^{-1} = 137,035\ 999\ 139(31)$.

(3) A unidade atômica de momento dipolar magnético é igual a duas vezes o magneton de Bohr, μ_B .

3.9.2 As equações da Química Quântica expressas em termos de grandezas reduzidas usando unidades atômicas

É comum escrever as equações da Química Quântica em termos de grandezas reduzidas. Assim, energias são expressas como energias reduzidas E^* , distâncias como distâncias reduzidas r^* , massas como massas reduzidas m^* , cargas como cargas reduzidas Q^* , e momentos angulares como momentos angulares reduzidos J^* , onde as grandezas reduzidas são dadas pelas equações

$$E^* = E/E_h, \quad r^* = r/a_0, \quad m^* = m/m_e, \quad Q^* = Q/e, \quad J^* = J/\hbar \quad (1)$$

Em cada caso, a grandeza reduzida é a razão adimensional entre a própria grandeza e a respectiva unidade **atômica**. A vantagem de se expressar todas as equações em termos de grandezas reduzidas é que as equações são simplificadas, pois todas as constantes físicas desaparecem das equações (embora esta simplificação seja obtida à custa de perder a vantagem da análise dimensional, visto que todas as grandezas reduzidas são adimensionais). A equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio, expressa nas grandezas físicas usuais, tem a forma

$$-(\hbar^2/2m_e)\nabla_r^2 \psi(r, \theta, \phi) + V(r)\psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi) \quad (2)$$

Aqui r , θ , e ϕ são as coordenadas esféricas do **elétron**, e o operador ∇_r envolve as derivadas $\partial/\partial r$, $\partial/\partial\theta$, e $\partial/\partial\phi$. Contudo, em termos de grandezas reduzidas, a equação tem a seguinte forma

$$-(1/2)\nabla_{r^*}^2 \psi(r^*, \theta, \phi) + V^*(r^*)\psi(r^*, \theta, \phi) = E^*\psi(r^*, \theta, \phi) \quad (3)$$

onde ∇_{r^*} envolve as derivadas $\partial/\partial r^*$, $\partial/\partial\theta$, e $\partial/\partial\phi$. Isso pode ser mostrado substituindo-se na Equação (2) as grandezas reduzidas (com asterisco) pelas próprias grandezas (sem asterisco), o que conduz à Equação (3).

No campo da Química Quântica, é comum escrever todas as equações em termos de grandezas reduzidas (com asterisco), de modo a que todas as grandezas ficam adimensionais, e todas as constantes fundamentais, tais como e , m_e , \hbar , E_h e a_0 , desaparecem das equações. Como mencionado acima, esta simplificação é obtida à custa de se perder a possibilidade de análise dimensional. Para comparar os resultados de um cálculo numérico com os de uma experiência, é necessário transformar os valores calculados das grandezas reduzidas para os valores das próprias grandezas usando a Equação (1).

Infelizmente também é comum não se explicitar o asterisco como aqui recomendado, mas sim usar exatamente o mesmo símbolo para as grandezas reduzidas adimensionais e as próprias grandezas. Isto torna impossível escrever equações tais como (1). (Esta situação é análoga à que surgiria se usássemos exatamente o mesmo símbolo para h e \hbar , onde $\hbar = h/2\pi$, consequentemente tornando impossível escrever a relação entre h e \hbar .) Este uso inadequado talvez possa ser justificado pelo **fato** de que se torna demasiado trabalhoso incluir um asterisco no símbolo para cada grandeza física ao escrever as equações em Química Quântica, mas leitores não familiarizados com o campo devem ter em conta a forma da escrita. Também é importante ter em conta como os valores de grandezas “expressas em unidades **atómicas**”, isto é, os valores de grandezas reduzidas, podem ser convertidos para os valores das grandezas originais em unidades SI.

Também é comum que se façam afirmações tais como “em unidades **atómicas** e , m_e , \hbar , E_h , e a_0 são todos iguais a 1”, o que não é correto. A afirmação correta seria que em unidades **atómicas** a carga elementar é igual a 1 e , a massa de um **elétron** é igual a 1 m_e , etc. A diferença entre equações tais como a (3), que não contém constantes fundamentais, e a (2), que contém constantes fundamentais, está nas grandezas em vez de nas unidades. Em (3) todas as grandezas são grandezas reduzidas adimensionais, definidas por (1), enquanto que em (2) as grandezas são as grandezas físicas usuais (com dimensões) com as quais estamos familiarizados noutras circunstâncias.

Finalmente, muitos autores não fazem uso dos símbolos para as unidades **atômicas** listados nas tabelas acima, mas em seu lugar usam o símbolo “u.a.” ou “ua” para todas as unidades **atômicas**. Este costume deve ser abandonado. Ele causa confusão, tal como seria o caso se escrevêssemos “SI” como um símbolo para toda e qualquer unidade SI, ou “CGS” como um símbolo para toda e qualquer unidade CGS.

Exemplos Para a molécula de **hidrogênio**, o comprimento de ligação de equilíbrio r_e , e a energia de dissociação D_e , são dados por

$$\begin{aligned} r_e &= 2,1 \text{ } a_0 & \text{não} & \quad r_e = 2,1 \text{ u.a.} \\ D_e &= 0,16 \text{ } E_h & \text{não} & \quad D_e = 0,16 \text{ u.a.} \end{aligned}$$

3.10 Grandezas adimensionais

Os valores de grandezas físicas adimensionais, mais adequadamente denominadas de “grandezas de dimensão unitária”, são frequentemente expressos em termos de valores matematicamente definidos de modo exato representados por símbolos especiais ou abreviações, tais como % (por cento). Estes símbolos são então tratados como unidades, e são usados como tal em cálculos.

3.10.1 Frações (valores relativos, rendimentos e eficiências)

Frações tais como a incerteza relativa, a fração da quantidade de substância x (também denominada de fração da quantidade), a fração mássica w e a fração volúmica φ (vide Secção 2.10, p. 51, para todas estas grandezas), são às vezes expressas usando os símbolos listados na tabela abaixo.

Nome	Símbolo	Valor	Exemplo
por cento	%	10^{-2}	A abundância isotópica do carbono-13 expressa como uma fração da quantidade de substância é $x = 1,1\%$.
por mil	‰	10^{-3}	A fração mássica de água em uma amostra é $w = 2,3\text{‰}$.

Estes múltiplos da unidade um não fazem parte do SI e a ISO recomenda que tais símbolos nunca sejam usados. Muitas vezes eles são também usados como unidades de “concentração”, sem uma clara indicação do tipo de fração implicado, *e.g.* fração da quantidade de substância, fração mássica ou fração volúmica. Para evitar ambiguidade, deveriam ser usados somente num contexto em que o significado da grandeza esteja precisamente definido. Mesmo assim, o uso de uma razão apropriada de unidades SI pode ser preferível.

Exemplos A fração mássica $w = 1,5 \times 10^{-6} = 1,5 \text{ mg/kg}$.
A fração da quantidade de substância $x = 3,7 \times 10^{-2} = 3,7\%$ ou $x = 37 \text{ mmol/mol}$.
Por espectroscopia de absorção atômica sabe-se que a solução aquosa contém uma concentração de massa de níquel $\rho(\text{Ni}) = 2,6 \text{ mg dm}^{-3}$, que é aproximadamente equivalente à fração mássica $w(\text{Ni}) = 2,6 \times 10^{-6}$.

Note a importância de se usar o nome e símbolo recomendados para a grandeza em cada um dos exemplos acima. Afirmações tais como “a concentração de níquel era 2.6×10^{-6} ” são ambíguas e devem ser evitadas.

O último exemplo ilustra a equivalência aproximada de $\rho/\text{mg dm}^{-3}$ e $w/10^{-6}$ em soluções aquosas, a qual decorre do fato da densidade de massa de uma solução aquosa diluída ser sempre aproximadamente $1,0 \text{ g cm}^{-3}$. Soluções diluídas são frequentemente medidas ou padronizadas em relação a uma concentração de massa conhecida em mg dm^{-3} , e esta unidade deve então ser preferida, em vez de se usar ppm (ou outras abreviações correspondentes, as quais são dependentes da língua) para especificar uma fração mássica.

3.10.2 Usos desaprovados

Deve-se evitar a adição de sinais extras em % e símbolos similares, tais como % (V/V) (significando % em volume). Sinais qualificativos podem ser adicionados a símbolos para grandezas físicas, mas jamais a unidades.

Exemplo Uma fração mássica $w = 0,5\%$, mas *não* $0,5\% (m/m)$.

O símbolo % não deve ser usado em combinação com outras unidades. Em cabeçalhos de tabelas e em legendas de eixos de gráficos, deve-se evitar o uso de % no denominador. Embora se escreva $x(^{13}\text{C}) = 1,1\%$, em tabelas e gráficos deve-se preferir a notação $100x$ em vez de $x / \%$ (vide, por exemplo, na Secção 6.3, a coluna 5, p. 127).

Os símbolos adicionais listados na tabela abaixo também são encontrados na literatura, mas o seu uso não é recomendado. Note que os nomes e símbolos para 10^{-9} e 10^{-12} nesta tabela são aqui

baseados no sistema americano de nomes. Em outras partes do mundo, um bilhão (*Port.*: bilião) refere-se frequentemente a 10^{12} e um trilhão (*Port.*: trilião) a 10^{18} . Note também que, às vezes, o símbolo ppt é usado para parte por mil, e às vezes para parte por trilhão. Em 1948, a palavra bilhão tinha sido proposta para 10^{12} e a trilhão para 10^{18} [132]. Embora ppm, ppb, ppt e similares sejam amplamente usados em várias aplicações de Química Analítica e de Química Ambiental, sugere-se que o seu uso seja completamente abandonado por causa das ambiguidades envolvidas. Essas unidades são desnecessárias e podem ser facilmente substituídas por unidades compatíveis com o SI, tais como pmol/mol (picomol por mol), que não apresentam qualquer ambiguidade. A última coluna contém substitutos sugeridos (substitutos similares podem ser formulados, como mg/g, µg/g, pg/g etc.); note-se que estes substitutos podem implicar mudança no tipo de fração especificado nos exemplos (na maioria dos casos abaixo, fração da quantidade).

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Valor</i>	<i>Exemplos</i>	<i>Substituto</i>
parte por cem	%	10^{-2}	O grau de dissociação é 1,5 %.	
parte por mil, por mil	‰	10^{-3}	Um valor pré-industrial aproximado do teor de CO ₂ da atmosfera da Terra era 0,275 ‰.	mmol/mol
			O elemento Ti perfaz uma fração mássica de 5,65 ‰ na crosta da Terra.	mg/g
parte por milhão	ppm	10^{-6}	A fração volúmica do hélio é de 20 ppm.	µmol/mol
parte por cem milhões	ppcm	10^{-8}	A fração mássica de impureza no metal era inferior a 5 ppcm.	
parte por bilhão	ppb	10^{-9}	O padrão de qualidade do ar para ozônio (<i>Port.</i> : ozono) é uma fração volúmica $\varphi = 120$ ppb.	nmol/mol
parte por trilhão	ppt	10^{-12}	A fração volúmica de fundo natural do NO no ar foi determinada como sendo $\varphi = 140$ ppt.	pmol/mol
parte por quatrilhão (<i>Port.</i> : quadrilião)	ppq	10^{-15}		fmol/mol

3.10.3 Unidades para grandezas logarítmicas: neper, bel e decibel

Em alguma áreas, especialmente em Acústica e Telecomunicação, dão-se nomes especiais ao número 1 quando se expressa grandezas físicas definidas em termos do logaritmo de uma razão [131]. Para um oscilador linear amortecido, a amplitude de uma grandeza em função do tempo é dada por

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

Desta relação fica claro que a unidade SI coerente para o coeficiente de decaimento δ e a frequência angular ω é o segundo elevado à potência menos um, s⁻¹. Entretanto, os nomes especiais neper, Np, e radiano, rad (vide Secção 2.1, p. 13, Secção 3.4, p. 93, e Secção 3.7, p. 96), são usados para as unidades dos produtos adimensionais δt e ωt , respectivamente. Assim, as grandezas δ e ω podem ser expressas nas unidades Np/s e rad/s, respectivamente. Usados desta maneira, ambos o neper, Np, e o radiano, rad, podem ser considerados como nomes especiais para o número 1.

Nas áreas de Acústica e Transmissão de Sinal, níveis de potência de sinais e níveis de amplitude de sinais (ou nível de campo) são usualmente expressos como o logaritmo de base 10 ou neperiano da razão entre a potência P e uma potência de referência P_0 , ou entre o campo F e um campo de referência F_0 . Dado que a potência é frequentemente proporcional ao quadrado do campo ou amplitude (quando o campo age sobre impedâncias iguais em sistemas lineares), é conveniente definir

o nível de potência e o nível de campo como sendo iguais em tal caso. Isto é feito definindo-se o nível de campo e o nível de potência de acordo com as relações

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

de modo que se $(P/P_0) = (F/F_0)^2$ então $L_P = L_F$. As equações acima podem ser escritas na forma

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

A unidade bel, B, e seu submúltiplo mais frequentemente usado, o decibel, dB, são usados quando os níveis de campo e potência são calculados usando logaritmos de base 10, de acordo com as relações

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

e

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

A relação entre o bel e o neper é obtida por comparação com as equações precedentes. Obtém-se

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

dando

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

Na prática, o bel é muito raramente usado. Somente o decibel é usado para representar o logaritmo de base 10, particularmente em Acústica e na identificação dos controles de amplificadores de potência. Assim a afirmativa $L_P = n$ dB implica que $10 \lg(P/P_0) = n$.

O uso abrangente de unidades especiais para grandezas logarítmicas é discutido em [131]. As grandezas nível de potência e nível de campo, e as unidades bel, decibel e neper, são listadas na tabela e notas a seguir.

<i>Nome</i>	<i>Grandeza</i>	<i>Valor numérico multiplicado pela unidade</i>	<i>Notas</i>
nível de 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
nível de potência	$L_P = (1/2) \ln(P/P_0)$	$= (1/2) \ln(P/P_0) \text{ Np} = \lg(P/P_0) \text{ B} = 10 \lg(P/P_0) \text{ dB}$	4–6

- (1) F_0 é um valor de referência para a grandeza campo, o qual deve ser especificado.
- (2) No contexto da Acústica, o nível de campo é denominado de nível de pressão sonora e tem o símbolo L_p , e a pressão de referência é $p_0 = 20 \mu\text{Pa}$.
- (3) Por exemplo, quando $L_F = 1 \text{ Np}$, $F/F_0 = e \approx 2,718\,2818$.
- (4) P_0 é uma potência de referência, a qual deve ser especificada. O fator 1/2 é incluído na definição para tornar $L_P \hat{=} L_F$.
- (5) Em Acústica, o nível de potência é denominado nível de pressão sonora e recebe o símbolo L_W , e a potência de referência $P_0 = 1 \text{ pW}$.
- (6) Por exemplo, quando $L_P = 1 \text{ B} = 10 \text{ dB}$, $P/P_0 = 10$; e quando $L_P = 2 \text{ B} = 20 \text{ dB}$, $P/P_0 = 100$; etc.

4 SÍMBOLOS MATEMÁTICOS RECOMENDADOS

4.1 Impressão de números e símbolos matemáticos [5.a]

1. Números em geral devem ser impressos em fonte romana (na vertical). Para textos em Português, o sinal decimal entre os algarismos num número deve ser uma vírgula (*e.g.*, 2,3); para textos em Inglês, um ponto (*e.g.*, 2.3). Quando o sinal decimal é colocado antes do primeiro algarismo significativo de um número, um zero deve sempre preceder o sinal decimal. Para facilitar a leitura de números longos, os algarismos podem ser separados em grupos de três em cada lado do sinal decimal, usando apenas um espaçamento fino (mas nunca uma vírgula ou um ponto, nem qualquer outro símbolo). No entanto, quando há apenas somente quatro algarismos antes ou após o sinal decimal, o espaçamento é desnecessário e, portanto, nenhum espaçamento deve ser inserido.

Exemplos 2573,421 736 ou 2573.421 736 ou 0,257 342 173 6×10^4 ou
0.257 342 173 6×10^4
32 573,4215 ou 32 573.4215

2. Valores numéricos de grandezas físicas que foram determinados experimentalmente estão usualmente sujeitos a alguma incerteza. A incerteza experimental deve sempre ser especificada. A magnitude da incerteza deve ser representada como se segue.

Exemplos $l = [5,3478 - 0,0064, 5,3478 + 0,0064]$ cm
 $l = 5,3478(32)$ cm

No primeiro exemplo, o intervalo de incerteza é indicado diretamente como $[a - b, a + b]$. Recomenda-se que esta notação seja usada apenas com o significado de que o intervalo $[a - b, a + b]$ contém o valor verdadeiro com um alto grau de certeza, tal que $b \geq 2\sigma$, onde σ denota a incerteza padrão ou desvio padrão (vide Capítulo 8, p. 155).

No segundo exemplo, $a(c)$, supõe-se que o intervalo de incerteza c indicado entre parênteses se aplica aos dígitos menos significativos de a . Recomenda-se que esta notação seja reservada para o significado de que b representa 1σ nos dígitos finais de a .

3. Letras usadas como símbolos de constantes matemáticas (*e.g.*, e , π , $i = \sqrt{-1}$) devem ser impressas em fonte romana (na vertical), mas letras usadas como símbolos para outros números que não sejam constantes (*e.g.*, números quânticos) devem ser impressas em fonte itálica (inclinada), do mesmo modo que para grandezas físicas.
4. Símbolos para funções e operadores matemáticos específicos (*e.g.*, \ln , \lg , \exp , \sin , \cos , d , d , Δ , ∇ , ...) devem ser impressos em fonte romana, mas símbolos para uma função geral (*e.g.*, $f(x)$, $F(x, y)$, ...) devem ser impressos em fonte itálica.
5. O operador p (como em pa_{H+} , $pK = -\lg K$, etc., vide Secção 2.13.1 (viii), p. 79) deve ser impresso em fonte romana.
6. Símbolos para tipos de simetria em teoria de grupos (*e.g.*, S , P , D , ..., s , p , d , ..., Σ , Π , Δ , ..., A_{1g} , B''_2 , ...) devem ser impressos em fonte romana (na vertical) quando eles representam o símbolo de estado para um átomo ou uma molécula, embora sejam frequentemente impressos em fonte itálica quando representam os tipos de simetria de um grupo pontual.

7. Vetores e matrizes devem ser impressos em fonte itálica em negrito.

Exemplos força \mathbf{F} , campo elétrico \mathbf{E} , vetor posição \mathbf{r}

Fonte itálica comum é usada para denotar o módulo do vetor correspondente.

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

Grandezas tensoriais podem ser impressas em fonte não serifada itálica em negrito.

Exemplos \mathcal{S}, \mathcal{T}

Vetores podem ser alternativamente caracterizados por uma seta, \vec{A} , \vec{a} e tensores de segunda ordem por uma dupla de setas, $\vec{\vec{S}}, \vec{\vec{T}}$.

4.2 Símbolos, operadores e funções [5.k]

<i>Descrição</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Notas</i>
sinais e símbolos		
igual a	=	
diferente de	≠	
identicamente igual a	≡	
igual a, por definição	def ≡, :=	
aproximadamente igual a	≈	
assintoticamente igual a	≃	
corresponde a	≅	
proporcional a	~, ∝	
tende para, aproxima-se de	→	
infinito	∞	
menor que	<;	
maior que	>;	
menor ou igual que	≤	
maior ou igual que	≥	
muito menor que	≪	
muito maior que	≫	
operações		
mais	+	
menos	-	
mais ou menos	±	
menos ou mais	∓	
a multiplicado por b	$a b, ab, a \cdot b, a \times b$	1
a dividido por b	$a/b, ab^{-1}, \frac{a}{b}$	2
módulo (valor absoluto) de a	$ a $	
a elevado a n	a^n	
raiz quadrada de a , e de $a^2 + b^2$	$\sqrt{a}, a^{1/2},$ e $\sqrt{a^2 + b^2}, (a^2 + b^2)^{1/2}$	
n -ésima raiz de a	$a^{1/n}, \sqrt[n]{a}$	
valor médio de a	$\langle a \rangle, \bar{a}$	
sinal de a (igual a $a/ a $ se $a \neq 0$, 0 se $a = 0$)	$\operatorname{sgn} a$	
fatorial de n	$n!$	
coeficiente binomial, $n!/p!(n-p)!$	$C_p^n, \binom{n}{p}$	
somatório de a_i	$\sum a_i, \sum_i a_i, \sum_{i=1}^n a_i$	
produtório de a_i	$\prod a_i, \prod_i a_i, \prod_{i=1}^n a_i$	
funções		
seno de x	$\operatorname{sen} x$	
coseno de x	$\cos x$	
tangente de x	$\tan x$	
cotangente de x	$\cot x$	

(1) Quando a multiplicação é indicada por um ponto, o ponto deve estar a meia altura: $a \cdot b$.

(2) $a : b$ também é usado para “dividido por”. No entanto, este símbolo é usado principalmente para expressar razões tais como escalas de distância em mapas.

<i>Descrição</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Notas</i>
arco seno de x	$\arcsen x$	3
arco cosseno de x	$\arccos x$	3
arco tangente de x	$\arctan x$	3
arco cotangente de x	$\text{arccot } x$	3
seno hiperbólico de x	$\text{senh } x$	
cosseno hiperbólico de x	$\cosh x$	
tangente hiperbólica de x	$\tanh x$	
cotangente hiperbólica de x	$\coth x$	
seno hiperbólico inverso de x	$\text{arsenh } x$	3
cosseno hiperbólico inverso de x	$\text{arcosh } x$	3
tangente hiperbólica inversa de x	$\text{artanh } x$	3
cotangente hiperbólica inversa de x	$\text{arcoth } x$	3
base de logaritmos naturais	e	
exponencial de x	$\exp x, e^x$	
logaritmo de base a de x	$\log_a x$	4
logaritmo natural de x	$\ln x, \log_e x$	4
logaritmo de base 10 de x	$\lg x, \log_{10} x$	4
logaritmo de base 2 de x	$\text{lb } x, \log_2 x$	4
maior inteiro $\leqslant x$	$\text{ent } x$	
parte inteira de x	$\text{int } x$	
divisão inteira	$\text{int}(n/m)$	
resto de divisão inteira	$n/m - \text{int}(n/m)$	
variação de x	$\Delta x = x(\text{final}) - x(\text{inicial})$	
variação infinitesimal de f	δf	
limite de $f(x)$ quando x tende para a	$\lim_{x \rightarrow a} f(x)$	
1 ^a derivada de f	$df/dx, f', (d/dx)f$	
2 ^a derivada de f	$d^2f/dx^2, f''$	
n -ésima derivada de f	$d^n f/dx^n, f^{(n)}$	
derivada parcial de f	$\partial f/\partial x, \partial_x f, D_x f$	
diferencial total de f	df	
diferencial inexata de f	$\text{d}f$	
1 ^a derivada de x em relação ao tempo	$\dot{x}, dx/dt$	5
integral de $f(x)$	$\int f(x) dx, \int dx f(x)$	
delta de Kronecker	$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases}$	
símbolo de Levi-Civita	$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{se } ijk \text{ é uma permutação cíclica de } 123 \\ & \quad \varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = 1 \\ -1 & \text{se } ijk \text{ é uma permutação anticíclica de } 123 \\ & \quad \varepsilon_{132} = \varepsilon_{321} = \varepsilon_{213} = -1 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$	
função delta de Dirac (distribuição)	$\delta(x), \int f(x) \delta(x) dx = f(0)$	

(3) Estas funções são o inverso da função original, isto é, $\arcsen x$ é a função inversa de $\text{sen } x$.

(4) Para x positivo.

(5) Notação usada em Termodinâmica – vide Secção 2.11, nota 1, p. 60.

<i>Descrição</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Notas</i>
função degrau unitário, função de Heaviside	$\varepsilon(x), H(x), h(x),$ $\varepsilon(x) = 1 \text{ para } x > 0, \quad \varepsilon(x) = 0 \text{ para } x < 0.$	
função gama	$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt$	
convolução das funções f e g	$\Gamma(n+1) = (n)!$ para inteiros positivos n $f * g = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x-x')g(x') dx'$	
números complexos		
raiz quadrada de -1 , $\sqrt{-1}$	i	
parte real de $z = a + i b$	$\operatorname{Re} z = a$	
parte imaginária de $z = a + i b$	$\operatorname{Im} z = b$	
módulo de $z = a + i b$,	$ z = (a^2 + b^2)^{1/2}$	
valor absoluto de $z = a + i b$		
argumento de $z = a + i b$	$\arg z; \tan(\arg z) = b/a$	
conjugado complexo de $z = a + i b$	$z^* = a - i b$	
vetores		
vetor \mathbf{a}	$\mathbf{a}, \vec{\mathbf{a}}$	
componentes cartesianas de \mathbf{a}	a_x, a_y, a_z	
vetores unitários (versores) em sistema de coordenadas cartesianas	$\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ ou $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$	
produto escalar	$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$	
produto vetorial, cruzado ou externo	$\mathbf{a} \times \mathbf{b}, (\mathbf{a} \wedge \mathbf{b})$	
operador nabla, operador del	$\nabla = \mathbf{e}_x \partial/\partial x + \mathbf{e}_y \partial/\partial y + \mathbf{e}_z \partial/\partial z$	
operador laplaciano	$\nabla^2, \Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$	
gradiente de um campo escalar V	$\operatorname{grad} V, \nabla V$	
divergência de um campo vetorial \mathbf{A}	$\operatorname{div} \mathbf{A}, \nabla \cdot \mathbf{A}$	
rotacional de um campo vetorial \mathbf{A}	$\operatorname{rot} \mathbf{A}, \nabla \times \mathbf{A}$	
matrizes		
matriz de elementos A_{ij}	\mathbf{A}	
produto das matrizes \mathbf{A} e \mathbf{B}	\mathbf{AB} , onde $(\mathbf{AB})_{ik} = \sum_j A_{ij} B_{jk}$	
matriz identidade	\mathbf{E}, \mathbf{I}	
matriz inversa de uma matriz quadrada \mathbf{A}	\mathbf{A}^{-1}	
matriz transposta de \mathbf{A}	$\mathbf{A}^\top, \tilde{\mathbf{A}}$	
matriz transposta conjugada de \mathbf{A}	\mathbf{A}^*	
conjugado transposto de \mathbf{A} (conjugado hermitiano de \mathbf{A})	$\mathbf{A}^\mathsf{H}, \mathbf{A}^\dagger$, onde $(\mathbf{A}^\dagger)_{ij} = A_{ji}^*$	
traço de uma matriz quadrada \mathbf{A}	$\sum_i A_{ii}, \operatorname{tr} \mathbf{A}$	
determinante de uma matriz quadrada \mathbf{A}	$\det \mathbf{A}, \mathbf{A} $	
conjuntos e operadores lógicos		
p e q (sinal de conjunção)	$p \wedge q$	
p ou q ou ambos (sinal de disjunção)	$p \vee q$	
negação de p , não p	$\neg p$	
p implica q	$p \Rightarrow q$	
p é equivalente a q	$p \Leftrightarrow q$	

<i>Descrição</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Notas</i>
A está contido em B	$A \subset B$	
união (reunião) de A e B	$A \cup B$	
intersecção de A e B	$A \cap B$	
x pertence a A	$x \in A$	
x não pertence a A	$x \notin A$	
o conjunto A contém x	$A \ni x$	
A mas não B	$A \setminus B$	

5 GRANDEZAS FÍSICAS FUNDAMENTAIS

Os dados listados nesta tabela provêm dos valores das constantes físicas fundamentais recomendados pela CODATA em 2014 [23] (disponíveis online em <http://arxiv.org/abs/1507.07956>) e da compilação de 2016 do *Particle Data Group* (PDG) [133] (disponível online em <http://pdg.lbl.gov>) – para detalhes, vide notas. O desvio padrão nos algarismos menos significativos é dado entre parênteses.

<i>Grandeza</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Valor</i>	<i>Notas</i>
constante magnética	μ_0	$4\pi \times 10^{-7} \text{ H m}^{-1}$ (por definição)	1
velocidade da luz no vácuo	c_0, c	$299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}$ (por definição)	
constante elétrica	$\varepsilon_0 = 1/\mu_0 c_0^2$	$8,854\,187\,817\dots \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$	1, 2
impedância característica do vácuo	$Z_0 = \mu_0 c_0$	$376,730\,313\,461\dots \Omega$	2
constante de Planck	h	$6,626\,070\,040(81) \times 10^{-34} \text{ J s}$	
	$\hbar = h/2\pi$	$1,054\,571\,800(13) \times 10^{-34} \text{ J s}$	
	$\hbar c_0$	$197,326\,9788(12) \text{ MeV fm}$	
constante de acoplamento de Fermi	$G_F/(\hbar c_0)^3$	$1,166\,3787(6) \times 10^{-5} \text{ GeV}^{-2}$	3
ângulo de mistura fraca θ_W	$\text{sen}^2 \theta_W$	$0,223\,36(10)$	4, 5
carga elementar	e	$1,602\,176\,6208(98) \times 10^{-19} \text{ C}$	
massa do elétron	m_e	$9,109\,383\,56(11) \times 10^{-31} \text{ kg}$	
massa do próton	m_p	$1,672\,621\,898(21) \times 10^{-27} \text{ kg}$	
massa do nêutron	m_n	$1,674\,927\,471(21) \times 10^{-27} \text{ kg}$	
constante de massa atômica	$m_u = 1 \text{ u}$	$1,660\,539\,040(20) \times 10^{-27} \text{ kg}$	6
constante de Avogadro	L, N_A	$6,022\,140\,857(74) \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$	7
constante de Boltzmann	k, k_B	$1,380\,648\,52(79) \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$	
constante de Faraday	$F = Le$	$96\,485,332\,89(59) \text{ C mol}^{-1}$	
constante molar dos gases	R	$8,314\,4598(48) \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$	
zero da escala Celsius		$273,15 \text{ K}$ (por definição)	
volume molar do gás ideal, $p = 100 \text{ kPa}, t = 0^\circ\text{C}$	V_m	$22,710\,947(13) \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1}$	
volume molar do gás ideal, $p = 101,325 \text{ kPa}, t = 0^\circ\text{C}$		$22,413\,962(13) \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1}$	
atmosfera padrão		$101\,325 \text{ Pa}$ (por definição)	
constante de estrutura fina	$\alpha = \mu_0 e^2 c_0 / 2h$	$7,297\,352\,5664(17) \times 10^{-3}$	
	α^{-1}	$137,035\,999\,139(31)$	

(1) $\text{H m}^{-1} = \text{N A}^{-2} = \text{N s}^2 \text{ C}^{-2}$; $\text{F m}^{-1} = \text{C}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-1}$.

(2) ε_0 e Z_0 podem ser calculadas de modo exato a partir dos valores definidos de μ_0 e c_0 .

(3) O valor da constante de acoplamento de Fermi é recomendado pelo *Particle Data Group* [133].

(4) Com o ângulo de mistura fraca θ_W , às vezes $\text{sen}^2 \theta_W$ é designado parâmetro de Weinberg. Para determinar o valor de $\text{sen}^2 \theta_W$, existem diversos métodos que diferem nas massas usadas (vide item 10, na secção “Reviews, tables, and plots”, em [133]). O valor aqui listado para $\text{sen}^2 \theta_W$ [23] é baseado no esquema “on-shell” que usa $\text{sen}^2 \theta_W = 1 - (m_W/m_Z)^2$, onde as grandezas m_W e m_Z são as massas dos bósons (*Port.*: bósons) W^\pm e Z^0 , respectivamente.

(5) O *Particle Data Group* [133] fornece $m_W = 80,385(15) \text{ GeV}/c_0^2$, $m_Z = 91,1876(21) \text{ GeV}/c_0^2$ e recomenda $\text{sen}^2 \theta_W = 0,231\,29(5)$, baseado no esquema $\overline{\text{MS}}$. O valor correspondente no esquema “on-shell” é $\text{sen}^2 \theta_W = 0,223\,36(10)$. O parâmetro efetivo também depende da faixa de energia ou transferência de momento considerada.

(6) u é a unidade de massa atômica unificada (vide Secção 3.9, p. 98).

(7) Vide [134] e outros artigos no mesmo número especial de *Metrologia* sobre a determinação precisa da constante de Avogadro.

Grandeza	Símbolo	Valor	Notas
raio de Bohr	$a_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/m_e e^2$	$5,291\ 772\ 1067(12) \times 10^{-11} \text{ m}$	
energia de Hartree	$E_h = \hbar^2/m_e a_0^2$	$4,359\ 744\ 650(54) \times 10^{-18} \text{ J}$	
constante de Rydberg	$R_\infty = E_h/2hc_0$	$1,097\ 373\ 156\ 8508(65) \times 10^7 \text{ m}^{-1}$	
magnéton de Bohr	$\mu_B = e\hbar/2m_e$	$9,274\ 009\ 994(57) \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$	
momento magnético do elétron	μ_e	$-9,284\ 764\ 620(57) \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$	
fator g de Landé para o elétron livre	$g_e = 2\mu_e/\mu_B$	$-2,002\ 319\ 304\ 361\ 82(52)$	
magnéton nuclear	$\mu_N = e\hbar/2m_p$	$5,050\ 783\ 699(31) \times 10^{-27} \text{ J T}^{-1}$	
momento magnético do próton	μ_p	$1,410\ 606\ 7873(97) \times 10^{-26} \text{ J T}^{-1}$	
razão giromagnética do próton	$\gamma_p = 4\pi\mu_p/h$	$2,675\ 221\ 900(18) \times 10^8 \text{ s}^{-1} \text{ T}^{-1}$	
momento magnético do próton blindado (H ₂ O, esfera, 25 °C)	μ_p'/μ_B	$1,520\ 993\ 128(17) \times 10^{-3}$	
razão giromagnética do próton blindado (H ₂ O, esfera, 25 °C)	$\gamma_p'/2\pi$	$42,577\ 478\ 92(29) \text{ MHz T}^{-1}$	
constante de Stefan-Boltzmann	$\sigma = 2\pi^5 k^4/15h^3 c_0^2$	$5,670\ 367(13) \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$	
primeira constante de radiação	$c_1 = 2\pi h c_0^2$	$3,741\ 771\ 790(46) \times 10^{-16} \text{ W m}^2$	
segunda constante de radiação	$c_2 = hc_0/k$	$1,438\ 777\ 36(83) \times 10^{-2} \text{ m K}$	
constante newtoniana da gravitação	G	$6,674\ 08(31) \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$	
aceleração da gravidade padrão	g_n	$9,806\ 65 \text{ m s}^{-2}$ (por definição)	

Valores de constantes matemáticas comuns

Constante matemática	Símbolo	Valor	Notas
razão entre o perímetro e o diâmetro de um círculo	π	$3,141\ 592\ 653\ 59\dots$	1
base dos logaritmos naturais	e	$2,718\ 281\ 828\ 46\dots$	
logaritmo natural de 10	$\ln 10$	$2,302\ 585\ 092\ 99\dots$	

(1) Uma frase mnemônica para π , baseada no número de letras em palavras da língua inglesa, é:

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

Existem frases mnemônicas em forma de poema em Francês:

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

e em Alemão:

*“Wie? O! Dies π
Macht ernstlich so vielen viele Müh’!
Lernt immerhin, Jünglinge, leichte Verselein,
Wie so zum Beispiel dies dürfte zu merken sein!”*

Uma frase mnemônica em Português, também baseada no número de letras das palavras, é:

“Sou o medo e pavor constante do menino vadio, bem vadio”

Para frases mnemônicas adicionais, vide as edições japonesa [2.e] e russa [2.c].

6 PROPRIEDADES DE PARTÍCULAS, ELEMENTOS E NUCLÍDEOS

Os símbolos para partículas, elementos químicos e nuclídeos foram discutidos na Secção 2.10.1 (ii), p. 54. Para partículas, o *Particle Data Group* [133] recomenda o uso de símbolos em itálico, recomendação essa que vem sendo seguida por muitos físicos (vide também Secção 1.6, p. 7).

6.1 Propriedades de partículas específicas

Os dados listados nesta tabela provêm dos valores das constantes físicas fundamentais recomendados pela CODATA em 2014 [23] (disponíveis online em <http://arxiv.org/abs/1507.07956>) e da compilação de 2016 do *Particle Data Group* (PDG) [133] (disponível online em <http://pdg.lbl.gov>) – para detalhes, vide as notas. A incerteza padrão nos algarismos menos significativos é dada entre parênteses.

Nome	Símbolo	Spin	Número de carga	Massa		Notas
				I	z	
fóton	γ	1	0	0		0
neutrino	ν_e	1/2	0	≈ 0		≈ 0
elétron	e^-	1/2	-1	$5,485\ 799\ 090\ 70(16) \times 10^{-4}$	0,510 998 9461(31)	3
múon	μ^\pm	1/2	± 1	0,113 428 9257(25)	105,658 3715(35)	2
píon	π^\pm	0	± 1		139,570 18(35)	2
(Port.: pião)						
píon	π^0	0	0		134,9766(6)	2
próton	p	1/2	1	1,007 276 466 879(91)	938,272 0813(58)	
nêutron	n	1/2	0	1,008 664 915 88(49)	939,565 4133(58)	
dêuteron	d	1	1	2,013 553 212 745(40)	1875,612 928(12)	
trítion	t	1/2	1	3,015 500 716 32(11)	2808,921 112(17)	4
hélion	h	1/2	2	3,014 932 246 73(12)	2808,391 586(17)	4
partícula α	α	0	2	4,001 506 179 127(63)	3727,379 378(23)	
bóson Z	Z^0	1	0		91,1876(21) $\times 10^3$	2, 5
bóson W	W^\pm	1	± 1		80,385(15) $\times 10^3$	2, 5

(1) O neutrino e o antineutrino talvez possam ter uma pequena massa, $m_{\bar{\nu}_e} < 2 \text{ eV}/c_0^2$ [133]. Além do neutrino do elétron ν_e , existem também um neutrino do tau, ν_τ , e um neutrino do múon, ν_μ (e as suas antipartículas $\bar{\nu}$).

(2) Estes dados são do *Particle Data Group* [133].

(3) Às vezes o elétron é denotado por e ou como uma partícula β (por β^-). A sua antipartícula e^+ (o pósitron, ou β^+) tem a mesma massa que o elétron e^- com carga oposta e momento magnético oposto.

(4) O trítion é a partícula ${}^3\text{H}^+$, e o hélion a ${}^3\text{He}^{2+}$.

(5) Z^0 e W^\pm são bósons de calibre (ou bósons de gauge) [133].

Nome	Símbolo	<i>Momento magnético</i> μ/μ_N	<i>Vida-média</i> ¹		Notas
			τ	/s	
fóton	γ	0			
neutrino	ν_e	≈ 0			2, 6
elétron	e^-	$-1,001\ 159\ 652\ 180\ 91(26)$			7, 8
múon	μ^+	8,890 597 05(20)	2,196 9811(22) $\times 10^{-6}$		2, 8, 9

(6) O *Particle Data Group* [133] fornece $\mu/\mu_B < 0,29 \times 10^{-10}$.

(7) O valor do momento magnético é dado em magnétons de Bohr μ/μ_B , $\mu_B = e\hbar/2m_e$.

(8) O sinal do momento magnético é definido em relação à direção do momento angular de spin.

(9) μ^- e μ^+ têm a mesma massa, mas carga oposta e momento magnético oposto.

¹O PDG [133] fornece os valores de vida-média (τ), vide também Secção 2.12, nota 8, p. 68.

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Momento magnético</i>	<i>Vida-média</i>	<i>Notas</i>
		μ/μ_N	τ/s	
píon	π^\pm	0	$2,6033(5) \times 10^{-8}$	2
píon	π^0	0	$8,52(18) \times 10^{-17}$	2
próton	p	2,792 847 3508(85)		8, 10
nêutron	n	-1,913 042 73(45)	$8,803(11) \times 10^2$	8
dêuteron	d	0,857 438 2311(48)		8
trítón	t	2,978 962 460(14)		8, 11
hélion	h	-2,127 625 308(25)		8, 12
partícula α	α	0		

(10) O momento magnético do próton blindado, μ_p' , é dado por $\mu_p'/\mu_N = 2,792\,775\,600(30)$ (H_2O , esfera, 25 °C).

(11) A meia-vida, $t_{1/2}$, do trítio é cerca de 12,3 a (vide Secção 2.12, p. 68), com uma vida-média correspondente, τ , de 17,7 a.

(12) Este é o momento magnético do hélio blindado, μ_h' , dado como μ_h'/μ_N (gás, esfera, 25 °C).

Na Física Nuclear e na Química Nuclear, as massas de partículas são frequentemente referidas através dos seus equivalentes em energia (usualmente em megaelétrons-volt). A unidade de massa atômica unificada corresponde a 931,494 095(13) MeV [23].

Pares similares a átomos formados por uma partícula positiva e um elétron são às vezes suficientemente estáveis para serem tratados como entidades individuais com nomes especiais.

Exemplos positrônio (*Port.*: positrónio) (e^+e^- ; Ps) $m(\text{Ps}) = 1,097\ 152\ 515\ 21(46)\times 10^{-3}$ u
 muônio ($\mu^+\mu^-$; Mu) $m(\text{Mu}) = 0,113\ 977\ 4909(29)$ u

6.2 Pesos atômicos padrões dos elementos 2015

Como acordado em 1979 pela Comissão de Pesos Atômicos e Abundâncias Isotópicas da IUPAC (CAWIA, sigla do nome desta comissão em Inglês) [135], a massa atômica relativa (geralmente designada peso atômico [136]) de um elemento, E, pode ser definida para qualquer amostra especificada. Ela é a massa média dos átomos na amostra dividida pela unidade de massa atômica unificada¹² ou, alternativamente, a massa molar dos átomos dividida pela constante de massa molar $M_u = N_A m_u = 1 \text{ g mol}^{-1}$:

$$A_r(E) = \overline{m}_a(E)/u = M(E)/M_u$$

Variações na composição isotópica de muitos elementos em amostras de diferente origem limitam a precisão com que um peso atômico pode ser apresentado. Os pesos atômicos padrão, atualizados a cada dois anos pela CAWIA, devem ser entendidos como aplicáveis a materiais normais. Isto significa que, com elevado grau de confiança, o peso atômico de um elemento em qualquer amostra normal deve estar dentro dos limites de incerteza do valor tabelado. Por "normal" aqui quer indicar-se que o material é uma fonte provável de uma substância simples do elemento ou dos seus compostos comercializados para fins industriais e científicos, e que não foi submetido a modificação significativa de composição isotópica dentro de um período geologicamente breve [137]. Isto exclui materiais só estudados devido à sua composição isotópica muito anômala (*Port.*: anómala). Foram formuladas novas diretrizes estatísticas para se prover as incertezas das abundâncias isotópicas dos elementos 1997 [138]. Em 2011, ao publicar os pesos atômicos 2009, para ter em conta a variabilidade nos valores dos pesos atômicos de 10 elementos em materiais terrestres naturais, a CAWIA passou a expressar estes pesos atômicos como um intervalo, salientando assim que eles não são constantes da natureza [139]. Desde então, os pesos atômicos de outros dois elementos também passaram a ser expressos como um intervalo. Por exemplo, no caso do carbono, o peso atômico padrão é atualmente expresso como [12,0096, 12,0116], o que significa que em qualquer material normal ele será igual a ou maior que 12,0096 e menor que ou igual a 12,0116 [140].

Na Tabela 6.2 estão listados os pesos atômicos dos elementos 2015 e o símbolo do termo $2S+1L_J$ para o estado atômico fundamental [141], em ordem crescente do número atômico. Os pesos atômicos 2015, que se aplicam aos elementos tal como eles ocorrem naturalmente na Terra, foram recomendados pela Comissão de Abundâncias Isotópicas e Pesos Atômicos (CIAAW, sigla associada ao nome da comissão em Inglês) da IUPAC, sendo iguais aos recomendados em 2013 [140] exceto o do itérbio [142]. Uma versão eletrônica da Tabela de Pesos Atômicos Padrão recomendados pela CIAAW pode ser consultada na página web da CIAAW em <http://ciaaw.org/atomic-weights.htm>. A lista inclui os nomes aprovados para os elementos 110 e 111 (Ds e Rg) [143, 144]. Note-se que o símbolo Rg também tem sido usado para "gases raros". Também inclui os nomes aprovados para os elementos 112 (Cn) [145], 114 e 116 (Fl e Lv) [146], e 113, 115, 117 e 118 (Nh, Mc, Ts e Og) [147]. Para uma história dos valores dos pesos atômicos recomendados desde 1882 até 1997, vide [148].

Os pesos atômicos de muitos elementos dependem da origem e tratamento dos materiais [152]. As notas referentes a esta tabela explicam os tipos de variação esperados para elementos específicos. Quando os valores dos pesos atômicos são usados levando em consideração estas notas, são considerados confiáveis até \pm o número fornecido entre parênteses e aplicável ao último dígito. Para elementos sem uma composição isotópica terrestre característica, não se recomenda nenhum peso atômico padrão. A massa atômica do seu isótopo mais estável pode ser encontrada na Secção 6.3.

¹²Note-se que a constante de massa atômica m_u é igual ao dalton, Da, ou à unidade de massa atômica unificada, u, e é definida em termos da massa do átomo de carbono-12: $m_u = 1 \text{ u} = 1 \text{ Da} = m_a(^{12}\text{C})/12$.

<i>Número</i>	<i>Peso atômico</i>	<i>Símbolo do termo do estado fundamental</i>	<i>Notas</i>		
<i>Símbolo</i>	<i>atômico</i>	<i>Nome</i>	<i>(Massa atômica relativa)</i>		
H	1	hidrogênio	[1,007 84, 1,008 11]	$^2S_{1/2}$	m
He	2	hélio	4,002 602(2)	1S_0	g, r
Li	3	lítio	[6,938, 6,997]	$^2S_{1/2}$	m
Be	4	berílio	9,012 1831(5)	1S_0	
B	5	boro	[10,806, 10,821]	$^2P_{1/2}^o$	m
C	6	carbono	[12,0096, 12,0116]	3P_0	
N	7	nitrogênio	[14,006 43, 14,007 28]	$^4S_{3/2}^o$	m
O	8	oxigênio	[15,999 03, 15,999 77]	3P_2	m
F	9	flúor	18,998 403 163(6)	$^2P_{3/2}^o$	
Ne	10	neônio <i>(Port.: néon)</i>	20,1797(6)	1S_0	g, m
Na	11	sódio	22,989 769 28(2)	$^2S_{1/2}$	
Mg	12	magnésio	[24,304, 24,307]	1S_0	
Al	13	alumínio	26,981 5385(7)	$^2P_{1/2}^o$	
Si	14	silício	[28,084, 28,086]	3P_0	
P	15	fósforo	30,973 761 998(5)	$^4S_{3/2}^o$	
S	16	enxofre	[32,059, 32,076]	3P_2	
Cl	17	cloro	[35,446, 35,457]	$^2P_{3/2}^o$	m
Ar	18	argônio <i>(Port.: crómio)</i>	39,948(1)	1S_0	g, r
K	19	potássio	39,0983(1)	$^2S_{1/2}$	
Ca	20	cálcio	40,078(4)	1S_0	g
Sc	21	escândio	44,955 908(5)	$^2D_{3/2}$	
Ti	22	titânio	47,867(1)	3F_2	
V	23	vanádio	50,9415(1)	$^4F_{3/2}$	
Cr	24	crômio <i>(Port.: crómio)</i>	51,9961(6)	7S_3	
Mn	25	manganês	54,938 044(3)	$^6S_{5/2}$	
Fe	26	ferro	55,845(2)	5D_4	
Co	27	cobalto	58,933 194(4)	$^4F_{9/2}$	
Ni	28	níquel	58,6934(4)	3F_4	r
Cu	29	cobre	63,546(3)	$^2S_{1/2}$	r
Zn	30	zinco	65,38(2)	1S_0	r
Ga	31	gálio	69,723(1)	$^2P_{1/2}^o$	
Ge	32	germânio	72,630(8)	3P_0	
As	33	arsênio <i>(Port.: arsénio)</i>	74,921 595(6)	$^4S_{3/2}^o$	
Se	34	selênio <i>(Port.: selénio)</i>	78,971(8)	3P_2	r
Br	35	bromo	[79,901, 79,907]	$^2P_{3/2}^o$	
Kr	36	criptônio <i>(Port.: crípton)</i>	83,798(2)	1S_0	g, m
Rb	37	rubídio	85,4678(3)	$^2S_{1/2}$	g
Sr	38	estrôncio	87,62(1)	1S_0	g, r

	<i>Número</i>		<i>Peso atômico</i> (Massa atômica relativa)	<i>Símbolo do termo do estado fundamental</i>	<i>Notas</i>
<i>Símbolo atômico</i>	<i>Nome</i>				
Y	39	ítrio	88,905 84(2)	$^2D_{3/2}$	
Zr	40	zircônio <i>(Port.: zircónio)</i>	91,224(2)	3F_2	g
Nb	41	nióbio	92,906 37(2)	$^6D_{1/2}$	
Mo	42	molibdênio <i>(Port.: molibénio)</i>	95,95(1)	7S_3	g
Tc	43	tecncêcio		$^6S_{5/2}$	A
Ru	44	rutênio <i>(Port.: ruténio)</i>	101,07(2)	5F_5	g
Rh	45	ródio	102,905 50(2)	$^4F_{9/2}$	
Pd	46	paládio	106,42(1)	1S_0	g
Ag	47	prata	107,8682(2)	$^2S_{1/2}$	g
Cd	48	cádmio	112,414(4)	1S_0	g
In	49	índio	114,818(1)	$^2P_{1/2}^o$	
Sn	50	estanho	118,710(7)	3P_0	g
Sb	51	antimônio <i>(Port.: antimónio)</i>	121,760(1)	$^4S_{3/2}^o$	g
Te	52	telúrio	127,60(3)	3P_2	g
I	53	iodo	126,904 47(3)	$^2P_{3/2}^o$	
Xe	54	xenônio <i>(Port.: xénon)</i>	131,293(6)	1S_0	g, m
Cs	55	césio	132,905 451 96(6)	$^2S_{1/2}$	
Ba	56	bário	137,327(7)	1S_0	
La	57	lantânio	138,905 47(7)	$^2D_{3/2}$	g
Ce	58	cério	140,116(1)	$^1G_4^o$	g
Pr	59	praseodímio	140,907 66(2)	$^4I_{9/2}^o$	
Nd	60	neodímio	144,242(3)	5I_4	g
Pm	61	promécio		$^6H_{5/2}^o$	A
Sm	62	samário	150,36(2)	7F_0	g
Eu	63	európio	151,964(1)	$^8S_{7/2}^o$	g
Gd	64	gadolínio	157,25(3)	$^9D_2^o$	g
Tb	65	térbio	158,925 35(2)	$^6H_{15/2}^o$	
Dy	66	disprósio	162,500(1)	5I_8	g
Ho	67	hólmio <i>(Port.: hólmlia)</i>	164,930 33(2)	$^4I_{15/2}^o$	
Er	68	érbio	167,259(3)	3H_6	g
Tm	69	túlio	168,934 22(2)	$^2F_{7/2}^o$	
Yb	70	itérbio	173,045(10)	1S_0	g
Lu	71	lutécio	174,9668(1)	$^2D_{3/2}$	g
Hf	72	háfnio	178,49(2)	3F_2	
Ta	73	tântalo	180,947 88(2)	$^4F_{3/2}$	
W	74	tungstênio <i>(Port.: tungsténio)</i>	183,84(1)	5D_0	
Re	75	rênio <i>(Port.: rénicio)</i>	186,207(1)	$^6S_{5/2}$	
Os	76	ôsmio <i>(Port.: ósmio)</i>	190,23(3)	5D_4	g

	<i>Número</i>		<i>Peso atômico</i> (<i>Massa atômica relativa</i>)	<i>Símbolo do termo do estado fundamental</i>	<i>Notas</i>
	<i>Símbolo atômico</i>	<i>Nome</i>			
Ir	77	irídio	192,217(3)	$^4F_{9/2}$	
Pt	78	platina	195,084(9)	3D_3	
Au	79	ouro	196,966 569(5)	$^2S_{1/2}$	
Hg	80	mercúrio	200,592(3)	1S_0	
Tl	81	tálio	[204,382, 204,385]	$^2P_{1/2}^o$	
Pb	82	chumbo	207,2(1)	3P_0	g, r
Bi	83	bismuto	208,980 40(1)	$^4S_{3/2}^o$	Z
Po	84	polônio <i>(Port.: polónio)</i>		3P_2	A
At	85	astato <i>(Port.: ástato)</i>		$^2P_{3/2}^o$	A
Rn	86	radônio <i>(Port.: rádon ou radão)</i>		1S_0	A
Fr	87	frâncio		$^2S_{1/2}$	A
Ra	88	rádio		1S_0	A
Ac	89	actínio		$^2D_{3/2}$	A
Th	90	tório	232,0377(4)	3F_2	Z
Pa	91	protactínio	231,035 88(2)	$^4K_{11/2}$	Z
U	92	urânio	238,028 91(3)	5L_6	g, m, Z
Np	93	neptúnio		$^6L_{11/2}$	A
Pu	94	plutônio <i>(Port.: plutónio)</i>		7F_0	A
Am	95	amerício		$^8S_{7/2}^o$	A
Cm	96	cúrio		$^9D_2^o$	A
Bk	97	berquélio		$^6H_{15/2}^o$	A
Cf	98	califórnia		5I_8	A
Es	99	einstênio <i>(Port.: einsténio)</i>		$^4I_{15/2}^o$	A
Fm	100	férmito		3H_6	A
Md	101	mendelévio		$^2F_{7/2}^o$	A
No	102	nóbélio		1S_0	A
Lr	103	laurêncio			A
Rf	104	rutherfordio			A
Db	105	dúbnio			A
Sg	106	seabórgio			A
Bh	107	bôhrio			A
Hs	108	hássio			A
Mt	109	meitnério			A
Ds	110	darmstádtio			A
Rg	111	roentgênio <i>(Port.: roentgénio)</i>			A
Cn	112	copernício			A
Nh	113	nihônio <i>(Port.: nipónio)</i>			A
Fl	114	fleróvio			A
Mc	115	moscóvio			A

<i>Número</i>	<i>Peso atômico</i>	<i>Símbolo do termo do estado fundamental</i>	<i>Notas</i>
<i>Símbolo atômico</i>	<i>Nome</i>	<i>(Massa atômica relativa)</i>	
Lv	116	livermório	A
Ts	117	tennesso	A
Og	118	oganessônio <i>(Port.: organessónio)</i>	A

(g) Conhecem-se amostras geológicas nas quais o elemento tem uma composição isotópica fora dos limites para material normal. A diferença entre o peso atômico do elemento em tais amostras e o listado na tabela pode exceder a incerteza indicada.

(m) Encontraram-se composições isotópicas modificadas em material disponível comercialmente porque este foi submetido a um fracionamento isotópico inadvertido ou não revelado. Podem ocorrer desvios substanciais no peso atômico do elemento em comparação com o apresentado na tabela.

(r) A faixa da composição isotópica de material terrestre normal impede que se indique um valor mais preciso de $A_r(E)$; o valor tabelado de $A_r(E)$ e a incerteza devem ser aplicáveis a material normal.

(A) Elemento radioativo sem nucléodo estável e que carece de uma composição isotópica terrestre característica. Na Tabela Periódica dos Elementos da IUPAC fornecida no final deste livro, consequentemente não consta valor de peso atômico para o elemento. (vide também a tabela de massas de nuclídeos, Secção 6.3).

(Z) Elemento sem nucléodo(s) estável(is), mas que apresenta uma faixa de composições terrestres características de radionucléodo(s) tal que um peso atômico significativo pode ser indicado.

6.3 Propriedades de nuclídeos

A tabela contém as seguintes propriedades de nuclídeos que ocorrem naturalmente e de alguns nuclídeos instáveis:

Coluna

1. Z é o número atômico (número de prótons) do nuclídeo.
2. Símbolo do elemento.
3. A é o número de massa do nuclídeo. O asterisco * denota um nuclídeo instável (para elementos sem isótopos que ocorrem naturalmente, é o nuclídeo mais estável) e o sinal # denota um nuclídeo de tempo de vida suficientemente longo (maior que 10^5 anos) [149] para permitir a determinação da sua abundância isotópica.
4. A massa atômica é fornecida em unidades de massa atômica unificada, $1 \text{ u} = m_a(^{12}\text{C})/12$, junto com o desvio padrão entre parênteses, aplicável aos últimos dígitos citados. Os dados foram extraídos dum a lista mais extensa da avaliação de massas atômicas AME2012 [150, 151].
5. Composições isotópicas representativas são listadas como frações de quantidade de substância (fração molar), x , dos correspondentes átomos expressas em porcentagem. De acordo com a opinião da CAWIA, representam a composição isotópica de substâncias químicas ou materiais mais comumente encontrados nos laboratórios. Portanto, podem não corresponder ao material natural mais abundante [152]. Deve salientar-se que esses valores devem ser usados para determinar as propriedades médias de substâncias químicas ou materiais de origem terrestre natural não especificada, embora nenhuma amostra real com exatamente a composição fornecida possa estar disponível. Os valores aqui listados são da reavaliação 2013 da CIAAW, conforme fornecidos na coluna 9 da ref. [152] como abundâncias isotópicas representativas. Quando é necessário realizar um trabalho preciso, tal como a avaliação de propriedades individuais, devem ser usadas amostras de referência com abundâncias isotópicas conhecidas com maior precisão (tais como as listadas na coluna 8 da ref. [152]) ou devem ser realizadas medidas apropriadas. As incertezas fornecidas entre parênteses são aplicáveis aos últimos dígitos citados e abrangem o intervalo de variações prováveis nos materiais bem como erros experimentais. Para dados adicionais e informação básica sobre intervalos de variações de abundância de isótopos em material natural ou antropogênico (*Port.: antropogénico*), vide [153, 154].
6. I é o número quântico de spin nuclear. Um sinal mais indica paridade positiva e um sinal menos indica paridade negativa. Valores incertos estão entre parênteses; todos os valores foram retirados da avaliação NUBASE [151].
7. Para o momento magnético, é fornecido o valor esperado máximo para a componente z do momento dipolar magnético, m , expresso em magnétons nucleares. O sinal mais ou menos implica que a orientação do dipolo magnético em relação ao momento angular corresponde à rotação de uma carga positiva ou negativa, respectivamente. Os dados foram extraídos de uma compilação feita por N. J. Stone [155]. Um asterisco * indica que mais de um valor é dado na compilação original; ** indica que existe um valor mais antigo com informação de uma precisão maior. A ausência de um sinal mais ou menos significa que o sinal não foi determinado pelo experimentador.
8. Para o momento quadrupolar, é fornecida a área do momento quadrupolar elétrico (vide Secção 2.5, notas 14 e 15, p. 25 e 26), expressa na unidade femtometro quadrado, $1 \text{ fm}^2 = 10^{-30} \text{ m}^2$, embora na maioria das tabelas ela seja citada em barns (b), $1 \text{ b} = 10^{-28} \text{ m}^2 = 100 \text{ fm}^2$. O sinal mais implica um núcleo prolato, o sinal menos um núcleo oblato. Os dados foram retirados de N. J. Stone [156]. Um asterisco * indica que mais de um valor é dado na compilação original; ** indica que existe um valor mais antigo com informação de uma precisão maior. A ausência de um sinal mais ou menos significa que o sinal não foi determinado pelo experimentador.

<i>Z</i>	<i>Símbolo</i>	<i>A</i>	<i>Massa atômica,</i> <i>m_a/u</i>	<i>Composição</i> <i>isotópica,</i> <i>100 x</i>	<i>Spin</i> <i>nuclear,</i> <i>I</i>	<i>Momento</i> <i>magnético,</i> <i>m/μ_N</i>	<i>Momento</i> <i>quadrupolar,</i> <i>Q/fm²</i>
1	H	1	1,007 825 032 23(9)	[99,972, 99,999]	1/2+	+2,792 847 34(3)	
		(D)	2,014 101 778 12(12)	[0,001, 0,028]	1+	+0,857 438 228(9)*	+0,286(2)
		(T)	3,* 3,016 049 2779(24)		1/2+	+2,978 962 44(4)	
2	He	3	3,016 029 3201(25)	0,0002(2)	1/2+	-2,127 497 72(3)	
		4	4,002 603 254 13(6)	99,9998(2)	0+	0	
3	Li	6	6,015 122 8874(15)	[1,9, 7,8] ^a	1+	+0,822 0473(6)*	-0,0806(6)
		7	7,016 003 437(5)	[92,2, 98,1] ^a	3/2-	+3,256 4625(4)*	-4,00(3)
4	Be	9	9,012 183 07(8)	100	3/2-	-1,177 432(3)*	+5,29(4)
5	B	10	10,012 9369(4)	[18,9, 20,4]	3+	+1,800 644 78(6)	+8,45(2)
		11	11,009 305 4(4)	[79,6, 81,1]	3/2-	+2,688 6489(10)	+4,059(10)
6	C	12	12 (por definição)	[98,84, 99,04]	0+	0	
		13	13,003 354 835 07(23)	[0,96, 1,16]	1/2-	+0,702 4118(14)	
		14*	14,003 241 988(4)		0+	0	
7	N	14	14,003 074 004 43(20)	[99,578, 99,663]	1+	+0,403 761 00(6)	+2,044(3)
		15	15,000 108 8989(6)	[0,337, 0,422]	1/2-	-0,283 188 84(5)	
8	O	16	15,994 914 619 57(17)	[99,738, 99,776]	0+	0	
		17	16,999 131 7565(7)	[0,0367, 0,0400]	5/2+	-1,893 79(9)	-2,56(2)
		18	17,999 159 6129(8)	[0,187, 0,222]	0+	0	
9	F	19	18,998 403 1627(9)	100	1/2+	+2,628 868(8)	
10	Ne	20	19,992 440 1762(17)	90,48(3)	0+	0	
		21	20,993 846 69(4)	0,27(1)	3/2+	-0,661 797(5)	+10,2(8)
		22	21,991 385 115(19)	9,25(3)	0+	0	
11	Na	23	22,989 769 2820(19)	100	3/2+	+2,217 6556(6)*	+10,4(1)
12	Mg	24	23,985 041 698(14)	[78,88, 79,05]	0+	0	
		25	24,985 836 98(5)	[9,988, 10,034]	5/2+	-0,855 45(8)	+19,9(2)*
		26	25,982 592 97(3)	[10,96, 11,09]	0+	0	
13	Al	27	26,981 538 53(11)	100	5/2+	+3,641 5069(7)	+14,66(10)*
14	Si	28	27,976 926 5346(4)	[92,191, 92,318]	0+	0	
		29	28,976 494 6649(5)	[4,645, 4,699]	1/2+	-0,555 29(3)	
		30	29,973 770 136(23)	[3,037, 3,110]	0+	0	
15	P	31	30,973 761 9984(7)	100	1/2+	+1,131 60(3)	
16	S	32	31,972 071 1744(14)	[94,41, 95,29]	0+	0	
		33	32,971 458 9098(15)	[0,729, 0,797]	3/2+	+0,643 8212(14)	-6,78(13)
		34	33,967 867 00(5)	[3,96, 4,77]	0+	0	
		36	35,967 080 71(20)	[0,0129, 0,0187]	0+	0	
17	Cl	35	34,968 852 68(4)	[75,5, 76,1]	3/2+	+0,821 8743(4)	-8,17(8)
		37	36,965 902 60(6)	[23,9, 24,5]	3/2+	+0,684 1236(4)	-6,44(6)
18	Ar	36	35,967 545 105(29)	0,3336(210)	0+	0	
		38	37,962 732 11(21)	0,0629(70)	0+	0	
		40	39,962 383 1237(24)	99,6035(250)	0+	0	
19	K	39	38,963 706 486(5)	93,2581(44)	3/2+	+0,391 507 31(12)**	+5,85(6)
		40#	39,963 998 17(6)	0,0117(1)	4-	-1,298 100(3)*	-7,3(1)
		41	40,961 825 258(4)	6,7302(44)	3/2+	+0,214 892 74(12)**	+7,11(7)*

(a) Materiais empobrecidos em lítio-6 são fontes comuns de reagentes de laboratório comercialmente disponíveis, sendo esta a razão para o amplo intervalo de abundâncias isotópicas listado.

<i>Z</i>	<i>Símbolo</i>	<i>A</i>	<i>Massa atômica,</i> <i>m_a/u</i>	<i>Composição</i> <i>isotópica,</i> <i>100 x</i>	<i>Spin</i> <i>nuclear,</i> <i>I</i>	<i>Momento</i> <i>magnético,</i> <i>m/μ_N</i>	<i>Momento</i> <i>quadrupolar,</i> <i>Q/fm²</i>
20	Ca	40	39,962 590 864(22)	96,941(156)	0+	0	
		42	41,958 617 83(16)	0,647(23)	0+	0	
		43	42,958 766 44(24)	0,135(10)	7/2-	-1,317 643(7)	-4,08(8)
		44	43,955 481 6(3)	2,086(110)	0+	0	
		46	45,953 6890(24)	0,004(3)	0+	0	
		48#	47,952 522 77(13)	0,187(21)	0+	0	
21	Sc	45	44,955 9083(8)	100	7/2-	+4,756 487(2)	-22,0(2)
22	Ti	46	45,952 6277(4)	8,25(3)	0+	0	
		47	46,951 7588(4)	7,44(2)	5/2-	-0,788 48(1)	+30,0(10)
		48	47,947 9420(4)	73,72(3)	0+	0	
		49	48,947 8657(4)	5,41(2)	7/2-	-1,104 17(1)	24,7(11)
		50	49,944 7869(4)	5,18(2)	0+	0	
23	V	50#	49,947 1560(9)	0,250(10)	6+	+3,345 6889(14)	21(4)
		51	50,943 9570(9)	99,750(10)	7/2-	+5,148 7057(2)	-4,3(5)*
24	Cr	50	49,946 0418(9)	4,345(13)	0+	0	
		52	51,940 5062(6)	83,789(18)	0+	0	
		53	52,940 6481(6)	9,501(17)	3/2-	-0,474 54(3)	-15(5)
		54	53,938 8792(6)	2,365(7)	0+	0	
25	Mn	55	54,938 0439(5)	100	5/2-	+3,468 717 90(9)*	+33,0(10)
26	Fe	54	53,939 6090(5)	5,845(105)	0+	0	
		56	55,934 9363(5)	91,754(106)	0+	0	
		57	56,935 3928(5)	2,119(29)	1/2-	+0,090 623 00(9)*	
		58	57,933 2744(5)	0,282(12)	0+	0	
27	Co	59	58,933 1943(6)	100	7/2-	+4,627(9)	+42(3)*
28	Ni	58	57,935 3424(5)	68,0769(190)	0+	0	
		60	59,930 7859(5)	26,2231(150)	0+	0	
		61	60,931 0556(5)	1,1399(13)	3/2-	-0,750 02(4)	+16,2(15)
		62	61,928 3454(6)	3,6345(40)	0+	0	
		64	63,927 9668(6)	0,9256(19)	0+	0	
29	Cu	63	62,929 5977(6)	69,15(15)	3/2-	2,227 3456(14)*	-22,0(15)
		65	64,927 7897(7)	30,85(15)	3/2-	2,3817(3)*	-20,4(14)
30	Zn	64	63,929 1420(7)	49,17(75)	0+	0	
		66	65,926 0338(9)	27,73(98)	0+	0	
		67	66,927 1277(10)	4,04(16)	5/2-	+0,875 2049(11)*	+15,0(15)
		68	67,924 8446(10)	18,45(63)	0+	0	
		70	69,925 3192(21)	0,61(10)	0+	0	
31	Ga	69	68,925 5735(13)	60,108(50)	3/2-	+2,016 59(5)*	+17,1(2)
		71	70,924 7026(9)	39,892(50)	3/2-	+2,562 27(2)	+10,7(1)
32	Ge	70	69,924 2488(9)	20,52(19)	0+	0	
		72	71,922 075 83(8)	27,45(15)	0+	0	
		73	72,923 458 96(6)	7,76(8)	9/2+	-0,879 4677(2)	-19,6(1)
		74	73,921 177 762(14)	36,52(12)	0+	0	
		76#	75,921 402 726(19)	7,75(12)	0+	0	
33	As	75	74,921 5946(9)	100	3/2-	+1,439 48(7)	+31,4(6)

<i>Z</i>	<i>Símbolo</i>	<i>A</i>	<i>Massa atômica</i> <i>m_a/u</i>	<i>Composição</i> <i>isotópica,</i> <i>100 x</i>	<i>Spin</i> <i>nuclear,</i> <i>I</i>	<i>Momento</i> <i>magnético,</i> <i>m/μ_N</i>	<i>Momento</i> <i>quadrupolar,</i> <i>Q/fm²</i>
34	Se	74	73,922 475 935(16)	0,86(3)	0+	0	
		76	75,919 213 704(17)	9,23(7)	0+	0	
		77	76,919 914 15(7)	7,60(7)	1/2-	+0,535 0422(6)*	
		78	77,917 309 28(20)	23,69(22)	0+	0	
		80	79,916 5218(13)	49,80(36)	0+	0	
		82#	81,916 699 5(15)	8,82(15)	0+	0	
35	Br	79	78,918 3376(14)	[50,5, 50,8]	3/2-	+2,106 400(4)	+31,3(3)
		81	80,916 2897(14)	[49,2, 49,5]	3/2-	+2,270 562(4)	+26,2(3)
36	Kr	78	77,920 3649(8)	0,355(3)	0+	0	
		80	79,916 3781(7)	2,286(10)	0+	0	
		82	81,913 4827(9)	11,593(31)	0+	0	
		83	82,914 1272(3)	11,500(19)	9/2+	-0,970 669(3)	+25,9(1)*
		84	83,911 497 728(4)	56,987(15)	0+	0	
		86	85,910 610 627(4)	17,279(41)	0+	0	
37	Rb	85	84,911 789 738(5)	72,17(2)	5/2-	+1,352 98(10)**	+27,6(1)
		87#	86,909 180 532(7)	27,83(2)	3/2-	+2,751 31(12)**	+13,35(5)
38	Sr	84	83,913 4191(13)	0,56(2)	0+	0	
		86	85,909 2606(12)	9,86(20)	0+	0	
		87	86,908 8775(12)	7,00(20)	9/2+	-1,093 6030(13)*	+30,5(2)
		88	87,905 6125(12)	82,58(35)	0+	0	
39	Y	89	88,905 8403(24)	100	1/2-	-0,137 4154(3)*	
40	Zr	90	89,904 6977(20)	51,45(4)	0+	0	
		91	90,905 6396(20)	11,22(5)	5/2+	-1,303 62(2)	-17,6(3)
		92	91,905 0347(20)	17,15(3)	0+	0	
		94	93,906 3108(20)	17,38(4)	0+	0	
		96#	95,908 2714(21)	2,80(2)	0+	0	
41	Nb	93	92,906 3730(20)	100	9/2+	+6,1705(3)	-32(2)
42	Mo	92	91,906 8080(8)	14,649(106)	0+	0	
		94	93,905 0849(5)	9,187(33)	0+	0	
		95	94,905 8388(5)	15,873(30)	5/2+	-0,9142(1)	-2,2(1)
		96	95,904 6761(5)	16,673(8)	0+	0	
		97	96,906 0181(5)	9,582(15)	5/2+	-0,9335(1)	+25,5(13)
		98	97,905 4048(5)	24,292(80)	0+	0	
		100#	99,907 4718(11)	9,744(65)	0+	0	
43	Tc	98#	97,907 212(4)		(6)+		
44	Ru	96	95,907 5903(5)	5,54(14)	0+	0	
		98	97,905 287(7)	1,87(3)	0+	0	
		99	98,905 9341(11)	12,76(14)	5/2+	-0,641(5)	+7,9(4)
		100	99,904 2143(11)	12,60(7)	0+	0	
		101	100,905 5769(12)	17,06(2)	5/2+	-0,719(6)*	+46(2)
		102	101,904 3441(12)	31,55(14)	0+	0	
		104	103,905 4275(28)	18,62(27)	0+	0	
45	Rh	103	102,905 4980(26)	100	1/2-	-0,8840(2)	
46	Pd	102	101,905 6022(28)	1,02(1)	0+	0	
		104	103,904 0305(14)	11,14(8)	0+	0	
		105	104,905 0796(12)	22,33(8)	5/2+	-0,642(3)	+66,0(11)
		106	105,903 4804(12)	27,33(3)	0+	0	
		108	107,903 8916(12)	26,46(9)	0+	0	
		110	109,905 1722(7)	11,72(9)	0+	0	

<i>Z</i>	<i>Símbolo</i>	<i>A</i>	<i>Massa atômica,</i> <i>m_a/u</i>	<i>Composição</i> <i>isotópica,</i> <i>100 x</i>	<i>Spin</i> <i>nuclear,</i> <i>I</i>	<i>Momento</i> <i>magnético,</i> <i>m/μ_N</i>	<i>Momento</i> <i>quadrupolar,</i> <i>Q/fm²</i>
47	Ag	107	106,905 0916(26)	51,839(8)	1/2-	-0,113 679 65(15)*	
		109	108,904 7553(14)	48,161(8)	1/2-	-0,130 690 6(2)*	
48	Cd	106	105,906 4599(12)	1,245(22)	0+	0	
		108	107,904 1834(12)	0,888(11)	0+	0	
		110	109,903 0066(6)	12,470(61)	0+	0	
		111	110,904 1829(6)	12,795(12)	1/2+	-0,594 8861(8)*	
		112	111,902 7629(6)	24,109(7)	0+	0	
		113#	112,904 4081(4)	12,227(7)	1/2+	-0,622 3009(9)	
		114	113,903 3651(4)	28,754(81)	0+	0	
		116#	115,904 763 15(17)	7,512(54)	0+	0	
49	In	113	112,904 0618(9)	4,281(52)	9/2+	+5,5289(2)	75,9(8)
		115#	114,903 878 776(13)	95,719(52)	9/2+	+5,5408(2)	77,0(8)
50	Sn	112	111,904 8239(6)	0,97(1)	0+	0	
		114	113,902 7827(10)	0,66(1)	0+	0	
		115	114,903 344 699(16)	0,34(1)	1/2+	-0,918 83(7)	
		116	115,901 742 80(10)	14,54(9)	0+	0	
		117	116,902 9540(5)	7,68(7)	1/2+	-1,001 04(7)	
		118	117,901 6066(5)	24,22(9)	0+	0	
		119	118,903 3112(8)	8,59(4)	1/2+	-1,047 28(7)	
		120	119,902 2016(10)	32,58(9)	0+	0	
		122	121,903 4438(26)	4,63(3)	0+	0	
		124	123,905 2766(11)	5,79(5)	0+	0	
51	Sb	121	120,903 812(3)	57,21(5)	5/2+	+3,3634(3)	-54,3(11)
		123	122,904 2132(23)	42,79(5)	7/2+	+2,5498(2)	-69,2(14)
52	Te	120	119,904 059(3)	0,09(1)	0+	0	
		122	121,903 0435(16)	2,55(12)	0+	0	
		123#	122,904 2698(16)	0,89(3)	1/2+	-0,736 9478(8)	
		124	123,902 8171(16)	4,74(14)	0+	0	
		125	124,904 4299(16)	7,07(15)	1/2+	-0,888 4509(10)*	
		126	125,903 3109(16)	18,84(25)	0+	0	
		128#	127,904 4613(9)	31,74(8)	0+	0	
		130#	129,906 222 749(12)	34,08(62)	0+	0	
53	I	127	126,904 472(4)	100	5/2+	+2,813 27(8)	-69,6(12)
54	Xe	124	123,905 8920(19)	0,095(5)	0+	0	
		126	125,904 298(4)	0,089(3)	0+	0	
		128	127,903 5310(11)	1,910(13)	0+	0	
		129	128,904 780 861(6)	26,401(138)	1/2+	-0,777 976(8)	
		130	129,903 509 350(10)	4,071(22)	0+	0	
		131	130,905 084 06(24)	21,232(51)	3/2+	+0,6915(2)**	-11,4(1)
		132	131,904 155 086(6)	26,909(55)	0+	0	
		134	133,905 3947(9)	10,436(35)	0+	0	
		136	135,907 214 484(11)	8,857(72)	0+	0	
55	Cs	133	132,905 451 961(9)	100	7/2+	+2,582 025(3)**	-0,343(10)
56	Ba	130	129,906 3207(28)	0,11(1)	0+	0	
		132	131,905 0611(11)	0,10(1)	0+	0	
		134	133,904 508 18(30)	2,42(15)	0+	0	
		135	134,905 688 38(29)	6,59(10)	3/2+	0,838 627(2)*	+16,0(3)
		136	135,904 575 73(29)	7,85(24)	0+	0	
		137	136,905 8271(3)	11,23(23)	3/2+	0,937 34(2)*	+24,5(4)
		138	137,905 2470(3)	71,70(29)	0+	0	

<i>Z</i>	<i>Símbolo</i>	<i>A</i>	<i>Massa atômica,</i> <i>m_a/u</i>	<i>Composição</i> <i>isotópica,</i> <i>100 x</i>	<i>Spin</i> <i>nuclear,</i> <i>I</i>	<i>Momento</i> <i>magnético,</i> <i>m/μ_N</i>	<i>Momento</i> <i>quadrupolar,</i> <i>Q/fm²</i>
57	La	138#	137,907 115(4)	0,088 81(71)	5+	+3,713 646(7)	+39(3)
		139	138,906 3563(24)	99,911 19(71)	7/2+	+2,783 0455(9)	+20,0(6)
58	Ce	136	135,907 1292(4)	0,186(2)	0+	0	
		138	137,905 991(11)	0,251(2)	0+	0	
		140	139,905 4431(23)	88,449(51)	0+	0	
		142	141,909 2504(29)	11,114(51)	0+	0	
59	Pr	141	140,907 6576(23)	100	5/2+	+4,2754(5)	-7,7(6)
60	Nd	142	141,907 7290(20)	27,153(40)	0+	0	
		143	142,909 8200(20)	12,173(26)	7/2-	-1,065(5)	-61(2)
		144#	143,910 0930(20)	23,798(19)	0+	0	
		145	144,912 5793(20)	8,293(12)	7/2-	-0,656(4)	-31,4(12)
		146	145,913 1226(20)	17,189(32)	0+	0	
		148	147,916 8993(26)	5,756(21)	0+	0	
		150#	149,920 9022(18)	5,638(28)	0+	0	
61	Pm	145 *	144,912 756(3)		5/2+		
62	Sm	144	143,912 0065(21)	3,08(4)	0+	0	
		147#	146,914 9044(19)	15,00(14)	7/2-	-0,812(2)**	-26(3)
		148#	147,914 8292(19)	11,25(9)	0+	0	
		149	148,917 1921(18)	13,82(10)	7/2-	-0,6677(11)**	+7,8(8)
		150	149,917 2829(18)	7,37(9)	0+	0	
		152	151,919 7397(18)	26,74(9)	0+	0	
		154	153,922 2169(20)	22,74(14)	0+	0	
63	Eu	151	150,919 8578(18)	47,81(6)	5/2+	+3,4717(6)	90,3(10)
		153	152,921 2380(18)	52,19(6)	5/2+	+1,5324(3)*	+241(2)
64	Gd	152#	151,919 7995(18)	0,20(3)	0+	0	
		154	153,920 8741(17)	2,18(2)	0+	0	
		155	154,922 6305(17)	14,80(9)	3/2-	-0,2572(4)*	+127(3)
		156	155,922 1312(17)	20,47(3)	0+	0	
		157	156,923 9686(17)	15,65(4)	3/2-	-0,3373(6)*	+135(3)
		158	157,924 1123(17)	24,84(8)	0+	0	
		160	159,927 0624(18)	21,86(3)	0+	0	
65	Tb	159	158,925 3547(19)	100	3/2+	+2,014(4)	+143,2(8)
66	Dy	156	155,924 2847(17)	0,056(3)	0+	0	
		158	157,924 416(3)	0,095(3)	0+	0	
		160	159,925 2046(20)	2,329(18)	0+	0	
		161	160,926 9405(20)	18,889(42)	5/2+	-0,480(3)*	251(2)
		162	161,926 8056(20)	25,475(36)	0+	0	
		163	162,928 7383(20)	24,896(42)	5/2-	+0,673(4)	+265(2)
		164	163,929 1819(20)	28,260(54)	0+	0	
67	Ho	165	164,930 3288(21)	100	7/2-	+4,17(3)	358(2)
68	Er	162	161,928 7884(20)	0,139(5)	0+	0	
		164	163,929 2088(20)	1,601(3)	0+	0	
		166	165,930 2995(22)	33,503(36)	0+	0	
		167	166,932 0546(22)	22,869(9)	7/2+	-0,563 85(12)*	+357(3)
		168	167,932 3767(22)	26,978(18)	0+	0	
		170	169,935 4702(26)	14,910(36)	0+	0	
69	Tm	169	168,934 2179(22)	100	1/2+	-0,2310(15)*	

<i>Z</i>	<i>Símbolo</i>	<i>A</i>	<i>Massa atômica,</i> <i>m_a/u</i>	<i>Composição</i> <i>isotópica,</i> <i>100 x</i>	<i>Spin</i> <i>nuclear,</i> <i>I</i>	<i>Momento</i> <i>magnético,</i> <i>m/μ_N</i>	<i>Momento</i> <i>quadropolar,</i> <i>Q/fm²</i>
70	Yb	168	167,933 8896(22)	0,123(3)	0+	0	
		170	169,934 7664(22)	2,982(39)	0+	0	
		171	170,936 3302(22)	14,086(140)	1/2-	+0,493 67(1)*	
		172	171,936 3859(22)	21,686(130)	0+	0	
		173	172,938 2151(22)	16,103(63)	5/2-	-0,648(3)**	+280(4)
		174	173,938 8664(22)	32,025(80)	0+	0	
		176	175,942 5764(24)	12,995(83)	0+	0	
71	Lu	175	174,940 7752(20)	97,401(13)	7/2+	+2,2323(11)**	+349(2)
		176#	175,942 6897(20)	2,599(13)	7-	+3,162(12)**	+492(3)
72	Hf	174#	173,940 0461(28)	0,16(12)	0+	0	
		176	175,941 4076(22)	5,26(70)	0+	0	
		177	176,943 2277(20)	18,60(16)	7/2-	+0,7935(6)	+337(3)
		178	177,943 7058(20)	27,28(28)	0+	0	
		179	178,945 8232(20)	13,62(11)	9/2+	-0,6409(13)	+379(3)
		180	179,946 5570(20)	35,08(33)	0+	0	
73	Ta	180	179,947 4648(24)	0,01201(32)	9-	+4,825(11)*	480(3)
		181	180,947 9958(20)	99,987 99(32)	7/2+	+2,3705(7)	+317(2)
74	W	180	179,946 7108(20)	0,12(1)	0+	0	
		182	181,948 2039(9)	26,50(16)	0+	0	
		183	182,950 2227(9)	14,31(4)	1/2-	+0,117 784 76(9)	
		184	183,950 9309(9)	30,64(2)	0+	0	
		186	185,954 3628(17)	28,43(19)	0+	0	
75	Re	185	184,952 9545(13)	37,40(5)	5/2+	+3,1871(3)	+218(2)
		187#	186,955 7501(16)	62,60(5)	5/2+	+3,2197(3)	+207(2)
76	Os	184	183,952 4885(14)	0,02(2)	0+	0	
		186#	185,953 8350(16)	1,59(64)	0+	0	
		187	186,955 7474(16)	1,96(17)	1/2-	+0,064 651 89(6)*	
		188	187,955 8352(16)	13,24(27)	0+	0	
		189	188,958 1442(17)	16,15(23)	3/2-	+0,659 933(4)	+86(3)
		190	189,958 4437(17)	26,26(20)	0+	0	
		192	191,961 4770(29)	40,78(32)	0+	0	
77	Ir	191	190,960 5893(21)	37,3(2)	3/2+	+0,1507(6)*	+81,6(9)
		193	192,962 9216(21)	62,7(2)	3/2+	+0,1637(6)*	+75,1(9)
78	Pt	190#	189,959 930(6)	0,012(2)	0+	0	
		192	191,961 039(3)	0,782(24)	0+	0	
		194	193,962 6809(10)	32,864(410)	0+	0	
		195	194,964 7917(10)	33,775(240)	1/2-	+0,609 52(6)	
		196	195,964 9521(10)	25,211(340)	0+	0	
		198	197,967 8949(23)	7,356(130)	0+	0	
		197	196,966 5688(7)	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 7686(5)	10,04(3)	0+	0	
		199	198,968 2806(5)	16,94(12)	1/2-	+0,505 8855(9)	
		200	199,968 3266(5)	23,14(9)	0+	0	
		201	200,970 3028(7)	13,17(9)	3/2-	-0,560 2257(14)*	+38,7(6)
		202	201,970 6434(7)	29,74(13)	0+	0	
		204	203,973 4940(5)	6,82(4)	0+	0	
81	Tl	203	202,972 3446(14)	[29,44, 29,59]	1/2+	+1,622 257 87(12)*	
		205	204,974 4278(14)	[70,41, 70,56]	1/2+	+1,638 214 61(12)	
82	Pb	204	203,973 0440(13)	1,4(6)	0+	0	
		206	205,974 4657(13)	24,1(30)	0+	0	
		207	206,975 89673(13)	22,1(50)	1/2-	+0,592 583(9)*	
		208	207,976 6525(13)	52,4(70)	0+	0	

<i>Z</i>	<i>Símbolo</i>	<i>A</i>	<i>Massa atômica,</i> <i>m_a/u</i>	<i>Composição</i> <i>isotópica,</i> <i>100 x</i>	<i>Spin</i> <i>nuclear,</i> <i>I</i>	<i>Momento</i> <i>magnético,</i> <i>m/μ_N</i>	<i>Momento</i> <i>quadrupolar,</i> <i>Q/fm²</i>
83	Bi	209#	208,980 3991(16)	100	9/2-	+4,1103(5)*	-51,6(15)
84	Po	209*	208,982 4308(20)		1/2-	0,68(8)	
85	At	210*	209,987 148(8)		(5)+		
86	Rn	222*	222,017 5782(25)		0+	0	
87	Fr	223*	223,019 7360(25)		3/2(-)	+1,17(2)	+117(1)
88	Ra	226*	226,025 4103(25)		0+	0	
89	Ac	227*	227,027 7523(25)		3/2-	+1,1(1)	+1,7(2) × 10
90	Th	230#	231,036 3046(19)	0,02(2)	0+	0	
		232#	232,038 0558(21)	99,98(2)	0+	0	
91	Pa	231*	231,035 8842(24)	100	3/2-	2,01(2)	
92	U	233*	233,039 6355(29)		5/2+	0,59(5)	366,3(8)*
		234#	234,040 9523(19)	0,0054(5)	0+	0	
		235#	235,043 9301(19)	0,7204(6)	7/2-	-0,38(3)*	+493,6(6)
		238#	238,050 7884(20)	99,2742(10)	0+	0	
93	Np	237#	237,048 1736(19)		5/2+	+3,14(4)*	+386,6(6)
94	Pu	244#	244,064 205(6)		0+		
95	Am	243*	243,061 3813(24)		5/2-	+1,503(14)	+432(6)
96	Cm	247#	247,070 354(5)		9/2-	0,36(7)	
97	Bk	247*	247,070 307(6)		(3/2-)		
98	Cf	251*	251,079 589(5)		1/2+		
99	Es	252*	252,082 980(50)		(4+)		
100	Fm	257*	257,095 106(7)		(9/2+)		
101	Md	258*	258,098 431(5)				
102	No	259*	259,101 030(110)				
103	Lr	262*	262,109 610(220)				
104	Rf	263*	263,112 500(200)				
105	Db	268*	268,125 670(570)				
106	Sg	269*	269,128 630(390)				
107	Bh	270*	270,133 360(310)				
108	Hs	269*	265,129 793(26)				
109	Mt	278*	278,156 310(680)				
110	Ds	281*	271,164 510(590)				
111	Rg	281*	281,166 360(890)				
112	Cn	285*	285,177 120(600)				
113	Nh	286*	286,182 210(720)				
114	Fl	289*	289,190 420(600)				
115	Mc	289*	289,193 630(890)				
116	Lv	293*	293,204 490(600)				
117	Ts	294*	294,210 460(740)				
118	Og	294*	294,213 920(710)		0+		

7 CONVERSÃO DE UNIDADES

Recomenda-se que unidades SI sejam sempre usadas em ciência e tecnologia. Contudo, algumas unidades não rationalizadas são de uso comum, e podem permanecer assim por muitos anos. Deste modo, muitas vezes é necessário converter os valores de grandezas físicas entre unidades SI e outras unidades. Este capítulo tem como objetivo facilitar este processo, bem como a conversão de unidades em geral.

A Secção 7.1, p. 137, fornece exemplos da utilização da álgebra de grandezas na conversão dos valores numéricos de grandezas físicas expressos em diferentes unidades. Na tabela da Secção 7.2, p. 141, está listada uma variedade de unidades não rationalizadas usadas em Química, com os fatores de conversão para as correspondentes unidades SI. Fatores de transformação para unidades de energia ou relacionadas com a energia (repetência, número de onda, frequência, temperatura e energia molar), e para unidades de pressão, são também apresentados em tabelas no final deste manual.

Muitas das dificuldades na conversão de unidades entre diferentes sistemas dizem respeito às unidades eletromagnéticas ou às unidades **atômicas** e às suas relações com as unidades eletromagnéticas. Nas Secções 7.3 e 7.4, p. 149 e 152, as relações entre unidades eletromagnéticas e **atômicas** são desenvolvidas com maior detalhe, de forma a prover os fundamentos para os fatores de conversão apresentados na tabela da Secção 7.2, p. 141.

7.1 O uso da álgebra de grandezas

A álgebra de grandezas é um método algébrico em que símbolos são consistentemente usados para representar grandezas físicas e não os seus valores numéricos expressos em determinadas unidades. Desta forma interpretam-se sempre os valores de grandezas físicas como sendo o produto de um valor numérico por uma unidade (vide Secção 1.1, p. 3), e manipulam-se os símbolos das grandezas físicas, os valores numéricos e as unidades através das regras da álgebra (vide nota de rodapé¹³, abaixo). Recomenda-se que este método seja usado de forma abrangente em ciência e tecnologia. A álgebra de grandezas apresenta vantagens específicas ao facilitar os problemas de conversão entre diferentes unidades e diferentes sistemas de unidades. Outra vantagem importante da álgebra de grandezas resulta das equações entre grandezas serem independentes da escolha de unidades, e deverem sempre satisfazer a regra de que as dimensões devem ser as mesmas para cada termo em ambos os membros da equação. Essas vantagens são ilustradas nos exemplos descritos em seguida, nos quais os valores numéricos são aproximados.

Exemplo 1. O comprimento de onda λ de uma das linhas amarelas do sódio é dado por

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

O angstrom é definido pela equação (vide Secção 7.2, “comprimento”, p. 141)

$$1 \text{ \AA} = \text{\AA} := 10^{-10} \text{ m}, \quad \text{ou} \quad \text{m}/\text{\AA} := 10^{10}$$

Substituindo-se na primeira equação, tem-se o valor de λ em angstroms

$$\lambda/\text{\AA} = (\lambda/\text{m}) (\text{m}/\text{\AA}) \approx (5,896 \times 10^{-7}) (10^{10}) = 5896$$

ou

$$\lambda \approx 5896 \text{ \AA}$$

Exemplo 2. A pressão de vapor da água a 20 °C é descrita como sendo

$$p(\text{H}_2\text{O}, 20 \text{ }^{\circ}\text{C}) \approx 17,5 \text{ Torr}$$

As unidades Torr, bar e atmosfera são dadas pelas equações (vide Secção 7.2, “pressão”, p. 144)

$$\begin{aligned} 1 \text{ Torr} &\approx 133,3 \text{ Pa} \\ 1 \text{ bar} &:= 10^5 \text{ Pa} \\ 1 \text{ atm} &:= 101\,325 \text{ Pa} \end{aligned}$$

Desta forma

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

Exemplo 3. Medidas espectroscópicas mostram que para o radical metíleno, CH₂, o estado excitado $\tilde{\alpha}^1\text{A}_1$ ocorre a uma repetência (número de onda) de 3156 cm⁻¹ acima do estado fundamental $\tilde{\chi}^3\text{B}_1$

$$\tilde{\nu}(\tilde{\alpha} - \tilde{\chi}) = T_0(\tilde{\alpha}) - T_0(\tilde{\chi}) \approx 3156 \text{ cm}^{-1}$$

A energia de excitação do estado tripleno fundamental para o estado singuleto excitado é portanto

$$\Delta E = hc_0\tilde{\nu} \approx (6,626 \times 10^{-34} \text{ J s}) (2,998 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}) (3156 \text{ cm}^{-1}) \approx 6,269 \times 10^{-22} \text{ J m cm}^{-1} = 6,269 \times 10^{-20} \text{ J} = 6,269 \times 10^{-2} \text{ aJ}$$

¹³ Por vezes, esta forma de se trabalhar com o valor das grandezas físicas é referida como “cálculo de grandezas”. Contudo, “álgebra de grandezas” é um nome mais apropriado, pois os princípios usados são os da álgebra e não os do cálculo (no sentido de cálculo diferencial e integral).

onde os valores de h e c_0 são os fornecidos no Capítulo 5, p. 115, e se usa a relação $1\text{ m} = 100\text{ cm}$, ou $1\text{ m}\ 1\text{ cm}^{-1} = 100$. Como o **elétron-volt** é dado pela equação (Secção 7.2, “*energia*”, p. 143) $1\text{ eV} \approx 1,6022 \times 10^{-19}\text{ J}$, ou $1\text{ aJ} \approx (1/0,160\ 22)\text{ eV}$,

$$\Delta E \approx (6,269 \times 10^{-2}/0,160\ 22)\text{ eV} \approx 0,3913\text{ eV}$$

Da mesma forma, o hartree é determinado através de $E_h = \hbar^2/m_e a_0^2 \approx 4,3597\text{ aJ}$, ou $1\text{ aJ} \approx (1/4,3597)E_h$ (Secção 3.9.1, p. 99), e portanto a energia de excitação é dada em unidades **atômicas** por

$$\Delta E \approx (6,269 \times 10^{-2}/4,3597)E_h \approx 1,4379 \times 10^{-2}E_h$$

Finalmente, a energia de excitação molar é dada por

$$\Delta E_m = N_A \Delta E \approx (6,022 \times 10^{23}\text{ mol}^{-1})(6,269 \times 10^{-2}\text{ aJ}) \approx 37,75\text{ kJ mol}^{-1}$$

Uma vez que $1\text{ kcal} := 4,184\text{ kJ}$, ou $1\text{ kJ} := (1/4,184)\text{ kcal}$,

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

Na transformação de ΔE para ΔE_m , o coeficiente N_A não é um número, portanto tem uma dimensão diferente da unitária. Também neste exemplo, o coeficiente de transformação necessário poderia ter sido diretamente obtido da tabela apresentada no final deste manual.

Exemplo 4. A condutividade molar, Λ , de um eletrólito é definida pela equação

$$\Lambda = \kappa/c$$

onde κ é condutividade da solução eletrolítica corrigida pela condutividade do solvente puro e c é a concentração do eletrólito. A condutividade de eletrólitos é usualmente expressa em S cm^{-1} e a concentração em mol dm^{-3} ; por exemplo, $\kappa(\text{KCl}) \approx 7,39 \times 10^{-5}\text{ S cm}^{-1}$ para $c(\text{KCl}) \approx 0,000\ 500\text{ mol dm}^{-3}$. A condutividade molar pode ser calculada do seguinte modo

$$\Lambda \approx (7,39 \times 10^{-5}\text{ S cm}^{-1})/(0,000\ 500\text{ mol dm}^{-3}) \approx 0,1478\text{ S mol}^{-1}\text{ cm}^{-1}\text{ dm}^3 = 147,8\text{ S mol}^{-1}\text{ cm}^2$$

dado que $1\text{ dm}^3 = 1000\text{ cm}^3$. A relação acima descrita aparece frequentemente escrita na seguinte forma não recomendada

$$\Lambda = 1000\ \kappa/c$$

Contudo, nesta forma, os símbolos *não* representam grandezas físicas, mas sim os *valores numéricos* de grandezas físicas expressas em certas unidades. Em particular, a última equação está correta somente se Λ for o valor numérico da condutividade molar em $\text{S mol}^{-1}\text{ cm}^2$, κ o valor numérico da condutividade em S cm^{-1} , e c o valor numérico da concentração em mol dm^{-3} . Esta forma não segue as regras da álgebra de grandezas, devendo, portanto, ser evitada. A equação $\Lambda = \kappa/c$, na qual os símbolos representam grandezas físicas, está correta quaisquer que sejam as unidades. Se houver a necessidade de escrever a relação entre os valores numéricos, então ela deve ser escrita da seguinte forma

$$\Lambda/(\text{S mol}^{-1}\text{ cm}^2) = \frac{1000\ \kappa/(\text{S cm}^{-1})}{c/(\text{mol dm}^{-3})}$$

Exemplo 5. Uma solução constituída por 0,125 mol do soluto B em $m_S \approx 953$ g do solvente S apresenta molalidade b_B definida por (vide também a nota de rodapé¹⁴, abaixo)

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

A fração da quantidade do soluto pode ser descrita, por aproximação, como

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

onde se assume que $n_B \ll n_S$.

Se o solvente é água, cuja massa molar é 18,015 g mol⁻¹, então

$$x_B \approx (0,131 \text{ mol kg}^{-1}) (18,015 \text{ g mol}^{-1}) \approx 2,36 \text{ g/kg} = 0,002\ 36$$

Estas equações são, por vezes, citadas na seguinte forma obsoleta, $b_B = 1000 n_B/M_S$, e $x_B \approx b_B M_S/1000$. Contudo, este não é um uso correto da álgebra de grandezas porque, nesta forma, os símbolos denotam os *valores numéricos* das grandezas físicas em unidades particulares; em particular, assume-se que b_B , m_S e M_S denotam valores numéricos em mol kg⁻¹, g, e g mol⁻¹, respectivamente. Um modo correto de escrever a segunda equação seria, por exemplo,

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

Exemplo 6. Para materiais paramagnéticos, a susceptibilidade magnética pode ser medida experimentalmente e usada para prover informação sobre o momento dipolar magnético molecular e, portanto, sobre a estrutura eletrônica das moléculas no material. A contribuição paramagnética para a susceptibilidade magnética molar de um material, χ_m , está relacionada com o momento dipolar magnético molecular m através da relação de Curie

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

Nos antigos sistemas não racionalizados esu, emu, e gaussiano (vide Secção 7.3, p. 149), esta equação tem a seguinte forma

$$\chi_m^{(\text{ir})} = \chi^{(\text{ir})} V_m = N_A m^2 / 3kT$$

Resolvendo em relação a m , e expressando o resultado em termos do magnéton de Bohr μ_B , obtém-se no SIG(SI)

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

e, nos sistemas não racionalizados emu e gaussiano,

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

Finalmente, usando os valores das constantes físicas fundamentais μ_B , k , μ_0 , e N_A dados no Capítulo 5, p. 115, obtém-se

$$m/\mu_B \approx 0,7977 [\chi_m / (\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1})]^{1/2} [T/\text{K}]^{1/2} \approx 2,828 [\chi_m^{(\text{ir})} / (\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1})]^{1/2} [T/\text{K}]^{1/2}$$

Estas expressões são convenientes para cálculos práticos. Contudo, o resultado final tem sido expresso na forma não recomendada

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

onde, contrariamente às convenções da álgebra de grandezas, se assume que χ_m e T denotam os *valores numéricos* da susceptibilidade molar e da temperatura nas unidades cm³ mol⁻¹ e K, respectivamente, e onde também se assume (mas raramente se afirma) que a susceptibilidade é definida usando as equações eletromagnéticas definidas no contexto dos sistemas não racionalizados (vide Secção 7.3, p. 149).

¹⁴ Usa-se b_B por causa da possível confusão de notação quando se usa m_B para denotar molalidade, e m_S para denotar a massa de S. Contudo, é frequente o símbolo m_B ser usado para denotar molalidade (vide Secção 2.10, nota 14, p. 52).

Exemplo 7. A unidade esu ou gaussiana da carga elétrica é $\sqrt{\text{erg cm}}$. Alternativamente, o franklin (Fr) é usado para representar $\sqrt{\text{erg cm}}$ (vide Secção 7.3, p. 149). Para a definição da unidade franklin, estabelece-se que duas partículas, cada uma tendo uma carga elétrica de um franklin e separadas de uma distância de um centímetro, se repelem com uma força de uma/um dina (*Port.:dine*). Para se obter um fator de conversão para a unidade SI coulomb, é necessário indagar que cargas produziriam a mesma força em unidades SI à mesma distância. Assim, tem-se que

$$1 \text{ dyn} = 1 \text{ cm g s}^{-2} = 10^{-5} \text{ N} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q^2}{(10^{-2} \text{ m})^2}$$

Donde segue (vide Secção 7.3, p. 149) que

$$Q^2 = 4\pi\epsilon_0 \times 10^{-9} \text{ N m}^2 = \mu_0\epsilon_0 \times 10^{-2} \text{ A}^2 \text{ m}^2 = c_0^{-2} \times 10^{-2} \text{ A}^2 \text{ m}^2$$

e, portanto

$$Q = \frac{1}{10 c_0} \text{ A m} = \frac{10}{\zeta} \text{ C}$$

onde ζ é o número exato $\zeta = c_0/(\text{cm s}^{-1}) = 29\,979\,245\,800$ (vide Secções 7.2 e 7.3, p. 141 e 149). Assim, $1 \text{ Fr} = 1/(2,997\,924\,58 \times 10^9) \text{ C}$.

Exemplo 8. A unidade esu ou gaussiana da intensidade do campo elétrico é $\sqrt{\text{erg cm}} \text{ cm}^{-2}$ ou, alternativamente, Fr cm^{-2} . Da análise da relação entre franklin e coulomb, acima mencionada, resulta que $1 \text{ Fr cm}^{-2} = (10^5/\zeta) \text{ C m}^{-2}$. No entanto, C m^{-2} não é a unidade de intensidade do campo elétrico no SI. Para se obter o fator de conversão para a intensidade do campo elétrico no SI, é necessário considerar que

$$1 \frac{\text{Fr}}{\text{cm}^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \times \frac{10^5}{\zeta} \frac{\text{C}}{\text{m}^2}$$

Do Exemplo 7, tem-se que $4\pi\epsilon_0 \times 10^{-9} \text{ N m}^2 = (10/\zeta)^2 \text{ C}^2$; portanto

$$\frac{10^5}{4\pi\epsilon_0\zeta} \frac{\text{C}}{\text{m}^2} = \zeta \times 10^{-6} \frac{\text{N}}{\text{C}}$$

Conclui-se então que $1 \text{ Fr cm}^{-2} = \zeta \times 10^{-6} \text{ V m}^{-1}$.

Exemplo 9. A unidade esu ou gaussiana da polarizabilidade é cm^3 ; num sistema de cargas com polarizabilidade de 1 cm^3 , um campo de 1 Fr/cm^2 produz um momento dipolar de 1 Fr cm (vide Secção 7.3, p. 149). O valor correspondente desta polarizabilidade no SI é obtido da seguinte forma:

$$1 \text{ cm}^3 = \frac{p}{E} = \frac{(10/\zeta) \text{ C} 10^{-2} \text{ m}}{\zeta 10^{-6} \text{ V m}^{-1}} = \zeta^{-2} 10^5 \text{ m}^2 \text{ C V}^{-1}$$

Portanto, com base na definição do volt, tem-se que $1 \text{ cm}^3 = (10^5/\zeta^2) \text{ m}^2 \text{ C}^2 \text{ J}^{-1}$. Numa primeira aproximação, esta equação parece estranha, pois não facilita qualquer relação geral entre um volume de 1 cm^3 e outras unidades do SI. Ao contrário, ela indica que uma polarizabilidade com um valor de 1 cm^3 no sistema esu ou gaussiano corresponde ao valor de $(10^5/\zeta^2) \text{ m}^2 \text{ C}^2 \text{ J}^{-1}$ no SI.

7.2 Tabelas de conversão para unidades

Na tabela abaixo, encontram-se fornecidos os fatores de conversão de uma variedade de unidades para as correspondentes unidades SI. Exemplos do uso desta tabela encontram-se descritos na seção anterior. Para cada grandeza física, lista-se o nome, seguido do(s) símbolo(s) recomendado(s). Em seguida é fornecida a unidade SI, seguida de unidades esu, emu, gaussiana, **atômica** (ua), e outras unidades de uso habitual, com os seus fatores de conversão para as unidades SI, e outras. A constante ζ , que ocorre em alguns fatores de conversão eletromagnéticos, é o número exato $29\ 979\ 245\ 800 = c_0/(cm\ s^{-1})$.

A inclusão nesta tabela de unidades que não são do SI não deve ser entendida como uma sugestão de encorajamento ao seu uso. Com algumas exceções, as unidades SI devem ser sempre preferencialmente usadas. Contudo, uma vez que muitas das unidades abaixo descritas surgem por vezes na literatura científica, é conveniente explicitar as suas relações com as do SI.

Por conveniência, as unidades nos sistemas esu, emu e gaussiano são citadas em termos das quatro dimensões *comprimento*, *massa*, *tempo* e *carga elétrica*, incluindo o franklin (Fr) como a unidade eletrostática de carga e o biot (Bi) como a unidade eletromagnética de corrente. Isto permite associar a cada grandeza física as mesmas dimensões em todos os sistemas, de modo que todos os fatores de conversão sejam números. Os fatores $4\pi\epsilon_0 = k_{es}^{-1}$ e Fr podem ser eliminados escrevendo-se que $Fr = erg^{1/2} cm^{1/2} = cm^{3/2} g^{1/2} s^{-1}$, e $k_{es} = 1\ Fr^{-2}\ erg\ cm = 1$, para recuperar expressões do esu baseadas em unidades de base (vide Secção 7.3, p. 149). O símbolo Fr deve ser considerado como um símbolo para a unidade eletrostática de carga. Da mesma forma, o fator $\mu_0/4\pi = k_{em}$ e o Bi podem ser eliminados usando-se $Bi = dyn^{1/2} = cm^{1/2} g^{1/2} s^{-1}$, e $k_{em} = dyn\ Bi^{-2} = 1$, para recuperar expressões do emu em termos das três unidades de base.

A tabela deve ser interpretada da seguinte forma: tome-se como exemplo o fermi, como uma unidade de comprimento, tal que $f = 10^{-15} m$; isto significa que na especificação de um comprimento de 13,1 f se pode substituir o símbolo f por $10^{-15} m$, indicando que o comprimento tem o valor de $13,1 \times 10^{-15} m$. Um exemplo mais difícil envolve, por exemplo, a polarizabilidade α . Quando α é igual a $17,8\ cm^3$ no sistema gaussiano, o valor correspondente no SI é igual a $(17,8 \times 10^5/\zeta^2)\ m^2\ C^2\ J^{-1} \approx 3,53 \times 10^{-9}\ m^2\ C^2\ J^{-1}$. Isto é, o símbolo cm^3 pode ser substituído pela expressão $(10^5/\zeta^2)\ m^2\ C^2\ J^{-1}$ para se obter o valor da polarizabilidade no SI (vide também Exemplo 9 na Secção 7.1, p. 140). Os fatores de conversão são fornecidos com valores exatos (quando o sinal = é usado; se é uma definição, usa-se o sinal :=), ou com os valores aproximados com que as correspondentes constantes físicas são conhecidas (neste caso usa-se o sinal \approx). No último caso, a magnitude da incerteza é sempre menor que 5 no último dígito citado, isto se a incerteza não for indicada explicitamente.

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Expresso(a) em unidades SI</i>	<i>Notas</i>
<i>comprimento, l</i>			
metro (unidade SI)	m		
centímetro (unidade CGS)	cm	$= 10^{-2} m$	
bohr (ua)	a_0	$= 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2 \approx 5,291\ 772\ 1067(12) \times 10^{-11} m$	
angstrom	Å	$= 10^{-10} m$	
micron	μ	$= 1\ \mu m = 10^{-6} m$	
milimicron	$m\mu$	$= 1\ nm = 10^{-9} m$	
unidade x	X	$\approx 1,002 \times 10^{-13} m$	
fermi	f	$= 1\ fm = 10^{-15} m$	
polegada	in	$= 2,54 \times 10^{-2} m$	
pé	ft	$= 12\ in = 0,3048\ m$	
jarda	yd	$= 3\ ft = 0,9144\ m$	
milha	mi	$= 1760\ yd = 1609,344\ m$	
milha náutica		$= 1852\ m$	

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Expresso(a) em unidades SI</i>	<i>Notas</i>
<i>comprimento, l</i> (em continuação)			
unidade astronômica	ua	$:= 1,495\ 978\ 707\ 00 \times 10^{11} \text{ m}$	
parsec	pc	$\approx 3,085\ 6776 \times 10^{16} \text{ m}$	
ano-luz	l.y.	$\approx 9,460\ 730 \times 10^{15} \text{ m}$	1
segundo-luz		$= 299\ 792\ 458 \text{ m}$	
<i>área, A</i>			
metro quadrado (unidade SI)	m^2		
barn	b	$= 10^{-28} \text{ m}^2$	
acre		$\approx 4046,856 \text{ m}^2$	
are	a	$= 100 \text{ m}^2$	
hectare	ha	$= 10^4 \text{ m}^2$	
<i>volume, V</i>			
metro cúbico (unidade SI)	m^3		
litro	l, L	$= 1 \text{ dm}^3 = 10^{-3} \text{ m}^3$	2
lambda	λ	$= 10^{-6} \text{ dm}^3 [= 1 \text{ ml}]$	
barril (US)		$= 158,9873 \text{ dm}^3$	
galão (US)	gal (US)	$= 3,785\ 412 \text{ dm}^3$	
galão (UK)	gal (UK)	$= 4,546\ 09 \text{ dm}^3$	
<i>ângulo plano, α</i>			
radiano (unidade SI)	rad		
grau	$^\circ$	$= (\pi/180) \text{ rad} \approx (1/57,295\ 78) \text{ rad}$	
minuto	'	$= (\pi/10\ 800) \text{ rad} [= (1/60)^\circ]$	
segundo	"	$= (\pi/648\ 000) \text{ rad} [= (1/3600)^\circ]$	
gon	gon	$= (\pi/200) \text{ rad} \approx (1/63,661\ 98) \text{ rad}$	
<i>massa, m</i>			
kilograma/quilograma (unidade SI)	kg		
grama (unidade CGS)	g	$= 10^{-3} \text{ kg}$	
massa do elétron (ua)	m_e	$\approx 9,109\ 383\ 56(11) \times 10^{-31} \text{ kg}$	
dalton, unidade de massa atômica unificada	Da, u	$:= m_a(^{12}\text{C})/12$ $\approx 1,660\ 539\ 040(20) \times 10^{-27} \text{ kg}$	
gama	γ	$= 1 \text{ mg}$	
tonelada (tonelada métrica)	t	$= 1 \text{ Mg} = 10^3 \text{ kg}$	
libra (avoirdupois)	lb	$= 0,453\ 592\ 37 \text{ kg}$	
libra (libra métrica)		$= 0,5 \text{ kg}$	
onça (avoirdupois)	oz	$= 28,349\ 52 \text{ g}$	
onça (troy)	oz (troy)	$= 31,103\ 48 \text{ g}$	
grão	gr	$= 64,798\ 91 \text{ mg}$	

(1) Este valor refere-se ao ano juliano ($1 \text{ a} = 365,25 \text{ d}$, $1 \text{ d} = 86\ 400 \text{ s}$) [157]. De acordo com as regras de sintaxe da Secção 1.3, p. 4, l.y. não é um símbolo, mas uma abreviação usada frequentemente.

(2) A ISO e a IEC usam somente a letra minúscula l para o litro.

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Expresso(a) em unidades SI</i>	<i>Notas</i>
<i>tempo, t</i>			
segundo (unidade SI e CGS)	s		
ua de tempo	\hbar/E_h	$\approx 2,418\ 884\ 326\ 509(14)\times 10^{-17}$ s	
minuto	min	= 60 s	
hora	h	= 3600 s	
dia	d	= 24 h = 86 400 s	3
ano	a	$\approx 31\ 556\ 952$ s	4
svedberg	Sv	$= 10^{-13}$ s	
<i>aceleração, a</i>			
unidade SI	m s^{-2}		
aceleração da gravidade padrão	g_n	= 9,806 65 m s^{-2}	
gal (unidade CGS)	Gal	$= 10^{-2}$ m s^{-2}	
<i>força, F</i>			
newton (unidade SI)	N	$= 1 \text{ kg m s}^{-2}$	5
dina (unidade CGS)	dyn	$= 1 \text{ g cm s}^{-2} = 10^{-5}$ N	
ua de força	E_h/a_0	$\approx 8,238\ 723\ 36(10)\times 10^{-8}$ N	
kilograma-força, kilolibra (quilograma-força, quilolibra)	kgf = kp	= 9,806 65 N	
<i>energia, E, U</i>			
joule (unidade SI)	J	$= 1 \text{ kg m}^2 \text{s}^{-2}$	
erg (unidade CGS)	erg	$= 1 \text{ g cm}^2 \text{s}^{-2} = 10^{-7}$ J	
hartree (ua)	E_h	$= \hbar^2/m_e a_0^2 \approx 4,359\ 744\ 650(54)\times 10^{-18}$ J	
rydberg	Ry	$= E_h/2 \approx 2,179\ 872\ 325(27)\times 10^{-18}$ J	
elétron-volt	eV	$= e \cdot 1 \text{ V} \approx 1,602\ 176\ 6208(98)\times 10^{-19}$ J	
caloria, termoquímica	cal _{th}	= 4,184 J	
caloria, internacional	cal _{IT}	= 4,1868 J	
caloria a 15 °C	cal ₁₅	$\approx 4,1855$ J	
litro atmosfera	L atm	= 101,325 J	
unidade térmica britânica	Btu	= 1055,06 J	

(3) Note que o dia **astronômico** não é definido exatamente em termos do segundo, pois os assim chamados segundos bissextos são bianualmente adicionados, ou subtraídos, aos do dia para manter a ocorrência média anual da meia-noite às 24:00:00. Contudo, na referência [3] a hora e o dia são definidos em termos do segundo, como indicado.

(4) O ano não é comensurável com o dia e não é uma constante. Antes de 1967, quando o padrão **atômico** foi introduzido, o ano tropical 1900 servia como a base do segundo. Para a época 1900,0, o ano tropical equivalia a 365,242 198 79 d $\approx 31\ 556\ 925,98$ s, diminuindo 0,530 s por século. Os anos do calendário são definidos exatamente em termos do dia: o ano **juliano** é igual a 365,25 d; o ano **gregoriano** é igual a 365,2425 d; o ano **maia** é igual a 365,2420 d. A definição na tabela corresponde ao ano gregoriano. Este é uma média baseada no ano com uma duração de 365 d, com anos bissextos de 366 d; são considerados anos bissextos *quer* quando o ano é divisível por 4 mas não é divisível por 100, *quer* quando o ano é divisível por 400. Se o ano 3200 deve ser um ano bissexto ainda está por decidir, mas tal não necessita ser resolvido até meados do século XXXII. Para a conversão pode-se, em geral, usar a seguinte aproximação: $1 \approx 3,1557 \times 10^7$ s. Caso seja necessário considerar uma definição mais exata, esta deve ser dada através da explicitação precisa do ano usado.

(5) 1 N é aproximadamente a força exercida pela Terra sobre uma maçã.

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Expresso(a) em unidades SI</i>	<i>Notas</i>
<i>pressão, p</i>			
pascal (unidade SI)	Pa	= 1 N m ⁻² = 1 kg m ⁻¹ s ⁻²	
atmosfera padrão	atm	= 101 325 Pa	
bar	bar	= 10 ⁵ Pa	
torr	Torr	= (101 325/760) Pa ≈ 133,322 Pa	
milímetro de mercúrio convencional	mmHg	= 13,5951 × 980,665 × 10 ⁻² Pa ≈ 133,322 Pa	
libras por polegada quadrada	psi	≈ 6,894 758 × 10 ³ Pa	
<i>potência, P</i>			
watt (unidade SI)	W	= 1 kg m ² s ⁻³	
cavalo-força imperial	hp	≈ 745,7 W	
cavalo-força métrico	hk	= 735,498 75 W	
<i>ação, momento angular, L, J</i>			
unidade SI	J s	= 1 kg m ² s ⁻¹	
unidade CGS	erg s	= 10 ⁻⁷ J s	
ua de ação	ħ	:= h/2p ≈ 1,054 571 628(53) × 10 ⁻³⁴ J s	
<i>viscosidade dinâmica, η</i>			
unidade SI	Pa s	= 1 kg m ⁻¹ s ⁻¹	
poise (unidade CGS)	P	= 10 ⁻¹ Pa s	
centipoise	cP	= 1 mPa s	
<i>viscosidade cinemática, ν</i>			
unidade SI	m ² s ⁻¹		
stokes (unidade CGS)	St	= 10 ⁻⁴ m ² s ⁻¹	
<i>temperatura termodinâmica, T</i>			
kelvin (unidade SI)	K		
grau Rankine	°R	= (5/9) K	6
<i>temperatura Celsius, t</i>			
grau Celsius (unidade SI)	°C	= 1 K	6
<i>entropia, S</i>			
<i>capacidade calorífica, C</i>			
unidade SI	J K ⁻¹		
clausius	Cl	= 4,184 J K ⁻¹ [= 1 cal _{th} K ⁻¹]	

(6) $T/{}^{\circ}\text{R} = (9/5)T/\text{K}$. Além disso, a temperatura Celsius t relaciona-se com a temperatura termodinâmica T através da equação

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

Similarmente, a temperatura Fahrenheit t_{F} é relacionada à temperatura Celsius t pela equação

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

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Expresso(a) em unidades SI</i>	<i>Notas</i>
<i>entropia molar, S_m</i>			
<i>capacidade calorífica molar, C_m</i>			
unidade SI	$J K^{-1} mol^{-1}$	$= 1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2} K^{-1} mol^{-1}$	
unidade de entropia		$= 4,184 J K^{-1} mol^{-1} =$ $[1 \text{ cal}_{\text{th}} K^{-1} mol^{-1}]$	
<i>volume molar, V_m</i>			
unidade SI	$m^3 mol^{-1}$		
amagat		$:= V_m$ de um gás real a 1 atm e $273,15 \text{ K} \approx 22,4 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$	
<i>densidade de quantidade, $1/V_m$</i>			
unidade SI	$mol m^{-3}$		
amagat recíproco		$:= 1/V_m$ de um gás real a 1 atm e $273,15 \text{ K} \approx 44,6 \text{ mol m}^{-3}$	7
<i>actividade, A</i>			
becquerel (unidade SI)	Bq	$= 1 \text{ s}^{-1}$	
curie	Ci	$= 3,7 \times 10^{10} \text{ Bq}$	
<i>dose absorvida de radiação, D</i>			8
gray (unidade SI)	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 (unidade SI)	Sv	$= 1 \text{ J kg}^{-1} = 1 \text{ m}^2 \text{ s}^{-2}$	
rem	rem	$= 0,01 \text{ Sv}$	9
<i>corrente elétrica, I</i>			
ampere (unidade SI)	A		
esu, gaussiana	$Fr s^{-1}$	$:= (10/\zeta)A \approx 3,335 \times 10^{-10} \text{ A}$	10
biot (emu)	Bi	$= 10 \text{ A}$	
ua	eE_h/\hbar	$\approx 6,623 \times 10^{-3} \text{ A}$	
<i>carga elétrica, Q</i>			
coulomb (unidade SI)	C	$= 1 \text{ A s}$	
franklin (esu, gaussiana)	Fr	$:= (10/\zeta)C \approx 3,335 \times 10^{-10} \text{ C}$	10
emu (abcoulomb)	Bi s	$= 10 \text{ C}$	
carga do próton (ua)	e	$\approx 1,602 \times 10^{-19} \text{ C} \approx 4,803 \times 10^{-10} \text{ Fr}$	

(7) Infelizmente, o nome “amagat” é frequentemente usado como uma unidade tanto para o volume molar como para a densidade de quantidade. O seu valor é ligeiramente diferente para gases diferentes, refletindo o desvio do comportamento ideal para o gás em questão.

(8) A unidade roentgen, R, é usada para expressar uma exposição à radiação X ou γ .
 $1 \text{ R} = 2,58 \times 10^{-4} \text{ C kg}^{-1}$.

(9) rem significa roentgen equivalente homem.

(10) ζ é o número exato $\zeta = c_0/(\text{cm s}^{-1}) = 29\ 979\ 245\ 800$.

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Expresso(a) em unidades SI</i>	<i>Notas</i>
<i>densidade de carga, ρ</i>			
unidade SI	$C\ m^{-3}$	$= 1\ A\ s\ m^{-3}$	
esu, gaussiana	$Fr\ cm^{-3}$	$:= (10^7/\zeta)\ C\ m^{-3} \approx$	10
ua	ea_0^{-3}	$3,335\ 640\ 952 \times 10^{-4}\ C\ m^{-3}$	
		$\approx 1,081\ 202\ 3770(67) \times 10^{12}\ C\ m^{-3}$	
<i>potencial elétrico, V, ϕ</i>			
<i>tensão elétrica, U</i>			
volt (unidade SI)	V	$= 1\ J\ C^{-1} = 1\ kg\ m^2\ s^{-3}\ A^{-1}$	
esu, gaussiana	$Fr\ cm^{-1}$	$= \zeta \times 10^{-8}\ V = 299,792\ 458\ V$	10
“ cm^{-1} ”	$e\ cm^{-1}/4\pi\varepsilon_0$	$\approx 1,439\ 964\ 41(36) \times 10^{-7}\ V$	11
ua	$e/4\pi\varepsilon_0 a_0$	$= E_h/e \approx 27,211\ 383\ 02(17)\ V$	
volt internacional médio		$= 1,000\ 34\ V$	
volt internacional (EUA)		$= 1,000\ 330\ V$	
<i>resistência elétrica, R</i>			
ohm (unidade SI)	Ω	$= 1\ V\ A^{-1} = 1\ m^2\ kg\ s^{-3}\ A^{-2}$	
ohm internacional médio		$= 1,000\ 49\ \Omega$	
ohm internacional (EUA)		$= 1,000\ 495\ \Omega$	
gaussiana	$s\ cm^{-1}$	$= \zeta^2 \times 10^{-9}\ \Omega \approx 8,987\ 551\ 787 \times 10^{11}\ \Omega$	10
<i>condutividade, κ, σ</i>			
unidade SI	$S\ m^{-1}$	$= 1\ kg^{-1}\ m^{-3}\ s^3\ A^2$	
gaussiana	s^{-1}	$= (10^{11}/\zeta^2)\ S\ m^{-1} \approx$	10
		$1,112\ 650\ 056 \times 10^{-10}\ S\ m^{-1}$	
<i>capacitância, C</i>			
farad (unidade SI)	F	$= 1\ kg^{-1}\ m^{-2}\ s^4\ A^2$	
gaussiana	cm	$:= (10^9/\zeta^2)\ F \approx 1,112\ 650\ 056 \times 10^{-12}\ F$	10
<i>intensidade do campo elétrico, E</i>			
unidade SI	$V\ m^{-1}$	$= 1\ J\ C^{-1}\ m^{-1} = 1\ kg\ m\ s^{-3}\ A^{-1}$	
esu, gaussiana	$Fr^{-1}\ cm^{-2}$	$:= \zeta \times 10^{-6}\ V\ m^{-1} =$	10
“ cm^{-2} ”	$e\ cm^{-2}/4\pi\varepsilon_0$	$2,997\ 924\ 58 \times 10^4\ V\ m^{-1}$	
ua	$e/4\pi\varepsilon_0 a_0^2$	$\approx 1,439\ 964\ 41(36) \times 10^{-5}\ V\ m^{-1}$	11
		$= E_h/ea_0 \approx$	
		$5,142\ 206\ 707(32) \times 10^{11}\ V\ m^{-1}$	
<i>gradiente do campo elétrico, $E'_{\alpha\beta}$, $q_{\alpha\beta}$</i>			
unidade SI	$V\ m^{-2}$	$= 1\ J\ C^{-1}\ m^{-2} = 1\ kg\ s^{-3}\ A^{-1}$	
esu, gaussiana	$Fr^{-1}\ cm^{-3}$	$:= \zeta \times 10^{-4}\ V\ m^{-2} =$	10
“ cm^{-3} ”	$e\ cm^{-3}/4\pi\varepsilon_0$	$2,997\ 924\ 58 \times 10^6\ V\ m^{-2}$	
ua	$e/4\pi\varepsilon_0 a_0^3$	$\approx 1,439\ 964\ 41(36) \times 10^{-3}\ V\ m^{-2}$	11
		$= E_h/ea_0^2 \approx$	
		$9,717\ 362\ 356(60) \times 10^{21}\ V\ m^{-2}$	

(11) As unidades entre aspas podem ser encontradas na literatura, mas de um ponto de vista estrito, são incorretas; na coluna *Símbolo* define-se a unidade em termos de grandezas físicas e outras unidades, de modo que, para uma conversão para o SI, basta substituir as grandezas físicas pelos seus valores no SI e, consequentemente, interpretar as unidades como sendo do SI.

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Expresso(a) em unidades SI</i>	<i>Notas</i>
<i>momento dipolar elétrico, p, μ</i>			
unidade SI	C m	$= 1 \text{ A s m}$	
esu, gaussiana	Fr cm	$:= (10^{-1}/\zeta) \text{ C m} \approx 3,335\ 640\ 952 \times 10^{-12} \text{ C m}$	10
debye	D	$= 10^{-18} \text{ Fr cm} \approx 3,335\ 640\ 952 \times 10^{-30} \text{ C m}$	
“cm”, comprimento do dipolo ua	$e \text{ cm}$ ea_0	$\approx 1,602\ 176\ 487(40) \times 10^{-21} \text{ C m}$ $\approx 8,478\ 353\ 552(52) \times 10^{-30} \text{ C m}$	11
<i>momento quadrupolar elétrico, $Q_{\alpha\beta}$, $\Theta_{\alpha\beta}$, eQ</i>			
unidade SI	C m^2	$= 1 \text{ A s m}^2$	
esu, gaussiana	Fr cm^2	$:= (10^{-3}/\zeta) \text{ C m}^2 \approx 3,335\ 640\ 952 \times 10^{-14} \text{ C m}^2$	10
“cm ² ”, área do quadrupolo ua	$e \text{ cm}^2$ ea_0^2	$\approx 1,602\ 176\ 487(40) \times 10^{-23} \text{ C m}^2$ $\approx 4,486\ 551\ 484(28) \times 10^{-40} \text{ C m}^2$	11
<i>polarizabilidade, α</i>			
unidade SI	$\text{J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^2$	$= 1 \text{ F m}^2 = 1 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^4 \text{ A}^2$	
esu, gaussiana	$\text{Fr}^2 \text{ cm}^3$	$:= (10^5/\zeta^2) \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^2 \approx 1,112\ 650\ 056 \times 10^{-16} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^2$	10
“cm ³ ”, volume de polarizabilidade	$4\pi\varepsilon_0 \text{ cm}^3$	$\approx 1,112\ 650\ 056 \times 10^{-16} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^2$	11
“Å ³ ” ua	$4\pi\varepsilon_0 \text{ Å}^3$ $4\pi\varepsilon_0 a_0^3$	$\approx 1,112\ 650\ 056 \times 10^{-40} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^2$ $= e^2 a_0^2 / E_h \approx 1,648\ 777\ 2731(11) \times 10^{-41} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^2$	11
<i>deslocamento elétrico, D</i>			12
<i>polarização (volumétrica), P</i>			
unidade SI	C m^{-2}	$= 1 \text{ A s m}^{-2}$	
esu, gaussiana	Fr cm^{-2}	$:= (10^5/\zeta) \text{ C m}^{-2} \approx 3,335\ 640\ 952 \times 10^{-6} \text{ C m}^{-2}$	10
<i>densidade de fluxo magnético, B</i> (campo magnético)			
tesla (unidade SI)	T	$= 1 \text{ J A}^{-1} \text{ m}^{-2} = 1 \text{ V s m}^{-2}$ $= 1 \text{ Wb m}^{-2}$	
gauss (emu, gaussiana)	G	$= 10^{-4} \text{ T}$	
ua	\hbar/ea_0^2	$\approx 2,350\ 517\ 550(14) \times 10^5 \text{ T}$	
<i>fluxo magnético, Φ</i>			
weber (unidade SI)	Wb	$= 1 \text{ J A}^{-1} = 1 \text{ V s} = 1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2} \text{ A}^{-1}$	
maxwell (emu, gaussiana)	Mx	$= 10^{-8} \text{ Wb} [= 1 \text{ G cm}^2]$	

(12) O uso da unidade esu ou gaussiana para o deslocamento elétrico implica, normalmente, que o que é citado é o deslocamento não racionalizado, $D^{(\text{ir})} = 4\pi D$ (vide Secção 7.3, p. 149).

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Expresso(a) em unidades SI</i>	<i>Notas</i>
<i>intensidade de campo magnético, H</i>			
unidade SI oersted (emu, gaussiana)	A m^{-1} Oe	$= (10^3/4\pi) \text{ A m}^{-1}$	13
<i>magnetização volumétrica, M</i>			
unidade SI gauss (emu, gaussiana)	A m^{-1} G	$= 10^3 \text{ A m}^{-1}$	13
<i>momento dipolar magnético, m, μ</i>			
unidade SI emu, gaussiana magnéton de Bohr	J T^{-1} erg G^{-1} μ_B	$= 1 \text{ A m}^2$ $= 10 \text{ A cm}^2 = 10^{-3} \text{ J T}^{-1}$ $:= e\hbar/2m_e \approx 9,274\ 009\ 994(57) \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$	14
ua magnéton nuclear	$e\hbar/m_e$ μ_N	$:= 2\mu_B \approx 1,854\ 801\ 999(11) \times 10^{-23} \text{ J T}^{-1}$ $:= (m_e/m_p)\mu_B \approx 5,050\ 783\ 699(31) \times 10^{-27} \text{ J T}^{-1}$	
<i>magnetizabilidade, ξ</i>			
unidade SI gaussiana ua	J T^{-2} erg G^{-2} $e^2 a_0^2 / m_e$	$= 1 \text{ A}^2 \text{ s}^2 \text{ m}^2 \text{ kg}^{-1}$ $= 10 \text{ J T}^{-2}$ $\approx 7,891\ 036\ 5886(90) \times 10^{-29} \text{ J T}^{-2}$	
<i>susceptibilidade magnética, χ, κ</i>			
unidade SI emu, gaussian	1 1		15
<i>susceptibilidade magnética molar, χ_m</i>			
unidade SI emu, gaussiana	$\text{m}^3 \text{ mol}^{-1}$ $\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1}$	$= 10^{-6} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$	16
<i>indutância, autoindutância, L</i>			
henry (unidade SI) gaussiana emu	H $\text{s}^2 \text{ cm}^{-1}$ cm	$= 1 \text{ V s A}^{-1} = 1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2} \text{ A}^{-2}$ $= \zeta^2 \times 10^{-9} \text{ H}$ $\approx 8,987\ 551\ 787 \times 10^{11} \text{ H}$ $= 10^{-9} \text{ H}$	10

(13) Na prática, o oersted, Oe, é apenas usado como uma unidade para $H^{(\text{ir})} = 4\pi H$; isto é quando $H^{(\text{ir})} = 1 \text{ Oe}$, $H = (10^3/4\pi) \text{ A m}^{-1}$ (vide Secção 7.3, p. 149). No sistema gaussiano ou emu, gauss e oersted são unidades equivalentes.

(14) Às vezes o **magnéton** de Bohr μ_B é denotado por BM (ou B.M.), mas isto não é recomendado.

(15) Na prática, susceptibilidades citadas no contexto de unidades emu ou gaussianas são sempre valores para $\chi^{(\text{ir})} = \chi/4\pi$; assim, quando $\chi^{(\text{ir})} = 10^{-6}$, então $\chi = 4\pi \times 10^{-6}$ (vide Secção 7.3, p. 149).

(16) Na prática, as unidades $\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ implicam normalmente que se está citando a susceptibilidade molar não racionalizada $\chi_m^{(\text{ir})} = \chi_m/4\pi$; assim, por exemplo, se $\chi_m^{(\text{ir})} = -15 \times 10^{-6} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$, que muitas vezes é escrita como “-15 cgs ppm”, então $\chi_m = -1,88 \times 10^{-10} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$ (vide Secção 7.3, p. 149).

7.3 Os sistemas de unidades ESU, EMU, gaussiano e atômicas em relação ao SI

As equações do SIG (vide Secção 1.2, p. 4) da teoria eletromagnética são normalmente usadas com as grandezas físicas em unidades SI, em especial as quatro unidades de base metro (m), kilograma (kg), segundo (s) e ampere (A), para comprimento, massa, tempo e corrente elétrica, respectivamente. As equações fundamentais para a força eletrostática \mathbf{F}_{es} entre partículas com cargas Q_1 e Q_2 no vácuo, e para a força eletromagnética infinitesimal $d^2\mathbf{F}_{\text{em}}$ entre elementos condutores de comprimento dl_1 e dl_2 e correspondentes correntes I_1 e I_2 no vácuo, são

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_{\text{es}} &= Q_1 Q_2 \mathbf{r} / 4\pi\epsilon_0 r^3 \\ d^2\mathbf{F}_{\text{em}} &= (\mu_0 / 4\pi) I_1 dl_1 \times (I_2 dl_2 \times \mathbf{r}) / r^3\end{aligned}$$

onde as partículas e os elementos condutores estão separados pelo vetor \mathbf{r} (com $|\mathbf{r}| = r$). A grandeza física ϵ_0 , a constante elétrica (anteriormente denominada de **permissividade** do vácuo), é definida no SI como tendo o valor

$$\epsilon_0 = (10^7 / 4\pi c_0^2) \text{ kg}^{-1} \text{ m}^{-1} \text{ C}^2 \approx 8,854\,187\,817 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ m}^{-1} \text{ J}^{-1}$$

Do mesmo modo, a grandeza física μ_0 , a constante magnética (anteriormente chamada de permeabilidade do vácuo), tem o valor

$$\mu_0 := 4\pi \times 10^{-7} \text{ N A}^{-2} \approx 1,256\,637\,061\,4 \times 10^{-6} \text{ N A}^{-2}$$

no SI. Em diferentes sistemas de unidades, ϵ_0 e μ_0 podem ter diferentes valores numéricos e diferentes unidades. Neste livro usa-se ϵ_0 e μ_0 como notações para os valores do SI acima, preferindo usar os símbolos mais gerais k_{es} e k_{em} para descrever essas grandezas em outros sistemas de unidades e equações, como discutido abaixo. O valor SI de μ_0 resulta da definição do ampere (Secção 3.3, p. 91). O valor de ϵ_0 resulta então da relação de Maxwell

$$\epsilon_0 \mu_0 = 1/c_0^2$$

onde c_0 é a velocidade da luz no vácuo (vide Capítulo 5, p. 115).

De um modo mais geral, seguindo ideias delineadas em [158] e [159], as equações básicas para as forças eletrostática e eletromagnética podem ser escritas como

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_{\text{es}} &= k_{\text{es}} \frac{Q_1 Q_2 \mathbf{r}}{r^3} \\ d^2\mathbf{F}_{\text{em}} &= \frac{k_{\text{em}}}{k^2} \frac{I_1 dl_1 \times (I_2 dl_2 \times \mathbf{r})}{r^3}\end{aligned}$$

onde as três constantes k_{es} , k_{em} e k satisfazem uma relação de Maxwell mais geral

$$k^2 \cdot k_{\text{es}}/k_{\text{em}} = c_0^2$$

A introdução das três constantes é necessária para se descrever de modo coerente os sistemas de unidades e as equações que são de uso comum na teoria eletromagnética. Estes são, além do SI, o sistema (de unidades eletrostático) esu, o sistema (de unidades eletromagnético) emu, o sistema gaussiano e o sistema de unidades **atômicas**. As constantes k , k_{es} e k_{em} têm convencionalmente os valores fornecidos na tabela a seguir.

	<i>SI</i>	<i>esu</i>	<i>emu</i>	<i>gaussiano</i>	<i>unidades atômicas</i>	<i>Notas</i>
k	1	1	1	$\zeta \text{ cm s}^{-1}$	1	1
k_{es}	$1/4\pi\varepsilon_0$	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 é igual ao número exato $\zeta = c_0/(\text{cm s}^{-1}) = 29\ 979\ 245\ 800$, vide p. 141.

(2) $1/4\pi\varepsilon_0 = \zeta^2 \times 10^{-11} \text{ N A}^{-2} \text{ m}^2 \text{ s}^{-2}$

(3) $\mu_0/4\pi = 10^{-7} \text{ N A}^{-2}$

(4) α é a constante de estrutura fina, com $\alpha^{-1} = 137,035\ 999\ 139(31)$ (vide Capítulo 5, p. 115).

Esta tabela pode ser usada juntamente com a Secção 7.4 (p. 152) para transformar expressões envolvendo grandezas eletromagnéticas entre os diversos sistemas. Verifica-se que, particularmente no sistema gaussiano, $k = c_0$. Isto, juntamente com a relação geral das equações de Maxwell dada na Secção 7.4, garante que a velocidade da luz no vácuo seja c_0 no sistema gaussiano. Na Secção 7.4, são apresentados outros exemplos de transformações entre o SI e o sistema gaussiano de unidades.

Comentários adicionais

(i) O sistema esu

No sistema esu, as unidades de base são o centímetro (cm), o grama (g) e o segundo (s), para comprimento, massa e tempo, respectivamente. O franklin, símbolo Fr (vide nota de rodapé¹⁵, abaixo) para a unidade eletrostática de carga, pode ser considerado alternativamente como uma quarta unidade de base. Duas partículas com cargas elétricas de um franklin, separadas no vácuo por um centímetro, repelem-se mutuamente com uma força de $1 \text{ dyn} = 1 \text{ cm g s}^{-2}$. Desta definição, obtém-se a relação: $1 \text{ Fr} = (10/\zeta) \text{ C}$ (vide Exemplo 7, Secção 7.1, p. 140). Dado que $k_{\text{es}} = 1$, a partir da definição geral da força eletrostática dada acima, a equação $\text{Fr} = \text{erg}^{1/2} \text{ cm}^{1/2}$ é verdadeira no sistema esu, onde $\text{erg}^{1/2} \text{ cm}^{1/2}$ são as unidades esu da carga. Neste livro, por conveniência, o franklin é então usado como unidade esu da carga.

(ii) O sistema emu

No sistema emu, as unidades de base são o centímetro (cm), o grama (g) e o segundo (s) para comprimento, massa e tempo, respectivamente. O biot (símbolo Bi), unidade eletromagnética da corrente elétrica, pode ser considerado alternativamente como uma quarta unidade de base. Dois fios longos, separados em um centímetro, no vácuo, com correntes elétricas de um biot que fluem na mesma direção, repelem-se mutuamente com uma força linear (força por unidade de comprimento) de 1 dyn/cm . Desta definição obtém-se a relação $1 \text{ Bi} = 10 \text{ A}$. Dado que $k_{\text{em}} = 1$, a partir da definição geral da força eletromagnética dada acima, a equação $\text{Bi} = \text{dyn}^{1/2}$ é verdadeira no sistema emu, onde $\text{dyn}^{1/2}$ é a unidade emu da corrente elétrica. Comumente, o biot tem sido usado como uma expressão resumida da unidade emu da corrente elétrica.

(iii) O sistema gaussiano

No sistema gaussiano, os sistemas esu e emu estão misturados. A partir das relações do franklin e do biot com as unidades SI, obtém-se de imediato

$$1 \text{ Bi} = \zeta \text{ Fr s}^{-1}$$

Dado que $k_{\text{es}} = 1$ e $k_{\text{em}} = 1$, por meio da relação de Maxwell mais geral dada acima determina-se que o valor da constante k é c_0 . Em tratados sobre a teoria da relatividade, k é, às vezes, fixado como sendo igual a 1, o que corresponde a uma transformação do eixo do tempo de uma coordenada t numa coordenada $x = c_0 t$.

¹⁵ O nome “franklin”, símbolo Fr, para a unidade esu da carga, foi sugerido por Guggenheim [160], mas nunca foi amplamente adotado. O nome “statcoulomb” também tem sido usado para a unidade esu da carga.

(iv) O sistema de unidades atômicas

No sistema de unidades atômicas [22] (vide também Secção 3.9.1, p. 99), as cargas são expressas em unidades da carga elementar e , as correntes em unidades de eE_h/\hbar , onde E_h é o hartree e \hbar é a constante de Planck dividida por 2π , os comprimentos são expressos em unidades do bohr, a_0 , a intensidade do campo elétrico é expressa em unidades de E_h/ea_0 , e a densidade de fluxo magnético em unidades de \hbar/ea_0^2 . Os fatores de conversão dessas e outras unidades atômicas para o SI estão incluídos nas Secções 3.9.1 e 7.2, p. 99 e 141. Portanto, dado que convencionalmente $k = 1$, tem-se que $k_{es} = 1$ neste sistema (vide nota de rodapé¹⁶) e $k_{em} = \alpha^2$ (vide nota de rodapé¹⁷).

(v) Grandezas não rationalizadas

A constante numérica 4π é introduzida nas definições de ε_0 e μ_0 devido à simetria esférica envolvida nas equações acima que definem \mathbf{F}_{es} e $d^2\mathbf{F}_{em}$; deste modo, evita-se a sua ocorrência nas equações posteriores, isto é, nas equações de Maxwell. Quando fatores 4π são introduzidos deste modo, como no SI, as equações designam-se como “rationalizadas”.

Além disso, quando se converte a equação eletromagnética do SI para os sistemas esu, emu, gaussiano e de unidades atômicas, é usual a inclusão do fator 4π nas seguintes grandezas:

$$\begin{aligned} D^{(ir)} &= 4\pi D \\ H^{(ir)} &= 4\pi H \\ \chi_e^{(ir)} &= \chi_e/4\pi \\ \chi^{(ir)} &= \chi/4\pi \end{aligned}$$

onde o sobrescrito (ir), para irracional, significando não rationalizado, denota o valor da correspondente grandeza num sistema de unidades “não rationalizado”, em contraste com um sistema como o SI, que é “rationalizado” no sentido descrito acima.

A permeabilidade magnética μ é definida como $\mu = \mu_r k_{em} 4\pi = \mu_r \mu_0$ no SI, e como $\mu = \mu_r k_{em}$ num sistema de unidades não rationalizado. μ_r é a permeabilidade relativa adimensional, e é definida em termos da susceptibilidade magnética na Secção 7.4, p. 153. No SI, a permissividade elétrica ε é dada por $\varepsilon = \varepsilon_r 4\pi/k_{es} = \varepsilon_r \varepsilon_0$, e em sistemas de unidades não rationalizadas por $\varepsilon = \varepsilon_r/k_{es}$. ε_r é a permissividade relativa adimensional, que é definida em termos da susceptibilidade elétrica na Secção 7.4, p. 152.

¹⁶ Dado que $E_h = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0}$, $E = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Q}{r^2} = \frac{E_h a_0}{e^2} \frac{Q}{r^2} = \frac{E_h}{ea_0} \frac{(Q/e)}{(r/a_0)^2}$.

¹⁷ Uma vez que o valor da velocidade da luz em unidades atômicas é o recíproco da constante de estrutura fina, α^{-1} , a condição $k^2 k_{es}/k_{em} = c_0^2$ resulta em $k_{em} = \alpha^2$ em unidades atômicas para $k = 1$.

7.4 Transformação de equações da teoria eletromagnética entre as formas SIG(SI) e gaussiana

<i>Relação geral</i>	<i>SIG(SI)</i>	<i>Gaussiano</i>
Força entre duas partículas carregadas localizadas no vácuo (lei de Coulomb):		
$\mathbf{F} = k_{\text{es}} Q_1 Q_2 \mathbf{r} / r^3$	$\mathbf{F} = Q_1 Q_2 \mathbf{r} / 4\pi\epsilon_0 r^3$	$\mathbf{F} = Q_1 Q_2 \mathbf{r} / r^3$
Potencial eletrostático ao redor de uma partícula carregada localizada, no vácuo:		
$\phi = k_{\text{es}} Q / r$	$\phi = Q / 4\pi\epsilon_0 r$	$\phi = Q / r$
Relação entre a intensidade do campo elétrico e o potencial eletrostático:		
$\mathbf{E} = -\nabla\phi$	$\mathbf{E} = -\nabla\phi$	$\mathbf{E} = -\nabla\phi$
Campo devido a uma distribuição de cargas ρ no vácuo (lei de 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 dipolar elétrico de uma distribuição de cargas:		
$\mathbf{p} = \int \rho \mathbf{r} dV$	$\mathbf{p} = \int \rho \mathbf{r} dV$	$\mathbf{p} = \int \rho \mathbf{r} dV$
Potencial ao redor de um dipolo no vácuo:		
$\phi = k_{\text{es}} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / r^3$	$\phi = \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / 4\pi\epsilon_0 r^3$	$\phi = \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / r^3$
Energia de uma distribuição de cargas num campo elétrico:		
$E = Q\phi - \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} + \dots$	$E = Q\phi - \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} + \dots$	$E = Q\phi - \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} + \dots$
Momento dipolar elétrico induzido num campo elétrico:		
$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E} + \dots$	$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E} + \dots$	$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E} + \dots$
Polarização dielétrica:		
$\mathbf{P} = \chi_e \mathbf{E} / 4\pi k_{\text{es}}$	$\mathbf{P} = \chi_e \epsilon_0 \mathbf{E}$	$\mathbf{P} = \chi_e^{(\text{ir})} \mathbf{E}$
Susceptibilidade elétrica e permissividade relativa:		
$\epsilon_r = 1 + \chi_e$	$\epsilon_r = 1 + \chi_e$	$\epsilon_r = 1 + 4\pi\chi_e^{(\text{ir})}$
Deslocamento elétrico ¹ :		
$\mathbf{D} = \mathbf{E} / 4\pi k_{\text{es}} + \mathbf{P}$	$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$	$\mathbf{D}^{(\text{ir})} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}$
$\mathbf{D} = \epsilon_r \mathbf{E} / 4\pi k_{\text{es}}$	$\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E}$	$\mathbf{D}^{(\text{ir})} = \epsilon_r \mathbf{E}$
Capacitância de um condensador de placas paralelas, área A , separação d :		
$C = \epsilon_r A / 4\pi k_{\text{es}} d$	$C = \epsilon_0 \epsilon_r A / d$	$C = \epsilon_r A / 4\pi d$
Força entre dois elementos de corrente no vácuo:		
$d^2 \mathbf{F} = \frac{k_{\text{em}}}{k^2} \frac{I_1 d\mathbf{l}_1 \times (I_2 d\mathbf{l}_2 \times \mathbf{r})}{r^3}$	$d^2 \mathbf{F} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{I_1 d\mathbf{l}_1 \times (I_2 d\mathbf{l}_2 \times \mathbf{r})}{r^3}$	$d^2 \mathbf{F} = \frac{I_1 d\mathbf{l}_1 \times (I_2 d\mathbf{l}_2 \times \mathbf{r})}{c_0^2 r^3}$
Potencial vetor magnético devido a um elemento de corrente no vácuo:		
$d\mathbf{A} = \frac{k_{\text{em}}}{k} I d\mathbf{l} / r$	$d\mathbf{A} = \frac{\mu_0}{4\pi} I d\mathbf{l} / r$	$d\mathbf{A} = I d\mathbf{l} / c_0 r$
Relação entre a densidade de fluxo magnético e o potencial vetor magnético:		
$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$	$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$	$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$
Densidade de fluxo magnético devido a um elemento de corrente no vácuo (lei de 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) A segunda equação é válida em meios isotrópicos.

Densidade de fluxo magnético devido a uma densidade de corrente \mathbf{j} no vácuo (lei de Ampère):

$$\nabla \times \mathbf{B} = 4\pi \frac{k_{\text{em}}}{k} \mathbf{j}$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j}$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = 4\pi \mathbf{j}/c_0$$

Força exercida sobre um elemento de corrente na presença duma densidade de fluxo magnético:

$$d\mathbf{F} = Idl \times \mathbf{B}/k$$

$$d\mathbf{F} = Idl \times \mathbf{B}$$

$$d\mathbf{F} = Idl \times \mathbf{B}/c_0$$

Dipolo magnético de um circuito de corrente de área A :

$$\mathbf{m} = IA/k$$

$$\mathbf{m} = IA$$

$$\mathbf{m} = IA/c_0$$

Potencial vetor magnético ao redor de um dipolo magnético no vácuo:

$$\mathbf{A} = k_{\text{em}} \mathbf{m} \times \mathbf{r}/r^3$$

$$\mathbf{A} = \frac{\mu_0}{4\pi} \mathbf{m} \times \mathbf{r}/r^3$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{m} \times \mathbf{r}/r^3$$

Energia de um dipolo magnético numa densidade de fluxo magnético:

$$E = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$$

$$E = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$$

$$E = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$$

Dipolo magnético induzido por uma densidade de fluxo magnético:

$$\mathbf{m} = \xi \mathbf{B} + \dots$$

$$\mathbf{m} = \xi \mathbf{B} + \dots$$

$$\mathbf{m} = \xi \mathbf{B} + \dots$$

Magnetização:

$$\mathbf{M} = \chi \mathbf{H}$$

$$\mathbf{M} = \chi \mathbf{H}$$

$$\mathbf{M} = \chi^{(\text{ir})} \mathbf{H}^{(\text{ir})}$$

Susceptibilidade magnética e permeabilidade relativa:

$$\mu_r = 1 + \chi$$

$$\mu_r = 1 + \chi$$

$$\mu_r = 1 + 4\pi\chi^{(\text{ir})}$$

Intensidade de campo magnético¹:

$$\mathbf{H} = \mathbf{B}/4\pi k_{\text{em}} - \mathbf{M}$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{B}/\mu_0 - \mathbf{M}$$

$$\mathbf{H}^{(\text{ir})} = \mathbf{B} - 4\pi\mathbf{M}$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{B}/4\pi\mu_r k_{\text{em}}$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{B}/\mu_0\mu_r$$

$$\mathbf{H}^{(\text{ir})} = \mathbf{B}/\mu_r$$

Condutividade:

$$\mathbf{j} = \kappa \mathbf{E}$$

$$\mathbf{j} = \kappa \mathbf{E}$$

$$\mathbf{j} = \kappa \mathbf{E}$$

Autoindutância de um solenoide de volume V com n espiras por unidade de comprimento:

$$L = 4\pi \frac{k_{\text{em}}}{k^2} \mu_r n^2 V$$

$$L = \mu_0 \mu_r n^2 V$$

$$L = 4\pi \mu_r n^2 V/c_0^2$$

Lei de indução de Faraday:

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{k} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \mathbf{0}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial \mathbf{B}/\partial t = \mathbf{0}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c_0} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \mathbf{0}$$

Relação entre a intensidade de campo elétrico e potenciais eletromagnéticos:

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi - \frac{1}{k} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi - \partial \mathbf{A}/\partial t$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi - \frac{1}{c_0} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

Equações de Maxwell:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D}^{(\text{ir})} = 4\pi\rho$$

$$k \nabla \times \mathbf{H} - \partial \mathbf{D} / \partial t = \mathbf{j}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} - \partial \mathbf{D} / \partial t = \mathbf{j}$$

$$\nabla \times \mathbf{H}^{(\text{ir})} - \frac{1}{c_0} \frac{\partial \mathbf{D}^{(\text{ir})}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c_0} \mathbf{j}$$

$$k \nabla \times \mathbf{E} + \partial \mathbf{B} / \partial t = \mathbf{0}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial \mathbf{B} / \partial t = \mathbf{0}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c_0} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \mathbf{0}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

Equações de onda para potenciais eletromagnéticos ϕ e \mathbf{A} (no gauge de Lorentz (*Port.*: padrão de Lorentz)):

$$\begin{array}{lll} \Delta\phi - \frac{k_{\text{em}}}{k^2 k_{\text{es}}} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -4\pi k_{\text{es}} \rho & \Delta\phi - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -\rho/\varepsilon_0 & \Delta\phi - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -4\pi \rho \\ \Delta\mathbf{A} - \frac{k_{\text{em}}}{k^2 k_{\text{es}}} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -4\pi k_{\text{em}} \mathbf{j} & \Delta\mathbf{A} - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\mu_0 \mathbf{j} & \Delta\mathbf{A} - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c_0} \mathbf{j} \\ \nabla \mathbf{A} + \frac{k_{\text{em}}}{k k_{\text{es}}} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 & \nabla \mathbf{A} + \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 & \nabla \mathbf{A} + \frac{1}{c_0} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \end{array}$$

Densidade de energia de radiação:

$$U/V = (\mathbf{E} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{H})/2 \quad U/V = (\mathbf{E} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{H})/2 \quad U/V = \left(\mathbf{E} \cdot \mathbf{D}^{(\text{ir})} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{H}^{(\text{ir})} \right) / 8\pi$$

Taxa do fluxo de energia radiante (vetor de Poynting):

$$\mathbf{S} = k \mathbf{E} \times \mathbf{H} \quad \mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H} \quad \mathbf{S} = \frac{c_0}{4\pi} \mathbf{E} \times \mathbf{H}^{(\text{ir})}$$

Força sobre uma carga Q em movimento com uma velocidade \mathbf{v} (força de Lorentz):

$$\mathbf{F} = Q (\mathbf{E} + \mathbf{v}/k \times \mathbf{B}) \quad \mathbf{F} = Q (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad \mathbf{F} = Q (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}/c_0)$$

8 INCERTEZA

É fundamental que uma estimativa da incerteza seja apresentada juntamente com uma medida. Em resumo, um relato de um resultado experimental (ou teórico) quantitativo deve conter uma indicação sobre qual é a "melhor estimativa" para um resultado verdadeiro, bem como uma indicação do intervalo provável dos possíveis valores, especificando-se a incerteza. A dispersão esperada para os valores medidos surge de diversas fontes. A contribuição de todas estas fontes para a incerteza deve ser estimada como parte de uma projeção da incerteza. As tabelas mostram algumas das maneiras como as contribuições para a projeção da incerteza podem ser estimadas e combinadas, e os exemplos abaixo mostram como pode ser apresentado o resultado da estimativa da incerteza combinada. O presente resumo baseia-se na referência [8].

8.1 Incerteza de uma única grandeza medida

As incertezas de uma grandeza X medida podem ser apresentadas de diversas maneiras, fornecendo-se a melhor estimativa juntamente com um segundo valor definindo uma incerteza que corresponde a um intervalo de probabilidade para o valor verdadeiro. Usa-se a notação X para grandes medias, x para resultados de medida, e u_c para a incerteza.

Exemplo 1. $m_s = 100,021\,47$ g com uma incerteza padrão combinada (isto é, incerteza padrão estimada) de $u_c = 0,35$ mg. Dado que se pode assumir que os valores estimados possíveis do padrão são aproximadamente normalmente distribuídos com desvio padrão aproximado igual a u_c , considera-se que o valor desconhecido do padrão se encontra no intervalo $m_s \pm u_c$ com um nível de confiança de aproximadamente 68 %.

Exemplo 2. $m_s = (100,021\,47 \pm 0,000\,70)$ g, onde o número após o símbolo \pm é o valor numérico de uma incerteza expandida $U = k u_c$, com U determinado a partir de uma incerteza padrão combinada (isto é, desvio padrão combinado) $u_c = 0,35$ mg e um fator de expansão $k = 2$. Dado que se pode assumir que os valores estimados possíveis do padrão são aproximadamente normalmente distribuídos com um desvio padrão aproximado u_c , considera-se que o valor desconhecido do padrão se encontra dentro do intervalo definido por U com um nível de confiança de 95 % (vide Secção 8.3, p. 160).

Exemplo 3. $m_s = 100,021\,47(35)$ g, onde o número entre parênteses denota a incerteza padrão combinada $u_c = 0,35$ mg, suposta como referente aos algarismos menos significativos.

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Definição</i>	<i>Notas</i>
Distribuições de probabilidade			
distribuição de probabilidade de x $f(x)$		A densidade de probabilidade de uma grandeza de valor x ; normal (gaussiana), retangular, triangular, t de Student, etc.	
valor esperado de x	$E[x]$	$E[x] = \int x f(x)dx$	
média	μ	$E[x]$	
variância	σ^2	$E[(x - \mu)^2]$	
desvio padrão	σ	$\sigma = +\sqrt{\sigma^2}$	
Estatística			
número de medidas		N	
média	\bar{x}	$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$	
variância	$s^2(x)$	$s^2(x) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2$	1
desvio padrão	$s(x)$	$s(x) = +\sqrt{s^2(x)}$	
desvio padrão da média	$s(\bar{x})$	$s(\bar{x}) = s(x)/\sqrt{N}$	

(1) Esta é uma estimativa imparcial e leva em conta a remoção de um grau de liberdade porque a dispersão é medida em torno da média.

<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Definição</i>	<i>Notas</i>
Incógnitas			
incerteza padrão de x_i	$u(x_i)$	Estimada por aproximações de tipo A ou B	2
avaliação de tipo A		A avaliação de tipo A (da incerteza padrão) é um método de avaliação de uma incerteza padrão por meio da análise estatística de uma série de observações	3
avaliação de tipo B		A avaliação de tipo B (da incerteza padrão) é um método de avaliação de uma incerteza padrão por meios que não a análise estatística de uma série de observações (por exemplo, está baseada num julgamento científico usando-se toda a informação relevante disponível)	4
incerteza padrão relativa de x	$u_r(x_i)$	$u_r(x_i) = u(x_i)/ x_i \quad (x_i \neq 0)$	
incerteza padrão combinada do resultado de medida y	$u_c(y)$	Incógnita estimada em y decorrente de todos os resultados de medida $y = f(X_1, X_2, \dots, X_M)$	5
incerteza padrão relativa combinada de y	$u_{c,r}(y)$	$u_{c,r}(y) = u_c(y)/ y \quad (y \neq 0)$	
incerteza expandida	U	$U = k u_c(y)$	6
fator de extensão	k		6

(2) A incerteza no resultado de uma medida compreende geralmente diversas componentes que podem ser agrupadas em duas categorias de acordo com a forma como os seus valores numéricos são estimados:

Tipo A: As que são avaliadas por meio de métodos estatísticos

Tipo B: As que são avaliadas por outros meios

A apresentação detalhada de uma incerteza deve consistir numa lista de componentes, especificando para cada uma delas o método usado para obter seu valor numérico. Isto fornece a "projeção da incerteza".

(3) Em exemplos de avaliações do tipo A, calcula-se o desvio padrão da média de uma série de observações independentes; usa-se o método dos mínimos quadrados para ajustar uma função aos dados para avaliar os parâmetros da função e seus desvios padrão; e realiza-se uma análise de variância (ANOVA) para identificar e quantificar efeitos aleatórios em certos tipos de medidas. Essas componentes da incerteza são caracterizadas pelas variâncias estimadas s_i^2 (ou "desvios padrão" estimados s_i) e pelo número de graus de liberdade ν_i . Quando apropriado, as covariâncias devem ser fornecidas.

(4) Este conhecimento pode incluir dados prévios de medidas, conhecimento geral do comportamento e propriedades de materiais e instrumentos relevantes, especificações de fabricantes, dados fornecidos em calibrações e outras indicações. Estas componentes de incerteza devem ser caracterizadas por valores u_j^2 , que podem ser considerados aproximações às respectivas variâncias. Os valores u_j^2 podem ser tratados como variâncias e os valores u_j como desvios padrão.

(Continuação das notas)

(4) (em continuação)

Exemplos de avaliações de tipo B:

- (a) Se for razoável assumir que a grandeza, X , pode ser modelada por uma distribuição normal de probabilidade, então limites inferior e superior a_- e a_+ devem ser estimados, tal que o melhor valor estimado da grandeza de entrada seja $x = (a_- + a_+)/2$ (isto é, o centro dos limites) e exista uma possibilidade em duas (isto é, uma probabilidade de 50 %) de que o valor da grandeza se encontra no intervalo a_- a a_+ , logo $u \approx 1,48(a_+ - a_-)/2$.
 - (b) Contudo, se a grandeza, X , for melhor representada por uma distribuição retangular, então os limites inferior e superior a_- e a_+ da grandeza de entrada devem ser estimados tal que a probabilidade de que o valor se encontre no intervalo a_- e a_+ seja, para todos os efeitos práticos, 100 %. Desde que não exista informação contraditória, trata-se a grandeza como se fosse igualmente provável que o seu valor se encontre em qualquer ponto do intervalo de a_- a a_+ ; isto é, modela-se por meio de uma distribuição uniforme de probabilidade (isto é, retangular). A melhor estimativa do valor da grandeza é então $x = (a_- + a_+)/2$ com a incerteza $u = (a_+ - a_-)/2\sqrt{3}$.
- (5) A grandeza Y sendo medida, designada mensurando, não é medida diretamente, mas sim determinada a partir de M outras grandeszas X_1, X_2, \dots, X_M por meio de uma função f (às vezes chamada de equação de medida), $Y = f(X_1, X_2, \dots, X_M)$. As grandeszas X_i incluem correções (ou fatores de correção), bem como grandeszas que têm em conta outras fontes de variabilidade, tais como diferentes observadores, instrumentos, amostras e laboratórios etc. Uma estimativa da grandeza medida Y , representada como $y = f(x_1, x_2, \dots, x_M)$, é obtida a partir da equação de medida usando-se *estimativas de entrada* x_1, x_2, \dots, x_M para os valores das M grandeszas de entrada. Tem-se uma situação similar se outras grandeszas devem ser derivadas a partir de medidas. A propagação de incerteza está ilustrada na tabela acima.
- (6) Algumas aplicações comerciais, industriais e regulatórias requerem uma medida da incerteza que define um intervalo em torno de um resultado de medida y , dentro do qual o valor do mensurando Y se encontra. Nestes casos usa-se a *incerteza expandida* U , que é obtida multiplicando a incerteza padrão combinada, $u_c(y)$, por um *fator de extensão* k . Assim, considera-se que $U = k u_c(y)$ e que Y é maior que ou igual a $y - U$, e é menor que ou igual a $y + U$, sendo comumente escrito como $Y = y \pm U$. O valor do fator de extensão k é escolhido tendo por base o nível de confiança que se deseja associar ao intervalo definido por $U = k u_c$. Tipicamente, k está no intervalo de dois a três. Quando a distribuição normal se aplica e u_c é uma estimativa confiável do desvio padrão de y , $U = 2u_c$ (isto é, $k = 2$) define um intervalo que tem um nível de confiança de aproximadamente 95 %, e $U = 3u_c$ (isto é, $k = 3$) define um intervalo que tem um nível de confiança maior que 99 %.

8.2 Propagação de incerteza para medidas não correlacionadas

Para uma discussão sobre o tratamento de incertezas correlacionadas, vide [8].

<i>Equação de medida</i>	<i>Resultado de medida relatado</i>	<i>Equação para a incerteza padrão combinada</i>	<i>Notas</i>
$Y = \sum_{i=1}^N a_i X_i$	$y = \sum_{i=1}^N a_i x_i$	$u_c(y) = \left(\sum_{i=1}^N a_i^2 u^2(x_i) \right)^{1/2}$	1
$Y = A X_1^{a_1} X_2^{a_2} \cdots X_N^{a_N}$	$y = A x_1^{a_1} x_2^{a_2} \cdots x_N^{a_N}$	$u_{c,r}(y) = \left(\sum_{i=1}^N a_i^2 u_r^2(x_i) \right)^{1/2}$	2

(1) Às vezes esta incerteza é conhecida como soma em quadratura. A equação de medida é representada por uma soma de grandezas X_i multiplicadas por uma constante a_i . Assume-se que os a_i são conhecidos com certeza.

(2) A equação de medida é representada por um produto de grandezas X_i elevadas às potências a_1, a_2, \dots, a_N e multiplicadas por uma constante A . Assume-se que A e os a_i são conhecidos com certeza.

8.3 Incertezas em termos de intervalos de confiança

Geralmente pode-se especificar a incerteza definindo-se um intervalo dentro do qual se espera que o valor esteja com uma certa probabilidade. Este intervalo pode ser especificado como $(y - U) \leq Y \leq (y + U)$.

Exemplo $100,021\,40 \text{ g} \leq m_s \leq 100,021\,54 \text{ g}$ ou $m_s = 100,021\,47(7) \text{ g}$
ou $m_s = (100,021\,47 \pm 0,000\,07) \text{ g}$

Quando se especifica um tal intervalo, deve-se indicar a confiança dada como a probabilidade estimada com que se espera que o valor verdadeiro esteja nesse intervalo (por exemplo, 60 %, 90 % ou 95 %). Esta probabilidade pode ser estimada usando uma variedade de distribuições de probabilidade apropriadas para a medida sob consideração (gaussiana, t de Student, etc. [8,9]).

9 ABREVIACÕES E ACRÔNIMOS

Abreviações e **acrônimos** (palavras formadas a partir das letras iniciais de grupos de palavras que são frequentemente repetidos) devem ser usados com moderação. A menos que as abreviações e **acrônimos** estejam bem estabelecidos (*e.g.* RMN, UV), em qualquer publicação científica devem sempre ser definidos e o seu uso deve ser evitado em títulos e resumos. Alguns **acrônimos** passaram a ser aceitos/**es** como palavras comuns, como é o caso da palavra “laser”, resultante do **acrônimo** LASER. Se possível, abreviações usadas para indicar grandezas físicas devem ser trocadas pelos símbolos recomendados para as respectivas grandezas (*e.g.* E_i ao invés de EI para energia de ionização, vide Secção 2.5, p. 24; ρ ao invés de dens. para densidade de massa, vide Secção 2.2, p. 14). Para recomendações adicionais sobre abreviações, vide [161].

Fornece-se aqui uma lista de abreviações e **acrônimos** frequentemente usados, com a finalidade de ajudar os leitores na sua utilização, mas não necessariamente para estimular seu uso universal. Em muitos casos, um **acrônimo** pode ser escrito em letras minúsculas e maiúsculas. Na lista a seguir, somente se fornece a sua forma mais comum. Note que se optou por se manter na íntegra a versão original em Inglês, apenas fornecendo alguns **acrônimos** em Português (entre parênteses) sempre que estes são já de uso comum na literatura científica em Português (onde é muito comum usarem-se alguns **acrônimos** em Inglês). Listas mais extensas referentes a diferentes métodos espectroscópicos foram publicadas pela IUPAC [162,163] e por Wendisch [164]; uma lista extensa de **acrônimos** usados em Química Teórica foi publicada pela IUPAC [21].

A/D	analogue-to-digital
AA	atomic absorption
AAS (EAA)	atomic absorption spectroscopy
ac	alternating current
ACM	adiabatic channel model
ACT	activated complex theory
AD	atom diffraction
ADC	analogue-to-digital converter
AES	Auger electron spectroscopy
AFM	atomic force microscopy
AIUPS	angle-integrated ultraviolet photoelectron spectroscopy
AM	amplitude modulated
amu	atomic mass unit
ANOVA	analysis of variance
AO	atomic orbital
APS	appearance potential spectroscopy
ARAES	angle-resolved Auger electron spectroscopy
ARPEFS	angle-resolved photoelectron fine structure
AS	Auger spectroscopy
ATR	attenuated total (internal) reflection
AU (UA)	astronomical unit
au (ua)	atomic unit
bcc (fcf)	body-centred cubic
BET	Brunauer-Emmett-Teller (adsorption isotherm)
BIPM	Bureau International des Poids et Mesures
BIS	bremsstrahlung isochromat spectroscopy
BM	Bohr magneton (symbol: μ_B)
bp (PE)	boiling point
Btu	British thermal unit
CARS	coherent anti-Stokes Raman scattering
CAS	complete active space
CAS-SCF	complete active space - self consistent field
CAT	computer average of transients
CAWIA	Commission on Atomic Weights and Isotopic Abundances (now CIAAW)
CCA	coupled cluster approximation
CCC	critical coagulation concentration
CCD	coupled charge device
CCL	colour centre laser
CCU	Comité Consultatif d'Unités
ccp	cubic close packed
CD	circular dichroism
CEELS	characteristic electron energy-loss spectroscopy
CELS	characteristic energy-loss spectroscopy
CEPA	coupled electron pair approximation
CGPM	Conférence Générale des Poids et Mesures
cgs, CGS	centimetre-gram-second
CI	chemical ionization
CI	configuration interaction
CIAAW	Commission on Isotopic Abundances and Atomic Weights (formerly CAWIA)

CIDEP	chemically induced dynamic electron polarization
CIDNP	chemically induced dynamic nuclear polarization
CIMS	chemical ionization mass spectroscopy
CIPM	Comité International des Poids et Mesures
CIVR	collision induced vibrational relaxation
CIVR	classical intramolecular vibrational redistribution
CMA	cylindrical mass analyzer
CME (EQM)	chemically modified electrode
CNDO	complete neglect of differential overlap
CODATA	Committee on Data for Science and Technology
COMAS	Concentration Modulation Absorption Spectroscopy
CPD	contact-potential difference
CRDS	cavity ring-down spectroscopy
CSRS	coherent Stokes-Raman scattering
CT	charge transfer
CVD	chemical vapor deposition
CW	continuous wave
D/A	digital-to-analogue
DAC	digital-to-analogue converter
D4WM	degenerate 4-wave mixing
DAPS	disappearance potential spectroscopy
dc, DC	direct current
DFG	difference frequency generation
DFT	density functional theory
DLVO	Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek
DME (EGM)	dropping mercury electrode
DQMC	diffusion quantum Monte Carlo
DRIFTS	diffuse reflectance infrared Fourier transform spectroscopy
DSC	differential scanning calorimetry
DTA	differential thermal analysis
E1	elimination unimolecular
E2	elimination bimolecular
EAPFS	extended appearance potential fine structure
EC	electron capture
ECD	electron capture detector
ED	electron diffraction
EDA	electron donor-acceptor [complex]
EDX	energy-dispersive X-ray analysis
EELS	electron energy-loss spectroscopy
EH	electron holography
EI	electron impact ionization
EIS	electron impact spectroscopy
EIS (EIE)	electrochemical impedance spectroscopy
EL	electroluminescence
ELDOR	electron-electron double resonance
ELEED	elastic low energy electron diffraction
emf (fem)	electromotive force
emu	electromagnetic unit

ENDOR	electron-nuclear double resonance
EPR	electron paramagnetic resonance
ESCA	electron spectroscopy for chemical applications (or analysis), <i>vide</i> XPS
ESD	electron stimulated desorption
ESDIAD	electron stimulated desorption ion angular distribution
ESR	electron spin resonance
esu	electrostatic unit
ETS	electron transmission spectroscopy, electron tunneling spectroscopy
eu	entropy unit
EXAFS	extended X-ray absorption fine structure
EXAPS	electron excited X-ray appearance potential spectroscopy
EXELFS	extended electron energy-loss fine structure
FAB(MS)	fast atom bombardment (mass spectroscopy)
fcc (fcf)	face-centred cubic
FD	field desorption
FEESP	field-emitted electron spin-polarization [spectroscopy]
FEM	field emission [electron] microscopy
FES	field emission spectroscopy
FFT	fast Fourier transform
FI	field ionization
FID	flame ionization detector
FID	free induction decay
FIM	field-ion microscopy
FIMS	field-ion mass spectroscopy
FIR	far-infrared
FM	frequency modulated
FPD	flame photometric detector
FSR	free spectral range
FT	Fourier transform
FTD	flame thermionic detector
FTIR	Fourier transform infrared
FWHM	full width at half maximum
GC (CG)	gas chromatography
GIXS	grazing-incidence X-ray scattering
GLC	gas-liquid chromatography
GM	Geiger-Müller
GTO	Gaussian-type orbital
GVB	generalized valence bond
hcp (hc)	hexagonal close-packed
HEED	high-energy electron diffraction
HEELS	high-energy electron energy-loss spectroscopy
HEIS	high-energy ion scattering
HF	Hartree-Fock
hfs	hyperfine structure (hyperfine splitting)
HMDE	hanging mercury drop electrode
HMO	Hückel molecular orbital
HOMO	highest occupied molecular orbital

HPLC (CLAE)	high-performance liquid chromatography
HREELS	high-resolution electron energy-loss spectroscopy
HTS	Hadamard transform spectroscopy
HWP	half-wave potential
I/O	input-output
IBA	ion beam analysis
IC	integrated circuit
ICISS	impact-collision ion scattering spectroscopy
ICR	ion cyclotron resonance
ICSU	International Council for Science
id	inner diameter
IEC	International Electrotechnical Commission
IEP	isoelectric point
IEPA	independent electron pair approximation
IETS	inelastic electron tunneling spectroscopy
ILEED	inelastic low-energy electron diffraction
INDO	incomplete neglect of differential overlap
INDOR	internuclear double resonance
INS	inelastic neutron scattering
INS	ion neutralization spectroscopy
IP	ionization potential (symbol: E_i)
IPES	inverse photoelectron spectroscopy
IPTS	International Practical Temperature Scale
IR	infrared
IRAS	infrared absorption spectroscopy
IRS	infrared spectroscopy
IS	ionization spectroscopy
ISO	International Organization for Standardization
ISQ	International System of Quantities
ISS	ion scattering spectroscopy
ITS	International Temperature Scale
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry
IUPAP	International Union of Pure and Applied Physics
KS	Kohn-Sham
L	ligand
L2TOFMS	laser desorption laser photoionization time-of-flight mass spectroscopy
LASER	light amplification by stimulated emission of radiation
LC	liquid chromatography
LCAO	linear combination of atomic orbitals
L-CCA	linear coupled-cluster approximation
LCMO	linear combination of molecular orbitals
LED	light-emitting diode
LEED	low-energy electron diffraction
LEELS	low-energy electron energy-loss spectroscopy
LEES	low-energy electron scattering
LEF	laser excitation fluorescence
LEIS	low-energy ion scattering
LEPD	low-energy positron diffraction

LET	linear energy transfer
LH	Lindemann-Hinshelwood [theory]
LID	laser induced desorption
LIDAR	light detection and ranging
LIF	laser induced fluorescence
LIGS	laser induced grating spectroscopy
LIMA	laser microprobe mass analysis
LIS	laser isotope separation
LMR	laser magnetic resonance
LUMO	lowest unoccupied molecular orbital
M	central metal
MAR	magic-angle rotation
MAS	magic-angle spinning
MASER	microwave amplification by stimulated emission of radiation
MBE	molecular beam epitaxy
MBGF	many-body Green's function
MBPT	many-body perturbation theory
MC	Monte Carlo
MCA	multichannel analyser
MCD	magnetic circular dichroism
MCS	multichannel scaler
MCSCF	multiconfiguration self-consistent field
MD	molecular dynamics
MDS	metastable deexcitation spectroscopy
MEED	medium-energy electron diffraction
MEIS	medium-energy ion scattering
MFM	magnetic force microscopy
MINDO	modified incomplete neglect of differential overlap
MIR	mid-infrared
MKS	metre-kilogram-second
MKSA	metre-kilogram-second-ampere
MM	molecular mechanics
MO	molecular orbital
MOCVD	metal-organic chemical vapor deposition
MOMBE	metal-organic molecular beam epitaxy
MORD	magnetic optical rotatory dispersion
MOS	metal oxide semiconductor
mp (PF)	melting point
MPI	multiphoton ionization
MPPT	Møller-Plesset perturbation theory
MP-SCF	Møller-Plesset self-consistent field
MRD	magnetic rotatory dispersion
MRI	magnetic resonance imaging
MS	mass spectroscopy
MW	microwave
MW (PM)	molecular weight (symbol: M_r)
NAA	neutron activation analysis
NCE	normal calomel electrode
Nd:YAG	Nd doped YAG

NETD	noise equivalent temperature difference
NEXAFS	near edge X-ray absorption fine structure
NIR	near-infrared
NIR	non-ionizing radiation
NMA	nuclear microanalysis
NMR (RMN)	nuclear magnetic resonance
NOE	nuclear Overhauser effect
NQR	nuclear quadrupole resonance
NTP	normal temperature and pressure
od	outside diameter
ODMR	optically detected magnetic resonance
OGS	opto-galvanic spectroscopy
ORD	optical rotatory dispersion
PAS	photoacoustic spectroscopy
PC	paper chromatography
PD	photoelectron diffraction
PDG	Particle Data Group
PED	photoelectron diffraction
PEH	photoelectron holography
PES	photoelectron spectroscopy
PIES	Penning ionization electron spectroscopy, <i>vide</i> PIS
PIPECO	photoion-photoelectron coincidence [spectroscopy]
PIPN	periodically poled lithium niobate
PIS	Penning ionization (electron) spectroscopy
PMT	photomultiplier tube
ppb	part per billion
pphm	part per hundred million
ppm	part per million
PPP	Pariser-Parr-Pople
PS	<i>vide</i> PES
PSD	photon stimulated desorption
pzc (pcz)	point of zero charge
QET	quasi equilibrium theory
QMB	quartz microbalance
QMC	quantum Monte Carlo
QMS	quadrupole mass spectrometer
RADAR	radiowave detection and ranging
RBS	Rutherford (ion) back scattering
RD	rotatory dispersion
RDE	rotating disc electrode
RDF	radial distribution function
REM	reflection electron microscopy
REMPI	resonance enhanced multiphoton ionization
RF	radio frequency
RHEED	reflection high-energy electron diffraction
RHF	restricted Hartree-Fock
RIMS	resonant ionization mass spectroscopy

RKR	Rydberg-Klein-Rees [potential]
rms	root-mean-square
RRK	Rice-Ramsperger-Kassel [theory]
RRKM	Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus [theory]
RRS	resonance Raman spectroscopy
RS	Raman spectroscopy
RSPT	Rayleigh-Schrödinger perturbation theory
S	singlet
SACM	statistical adiabatic channel model
SAM	scanning Auger microscopy
SBS	stimulated Brillouin scattering
SBZ	surface Brillouin zone
SCE (ECS)	saturated calomel electrode
SCF	self-consistent field
SDCI	singly and doubly excited configuration interaction
SE	substitution electrophilic
SEELFS	surface extended energy-loss fine structure
SEFT	spin-echo Fourier transform
SEM (MEV)	scanning [reflection] electron microscopy
SEP	stimulated emission pumping
SERS	surface-enhanced Raman spectroscopy
SES	secondary electron spectroscopy
SESCA	scanning electron spectroscopy for chemical applications
SEXAFS	surface extended X-ray absorption fine structure
SF	spontaneous fission
SFG	sum-frequency generation
SHE (EHP)	standard hydrogen electrode
SHG	second-harmonic generation
SI	Système International d'Unités
SIMS	secondary ion mass spectroscopy
SMOKE	surface magneto-optic Kerr effect
S _N 1	substitution nucleophilic unimolecular
S _N 2	substitution nucleophilic bimolecular
S _N i	substitution nucleophilic intramolecular
SOC	spin-orbit coupling
SOR	synchrotron orbital radiation
SPIES	surface Penning ionization electron spectroscopy
SPLEED	spin-polarized low-energy electron diffraction
SPM	scanning probe microscopy
SR	synchrotron radiation
SRS	synchrotron radiation source
SSIMS	static secondary ion mass spectroscopy
STEM	scanning transmission [electron] microscopy
STM	scanning tunnelling (electron) microscopy
STO	Slater-type orbital
STP	standard temperature and pressure
SVLF	single vibronic level fluorescence

T	triplet
TCC	thermal conductivity cell
TCD	thermal conductivity detector
TCF	time correlation function
TDL	tunable diode laser
TDMS	tandem quadrupole mass spectroscopy
TDS	thermal desorption spectroscopy
TED	transmission electron diffraction
TEM	transmission electron microscopy
TG	thermogravimetry
TGA	thermogravimetric analysis
THEED	transmission high-energy electron diffraction
tlc (ccd)	thin layer chromatography
TOF	time-of-flight [analysis]
TPD	temperature programmed desorption
TPR	temperature programmed reaction
TR3	time-resolved resonance Raman scattering
TST	transition state theory
UHF	ultra high frequency
UHF	unrestricted Hartree-Fock
UHV	ultra high vacuum
UP[E]S	ultraviolet photoelectron spectroscopy
UV	ultraviolet
VB	valence bond
VCD	vibrational circular dichroism
VEELS	vibrational electron energy-loss spectroscopy
VHF	very high frequency
VIS	visible
VLEED	very-low-energy electron diffraction
VLSI	very large scale integration
VPC	vapor-phase chromatography
VSEPR	valence shell electron pair repulsion
VUV	vacuum ultraviolet
WFC	work function change
X	halogen
XAES	X-ray absorption fine structure
XANES	X-ray absorption near-edge structure [spectroscopy]
XAPS	X-ray appearance potential spectroscopy
XPD	X-ray photoelectron diffraction
XPES	X-ray photoelectron spectroscopy
XPS	X-ray photoelectron spectroscopy
XRD (DRX)	X-ray diffraction
XSW	X-ray standing wave
YAG	yttrium aluminium garnet
ZPE	zero point energy

10 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

10.1 Fontes primárias

- [1] Manual of Symbols and Terminology for Physicochemical Quantities and Units
 - (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 Sovetskikh Khimikov, Moscow, 1988.
 - (d) M. Riedel. *A Fizikai-kémiai Definíciók és Jelölések*. Tankönyvkiadó, Budapest, 1990.
 - (e) K. Kuchitsu. *Butsurikagaku de Mochirareru 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) also published in: *Physica*, 146A:1–67, 1987.

- [5] Normas Internacionais, ISO
 Organização Internacional de Normalização, Genebra, Suíça
- (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
 - (l) ISO 31-12: 1992, Quantities and units – Part 12: Characteristic numbers
 Amendment 1: 1998
 - (m) ISO 31-13: 1992, Quantities and units – Part 13: Solid state physics
 Amendment 1: 1998

As diferentes partes da ISO 31 foram substituídas, em 2009, pelas da 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

Todas as normas padrão aqui listadas ([5] e [6]) são reproduzidas conjuntamente na publicação *ISO Standards Handbook 2, Quantities and units*, ISO, Genebra, 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 Fontes secundárias

- [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, D. B. Newell, and B. N. Taylor. CODATA Recommended Values of the Fundamental Physical Constants: 2014. *Rev. Mod. Phys.*, 88:035009, 2016. Os valores recomendados pelo CODATA estão disponíveis diretamente em <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. Gas-teiger, 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. Thermochemistry*, 25:1351–1361, 1993.
- [85] The document CCT_05_33 is available at <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. Morfey. 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] C. Patrignani, K. Agashe, G. Aielli, C. Amsler, M. Antonelli, D. M. Asner, H. Baer, Sw. Banerjee, R. M. Barnett, T. Basaglia, C. W. Bauer, J. J. Beatty, V. I. Belousov, J. Beringer, S. Bethke, H. Bichsel, O. Biebel, E. Blucher, G. Brooijmans, O. Buchmueller, V. Burkert, M. A. Bychkov, R. N. Cahn, M. Carena, A. Ceccucci, A. Cerri, D. Chakraborty, M.-C. Chen, R. S. Chivukula, K. Copic, G. Cowan, O. Dahl, G. D’Ambrosio, T. Damour, D. de Florian, A. de Gouvêa, T. DeGrand, P. de Jong, G. Dissertori, B. A. Dobrescu, M. D’Onofrio, M. Doser, M. Drees, H. K. Dreiner, D. A. Dwyer, P. Eerola, S. Eidelman, J. Ellis, J. Erler, V. V. Ezhela, W. Fettscher, B. D. Fields, B. Foster, A. Freitas, H. Gallagher, L. Garren, H.-J. Gerber, G. Gerbier, T. Gershon, T. Gherghetta, A. A. Godizov, M. Goodman, C. Grab, A. V. Gritsan, C. Grojean, D. E. Groom, M. Grünewald, A. Gurtu, T. Gutsche, H. E. Haber, K. Hagiwara, C. Hanhart, S. Hashimoto, Y. Hayato, K. G. Hayes, A. Hebecker, B. Heltsley, J. J. Hernández-Rey, K. Hikasa, J. Hisano, A. Höcker, J. Holder, A. Holtkamp, J. Huston, T. Hyodo, K. Irwin, J. D. Jackson, K. F. Johnson, M. Kado, M. Karliner, U. F. Katz, S. R. Klein, E. Klempert, R. V. Kowalewski, F. Krauss, M. Kreps, B. Krusche, Yu. V. Kuyanov, Y. Kwon, O. Lahav, J. Laiho, P. Langacker, A. Liddle, Z. Ligeti, C.-J. Lin, C. Lippmann, T. M. Liss, L. Littenberg, K. S. Lugovsky, S. B. Lugovsky, A. Lusiani, Y. Makida, F. Maltoni, T. Mannel, A. V. Manohar, W. J. Marciano, A. D. Martin, A. Masoni, J. Matthews, U.-G. Meißner, D. Milstead, R. E. Mitchell, P. Molaro, K. Möning, F. Moortgat, M. J. Mortonson, H. Murayama, K. Nakamura, M. Narain, P. Nason, S. Navas, M. Neubert, P. Nevski, Y. Nir, K. A. Olive, S. Pagan Griso, J. Parsons, J. A. Peacock, M. Pennington, S. T. Petcov, V. A. Petrov, A. Piepke, A. Pomarol, A. Quadt, S. Raby, J. Rademacker, G. Raffelt, B. N. Ratcliff, P. Richardson, A. Ringwald, S. Roesler, S. Rolli, A. Romanouk, L. J. Rosenberg, J. L. Rosner, G. Rybka, R. A. Ryutin, C. T. Sachrajda, Y. Sakai, G. P. Salam, S. Sarkar, F. Sauli, O. Schneider, K. Scholberg, A. J. Schwartz, D. Scott, V. Sharma, S. R. Sharpe, T. Shutt, M. Silari, T. Sjöstrand, P. Skands, T. Skwarnicki, J. G. Smith, G. F. Smoot, S. Spanier, H. Spieler, C. Spiering, A. Stahl, S. L. Stone, Y. Sumino, T. Sumiyoshi, M. J. Syphers, F. Takahashi, M. Tanabashi, K. Terashi, J. Terning, R. S. Thorne, L. Tiator, M. Titov, N. P. Tkachenko, N. A. Törnqvist, D. Tovey, G. Valencia, R. VandeWater, N. Varelas, G. Venanzoni, M. G. Vincenter, P. Vogel, A. Vogt, S. P. Wakely, W. Walkowiak, C. W. Walter, D. Wands, D. R. Ward, M. O. Wascko, G. Weiglein, D. H. Weinberg, E. J. Weinberg, M. White, L. R. Wiencke, S. Willocq, C. G. Wohl, L. Wolfenstein, J. Womersley, C. L. Woody, R. L. Workman, W.-M. Yao, G. P. Zeller, O. V. Zenin, R.-Y. Zhu, F. Zimmermann, and P. A. Zyla Review of Particle Physics, Particle Data Group. *Chin. Phys. C*, 40:100001, 2016. Esta é a página web do Particle Data Group: <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 and T. B. Coplen. Inorganic Chemistry Division, Commission on Isotopic Abundances and Atomic Weights. Atomic Weights of the Elements 2009. *Pure Appl. Chem.*, 83:359–396, 2011.
- [140] J. Meija, T. B. Coplen, M. Berglund, W. A. Brand, P. de Bièvre, M. Gröning, N. E. Holden, J. Irrgeher, R. D. Loss, T. Walczyk and T. Prohaska. Inorganic Chemistry Division Committee, Commission on Isotopic Abundances and Atomic Weights. Atomic Weights of the Elements 2013. *Pure Appl. Chem.*, 88:265–291, 2016.
- [141] 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.
- [142] Standard Atomic Weight of Ytterbium Revised. *Chem. Int.*, 37(5–6):26, 2015.
- [143] J. Corish and G. M. Rosenblatt. Name and Symbol of the Element with Atomic Number 110. *Pure Appl. Chem.*, 75:1613–1615, 2003.
- [144] J. Corish and G. M. Rosenblatt. Name and Symbol of the Element with Atomic Number 111. *Pure Appl. Chem.*, 76:2101–2103, 2004.
- [145] K. Tatsumi and J. Corish. Name and Symbol of the Element with Atomic Number 112. *Pure Appl. Chem.*, 82:753–755, 2010.
- [146] R. D. Loss and J. Corish. Names and Symbols of the Elements with Atomic Numbers 114 and 116. *Pure Appl. Chem.*, 84:1669–1672, 2012.
- [147] L. Öhrström and J. Reedijk. Names and Symbols of the Elements with Atomic Numbers 113, 115, 117 and 118. *Pure Appl. Chem.*, 88:1225–1229, 2016.
- [148] 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.
- [149] G. Audi, F. G. Kondev, M. Wang, B. Pfeiffer, X. Sun, J. Blachot, and M. MacCormick. The NUBASE2012 Evaluation of Nuclear Properties. *Chin. Phys. C*, 36:1157–1286, 2012.
- [150] G. Audi, M. Wang, A. H. Wapstra, F. G. Kondev, M. MacCormick, X. Xu, and B. Pfeiffer. The AME2012 Atomic Mass Evaluation. (I). Evaluation of Input Data, Adjustment Procedures. *Chin. Phys. C*, 36:1287–1602, 2012.
- [151] M. Wang, G. Audi, A. H. Wapstra, F. G. Kondev, M. MacCormick, X. Xu, and B. Pfeiffer. The AME2012 Atomic Mass Evaluation. (II). Tables, Graphs and References. *Chin. Phys. C*, 36:1603–2014, 2012.
- [152] J. Meija, T. B. Coplen, M. Berglund, W. A. Brand, P. de Bièvre, M. Gröning, N. E. Holden, J. Irrgeher, R. D. Loss, T. Walczyk and T. Prohaska. Inorganic Chemistry Division Committee, Commission on Isotopic Abundances and Atomic Weights. Isotopic Compositions of the Elements 2013. *Pure Appl. Chem.*, 88:293–306, 2016.

- [153] 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. (Errata) *Pure Appl. Chem.*, 81:1535–1536, 2009.
- [154] 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.
- [155] N. J. Stone. Table of Nuclear Magnetic Dipole and Electric Quadrupole Moments. IAEA Nuclear Data Section, Vienna, 2014. O documento INDC(NDS)-0658 pode ser obtido em <https://www-nds.iaea.org/publications/indc/indc-nds-0658>.
- [156] N. J. Stone. Table of Nuclear Electric Quadrupole Moments. *Atomic Data and Nuclear Tables*, 111-112:1–28, 2016.
- [157] B. J. Jaramillo and R. Holdaway. *The Astronomical Almanac for the Year 2003*. U.S. Government Printing Office, Washington, 2003.
- [158] R. T. Birge. On Electric and Magnetic Units and Dimensions. *The American Physics Teacher*, 2:41–48, 1934.
- [159] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*, 2nd edition. John Wiley, New York, 1975.
- [160] E. A. Guggenheim. Names of Electrical Units. *Nature*, 148:751, 1941.
- [161] D. R. Lide Jr. Use of Abbreviations in the Chemical Literature. *Pure Appl. Chem.*, 52:2229–2232, 1980.
- [162] H. Q. Porter and D. W. Turner. A Descriptive Classification of the Electron Spectroscopies. *Pure Appl. Chem.*, 59:1343–1406, 1987.
- [163] N. Sheppard. English-Derived Abbreviations for Experimental Techniques in Surface Science and Chemical Spectroscopy. *Pure Appl. Chem.*, 63:887–893, 1991.
- [164] D. A. W. Wendisch. *Acronyms and Abbreviations in Molecular Spectroscopy*. Springer, Heidelberg, 1990.

11 ALFABETO GREGO

Romano	Itálico	Nome	Pronúncia e Equivalente Latina	Notas
A, α	A, α	alfa	A	
B, β	B, β	beta	B	
Γ , γ	Γ , γ	gama	G	
Δ , δ	Δ , δ	delta	D	
E, ε	E, ε , ϵ	épsilon (<i>Port.</i> : epsílon)	E	
Z, ζ	Z, ζ	zeta	Z	
H, η	H, η	eta	Ae, Ä, Ee	1
Θ , ϑ , θ	Θ , ϑ , θ	teta	Th	2
I, ι	I, ι	iota	I	
K, κ , κ	K, κ , κ	capa	K	2
Λ , λ	Λ , λ	lambda	L	
M, μ	M, μ	mi	M	
N, ν	N, ν	ni	N	
Ξ , ξ	Ξ , ξ	xi (<i>Port.</i> : csi)	X	
O, o	O, o	ômicron (<i>Port.</i> : ómicron)	O	
Π , π	Π , π	pi	P	
P, r	P, ρ	rô (<i>Port.</i> : ró)	R	
Σ , σ , ς	Σ , σ , ς	sigma	S	2, 3
T, τ	T, τ	tau	T	
Y, υ	Y, υ	upsilon, ípsilon	U, Y	
Φ , φ , ϕ	Φ , φ , ϕ	fi	Ph	2
X, χ	X, χ	qui	Ch	
Ψ , ψ	Ψ , ψ	psi	Ps	
Ω , ω	Ω , ω	ômega (<i>Port.</i> : ómega)	Oo	4

(1) A letra equivalente Latina, Ae, deve pronunciar-se como a letra Ä em Alemão. A pronúncia da letra η em Grego moderno pode soar como E, i longo (como “ee” na palavra Inglesa *cheese*), ou i breve (como na palavra Inglesa *lips*).

(2) Para as letras minúsculas teta, capa, sigma e fi, existem duas variantes. Por exemplo, em impressão, a segunda variante da letra teta minúscula é designada usualmente “varteta”.

(3) A segunda variante da letra minúscula sigma, em Grego só se usa no final das palavras.

(4) Ao contrário do que sucede no caso do ômicron (“o” breve), a letra grega ômega pronuncia-se como um “o” longo.

12 ÍNDICE DE SÍMBOLOS

Este índice lista símbolos para grandezas físicas, unidades, alguns operadores matemáticos selecionados, estados de agregação, processos e partículas. Os símbolos para os elementos químicos são fornecidos na Secção 6.2, p. 121. Subscritos e sobrescritos qualificativos etc. comumente estão omitidos desse índice, de modo que, por exemplo, os símbolos E_p para a energia potencial e E_{ae} para a afinidade eletrônica estão ambos indexados sob E para energia. Note-se que pode acontecer que um dado símbolo não conste numa dada página, mas apenas a grandeza física, unidade, etc., que lhe está associada. O alfabeto latino é indexado à frente do alfabeto grego, letras minúsculas à frente de maiúsculas, negrito à frente de itálico, e este por sua vez à frente de romano, e símbolos de uma só letra à frente dos de mais de uma letra. Quando se fornece mais de uma página de referência, usa-se impressão em negrito para indicar a referência geral (definidora). Valores numéricos para as grandezas correspondentes são indicados por impressão sublinhada. Nota: Eventuais variantes de ortografia, termos, expressões, etc. utilizadas em Portugal não estão explicitadas abaixo, mas, se for o caso, poderão ser vistas diretamente nas páginas indicadas (se necessário, consulte-se o índice dessas variantes, ao final do livro).

a	aceleração, 13 , 94, 143	A	constante de acoplamento spin-orbital, 27
a	vetor de translação fundamental, 46 , 83, 84	A	constante de van der Waals-Hamaker, 81
a*	vetor da/de rede recíproca, 46 , 84	A	constante rotacional, 27–29
<i>a</i>	área por molécula, 81 , 82	<i>A</i>	energia de Helmholtz, 60 , 61, 82
<i>a</i>	área superficial específica, 81	<i>A</i>	fator pré-exponencial, 67, 68
<i>a</i>	atividade, 61 – 63 , 74, 75, 76, 78, 79	<i>A</i>	número de núcleons, número de massa, 24 , 53, 126
<i>a</i>	coeficiente de absorção, 7, 41, 44, 45	A_H	coeficiente de Hall, 47
<i>a</i>	constante de acoplamento hiperfino, 30	Al	número de Alfvén, 86
<i>a</i>	difusividade térmica, 85	A_r	massa atômica relativa 51 , 121
<i>a</i>	dimensões da célula unitária, 46	A	ampere (unidade SI), 5, 89, 90 , 145, 149
<i>a</i>	parâmetros da equação de van der Waals, 61	\AA	notação de simetria, 34–37, 55
<i>a</i>	símbolo de Hermann-Mauguin, 48		rede cristalina de base centrada, 48
a_0	bohr (unidade de comprimento), <u>141</u>		angstrom (unidade de comprimento), 26, 29, 137 , <u>141</u>
a_0	raio de Bohr, 9, 19, 21, 24 , 26, 28, 99, 100, 101, <u>116</u> , 138, <u>141</u> , 151		
<i>a</i>	ano (unidade de tempo), 26, <u>143</u>	b	vetor de Burgers, 46
<i>a</i>	are (unidade de área), <u>142</u>	b	vetor de translação fundamental, 46 , 83, 84
<i>a</i>	átomo, 24 , 26	b*	vetor da/de rede recíproca, 46 , 84
<i>a</i>	atto (prefixo SI), 95	<i>b</i>	coeficiente de Tafel, 77
<i>a</i>	espécie adsorvida (subscrito), 58	<i>b</i>	dimensões da célula unitária, 46
<i>a</i>	notação de simetria, 35, 36	<i>b</i>	largura, 13
am	sólido amorfo, 58 , 59	<i>b</i>	molalidade, 52 , 53, 62, 63, 66 , 74, 79, 139
ap	aparente (sobrescrito), 64	<i>b</i>	parâmetro de impacto, 69
aq	solução aquosa, 58 , 59, 61, 79, 80, 102	<i>b</i>	parâmetros da equação de van der Waals, 61
at	atomização (subscrito), 63 , 65	<i>b</i>	parâmetros de assimetria de Wang, 27
abs	absorção (subscrito), 38	<i>b</i>	razão de mobilidade, 47
ads, a	adsorção (subscrito), 58, 63	<i>b</i>	símbolo de Hermann-Mauguin, 48
atm	atmosfera, 44, 66 , 137, <u>144</u>	<i>b</i>	barn (unidade de área), 126 , <u>142</u>
amagat	unidade amagat, <u>145</u>	<i>b</i>	notação de simetria, 35, 36
		<i>b</i>	bar (unidade de pressão), 52, 66, 137 , <u>144</u>
A	matriz de conservação,		
	matriz de fórmula, 57	B	densidade de fluxo magnético
A	potencial vetor magnético, 18 , 152–154		(indução magnética), 17 , 30, 85, 86, 147, 152–154
<i>A</i>	absorbância, 5, 40 , 41, 43, 44	<i>B</i>	absorbância neperiana, 40 , 41
A, \mathcal{A}	afinidade de reação, 62 , 64	<i>B</i>	coeficiente de Einstein, probabilidade de
<i>A</i>	afinidade eletrônica, 24		transição de Einstein, 39 , 41, 43
<i>A</i>	área, 13 , 14–17, 26, 38–40, 52, 53, 60, 75, 76, 81, 82, 81, 94, 142, 152	<i>B</i>	constante de van der Waals retardada, 81
<i>A</i>	coeficiente de absorção integrado, 41–45	<i>B</i>	constante rotacional, 27–29
<i>A</i>	coeficiente de Einstein, probabilidade de transição de Einstein, 39 , 41, 33	<i>B</i>	fator de Debye-Waller, 47
<i>A</i>	constante de acoplamento hiperfino, 30	<i>B</i>	segundo coeficiente do virial, 61
		<i>B</i>	susceptância, 17

B	bel (unidade de nível de potência), 96 , 103	d	densidade relativa, 14
B	rede cristalina de base centrada, 48	d	diâmetro de colisão, 68
Bi	biot (unidade de corrente elétrica), 141 , <u>145</u> , 150	d	diâmetro, distância, espessura, 13 , 15, 152
Bq	becquerel (unidade SI), 93 , <u>145</u>	d	distância entre planos da rede, 46
Btu	unidade térmica britânica (unidade de energia), <u>143</u>	d	deci (prefixo SI), 95
<i>c</i>	velocidade, 13 , 49, 94, 154	dB	dêuteron, 54, <u>119</u>
<i>c</i>	vetor de translação fundamental, 46	dil	dia (unidade de tempo), 96 , 142, <u>143</u>
<i>c*</i>	vetor de rede recíproca, 46 , 84	dlt	deca (prefixo SI), 95
<i>c</i>	capacidade calorífica específica (a pressão constante), 6 , 85, 86	dyn	decibel, <i>vide bel</i> (unidade de nível de potência), 96 , 104
<i>c</i>	concentração de quantidade, 4, 41, 42, 52 , 58, 62, 63, 66–72, 74, 76, 85, 86, 94, 137	D	diluição (subscrito), 63
<i>c</i>	dimensão da célula unitária, 46	D	deslocamento (subscrito), 63
<i>c</i>	símbolo de Hermann-Mauguin, 48	D	dina ou dine (unidade de força), 29, 140, <u>143</u> , 150
<i>c</i>	velocidade, 13 , 68, 85, 94, 97, 99	D	tensor de interação dipolar, 30
<i>c</i>	velocidade da luz em um meio, 38,	D	deslocamento elétrico, 16 , 147, 151, 152,
<i>c</i>	velocidade da luz no vácuo, 9, 13, 16, 24, 25, 27, 38 –43, 45, 47, 99, <u>115</u> , 116, 137, 140, 149, 151–154	D	154
<i>c</i>	primeira constante de radiação, 40, <u>116</u>	D	coeficiente de difusão, 47 , 48, 77, 85, 94
<i>c</i>	segunda constante de radiação, 40, <u>116</u>	D	coeficiente de difusão térmica, 85
<i>c</i>	centi (prefixo SI), 95	D	constante de acoplamento dipolar, 30
<i>c</i>	combustão (subscrito), 63 , 64, 65	D	constante de distorção centrífuga, 27
<i>c</i>	notação de simetria, 35, 36	D	dose absorvida de radiação, <u>145</u>
<i>c</i>	super-rede centrada, 83	D	energia de dissociação, 24 , 101
cd	candela (unidade SI), 38, 90, 92	Da	fator de Debye-Waller, 47
cd	fase condensada, 44, 45, 52, 58 , 61	e	debye (unidade de momento dipolar elétrico), 28 , 43, <u>147</u>
cr	cristalino, 58 , 59, 65	e	dalton (unidade de massa), 9, 24, 51, 96 , 98, <u>142</u>
cal	caloria (unidade de energia), 62 , <u>143</u>	e	vetor unitário, 13 , 85
ccc	concentração de coagulação crítica, 82	e	carga elementar, 9, 19–21, 24 –26, 28, 31,
cmc	concentração micelar crítica, 82	e	41, 47, 74, 96, 98–100, <u>115</u> , 145, 151
C	tensor de interação spin-rotação, 30	e	taxa de transferência, 40
<i>C</i>	capacidade calorífica, 5, 6, 8, 47, 59–51, 94, 144	e	tensão linear, 15
<i>C</i>	capacitância, 16 , 146, 152	eV	base de logaritmo natural, 8 , 104, 107, 110, 116
<i>C</i>	coeficiente de absorção integrado (fase condensada), 45	erg	elétron, 8, 54 , <u>119</u>
<i>C</i>	constante de força vibracional, 29	E	notação de simetria, 36
<i>C</i>	constante rotacional, 27–29	E	elétron-volt (unidade de energia) 9, 96, 98 , 138, <u>143</u>
<i>C</i>	densidade de número, concentração de número, 47, 48 , 52, 67–69, 72, 73, 85	E	erg (unidade de energia), 140, 141, <u>143</u> , 144, 148, 150
<i>C</i>	terceiro coeficiente do virial, 61	E	intensidade do campo elétrico, 8, 16 , 26, 28, 44, 47, 77, 95, 108, 140, 146, 152, 154
<i>C_n</i>	operador de simetria rotação de ordem n, 35	E	amplitude de espalhamento, 46
<i>Co</i>	número de Cowling, 86	E	diferença de potencial elétrico, 16 , 48, 78
C	coulomb (unidade SI), 93 , 140, 145	E	energia, 5, 14 , 15, 17, 20–25, 35, 36, 43, 47, 49, 60, 69–71, 99, 100, 138, 133, 146, 152, 153, 244
C	rede cristalina de base centrada, 48	E	energia de ativação, limiar de energia, 68 , 70
Ci	curie (unidade de radioatividade), <u>145</u>	E	força eletromotriz, potencial de célula, 16 , 93
Cl	clausius (unidade de entropia), <u>144</u>	E	força termoelétrica, 47 , 48
°C	grau Celsius (unidade SI), 60, 93 , 144	E	irradiância, 38, 39 , 94
<i>d</i>	constante de distorção centrífuga, 27	E	módulo de elasticidade, 15
<i>d</i>	degenerescência, peso estatístico, 28, 43, 49	E	operador de simetria identidade, 35
			potencial de célula, 75 , 78, 79
			potencial (eletroquímica), 75 , 76, 80

<i>E</i>	taxa de transferência, 40		28
E^*	operador de simetria inversão fixa no espaço, 34	<i>g</i>	degenerescência, peso estatístico, 28, 43 , 49
E_h	energia de Hartree, 9, 19, 21, 24, 99 , 100, 116 , 138, 143, 145, 151, 153	<i>g</i>	densidade (espectral) de modos vibracionais, 47
Eu	número de Euler, 86	g, g_e	fator <i>g</i> , 25, 29 , 30, 116
$E[x]$	valor esperado de <i>x</i> , 157	<i>g</i>	gás ou vapor, 58 , 65, 78
E	exa (prefixo SI), 95	<i>g</i>	grama (unidade de massa), 95, 142
E	grandeza de excesso (sobrescrito), 64	gr	notação de simetria gerade, 35, 36
E	notação de simetria, 34, 35	gal	grão (unidade de massa), 142
Ei	exabinário (prefixo para binário), 95	gon	galão (unidade de volume), 142
<i>f</i>		G	gon (unidade de ângulo), 142
<i>f</i>	coeficiente de atividade, 63 , 64, 74, 79	<i>G</i>	vetor da/de rede recíproca, 46 , 84
<i>f</i>	coeficiente de atrito dinâmico, 15	<i>G</i>	condutância (elétrica), 17 , 93
<i>f</i>	constante de força vibracional, 29	<i>G</i>	condutância térmica, 85
<i>f</i>	fator de espalhamento atômico, 46	<i>G</i>	constante gravitacional, 15, 116
<i>f</i>	finesse, 40	<i>G</i>	energia de Gibbs, 5, 6, 60 –62, 64, 70, 75
<i>f</i>	força do oscilador, 41	<i>G</i>	76, 78, 81
<i>f</i>	frequência, 13 , 30–32, 38–40, 45, 72, 85, 86, 92, 93, 135	<i>G</i>	módulo de cisalhamento, 15
<i>f</i>	fugacidade, 62 , 79	<i>G</i>	peso, 15
$f(c_x)$	função distribuição de velocidades, 49	<i>G</i>	secção de choque de absorção líquida
<i>f</i>	fase fluida, 58	<i>G</i>	integrada, 41–44
<i>f</i>	femto (prefixo SI), 95	G_F	termo vibracional, 27
<i>f</i>	fermi (unidade de comprimento), 141	Gr	constante de acoplamento de Fermi, 115
<i>f</i>	reação de formação (subscrito), 63 , 65	<i>G</i>	número de Grashof (transferência de massa), 86
<i>ft</i>	pé (unidade de comprimento), 141	<i>G</i>	gauss (unidade de densidade de fluxo magnético), 30, 147 , 148
<i>fus</i>	fusão (subscrito), 63	<i>G</i>	giga (prefixo SI), 95
F		<i>Gi</i>	gigabinário (prefixo para binário), 95
F	operador de Fock, 21 , 22, 23	<i>Gy</i>	gray (unidade SI), 93 , 145
F	força, 7, 14 –17, 91, 93, 99, 108, 143, 144, 149, 150, 152–154	Gal	gal (unidade de aceleração), 143
F	momento angular, 33	<i>h</i>	altura, 13
<i>F</i>	constante de Faraday, 74 –79, 115	<i>h</i>	coeficiente de transferência de calor, 85 , 86
<i>F</i>	constante de força vibracional, 29	<i>h</i>	espessura do filme, 81
<i>F</i>	energia de Helmholtz, 60	<i>h</i>	índice de Miller, 48 , 83, 84
<i>F</i>	fator de estrutura, 46	h, \hbar	constante de Planck ($\hbar = h/2\pi$), 8, 9, 19, 21, 24, 25, 27, 30–33, 38 –40, 42, 43, 45–47, 49, 69–72, 99, 100, 115 , 116, 137, 138, 151
<i>F</i>	fluênciia, 39	<i>h</i>	hecto (prefixo SI), 95
<i>F</i>	frequência, 30	<i>h</i>	hélion, 54 , 119
<i>F</i>	termo rotacional, 27	<i>h</i>	hora (unidade de tempo), 96 , 143
$F(c)$	função distribuição de velocidades, 49	<i>h</i>	hectare (unidade de área), 142
Fo	número de Fourier (transferência de massa), 86	<i>ha</i>	cavalo-força imperial (unidade de potência), 144
Fr	número de Froude, 86	<i>hp</i>	cavalo-força métrico (unidade de potência), 144
<i>F</i>	farad (unidade SI), 93 , 146	<i>hk</i>	intensidade de/do campo magnético, 17 , 94, 148, 151, 153, 154
<i>F</i>	notação de simetria, 34	H	dose equivalente, 145
<i>F</i>	rede cristalina de face centrada, 48	<i>H</i>	entalpia, 5, 6, 8, 59–62, 64, 69, 70
${}^\circ F$	grau Fahrenheit (unidade de temperatura), 144	<i>H</i>	fluênciia, 39
<i>Fr</i>	franklin (unidade de carga elétrica), 140 , 141, 145 , 150	<i>H</i>	função de Hamilton, hamiltoniano, 14 , 19 , 21, 22
g		<i>Ha</i>	integral de Coulomb, integral de ressonância, 20
<i>g</i>	vetor de uma rede recíproca, 84		número de Hartmann, 86
<i>g</i>	aceleração da gravidade, 13, 82 , 85, 86, 116 , 143		
<i>g</i>	constante de anarmonicidade vibracional,		

H	função de Heaviside, 49, 70, 71, 111	k	fator de expansão, 157–160
H	henry (unidade SI), 93 , 148	k	índice de absorção, 41, 44, 45
Hz	hertz (unidade SI), 6, 13, 30–32, 92, 93	k	índice de Miller, 48 , 73, 84
<i>i</i>	vetor unitário, 13	k	número quântico do momento angular (componente), 33
<i>i</i>	corrente elétrica, 16 , 76, 89, 90, 99, 145, 149, 150	k_D	número de onda angular de Debye, 47
<i>i</i>	operador de simetria inversão, 34, 35	k_d	coeficiente de transferência de massa, 77 , 85, 86
<i>i</i>	raiz quadrada de -1 , 19, 35, 46, 47, 103, 107, 111	k_H	constante da lei de Henry, 62 , 63
id	ideal (sobrescrito), 64	k_{rst}	constante de força vibracional, 29
in	polegada (unidade de comprimento), <u>141</u> , 134	k	kilo ou quilo (prefixo SI), 95
ir	irracional (sobrescrito), 151 , ver não racionalizado	kg	kilograma ou quilograma (unidade SI), 4, 90, 91 , 95, <u>142</u> , 149
imm	imersão (subscrito), 63	kp	kilolibra ou quilolibra (unidade de força), <u>143</u>
I	momento angular de spin nuclear, 25, 29– 32 , 126	K	katal, 93
<i>I</i>	corrente elétrica, 4, 16 , 17, 76, 89, 90, 99, 145, 149, 152, 153	K	kilograma-força ou quilograma-força (unidade de força), <u>143</u>
<i>I</i>	energia de ionização, 24	K	operador de troca, 21 , 22
<i>I</i>	força iônica, 63 , 74, 80	K	matriz (dos coeficientes) de velocidade, 71
<i>I</i>	intensidade, 4, 38 –41, 89, 90, 92	K	coeficiente de absorção, 41
<i>I</i>	momento de inércia, 14 , 27	K	coeficiente de transferência de calor, 85
<i>I</i>	secção de choque diferencial, 69	K	constante de equilíbrio, 62 , 63, 65
<i>I</i>	rede cristalina de corpo centrado, 48	K	energia cinética, 14 , 97, 98
<i>j</i>	densidade de corrente elétrica, 16 –18, 47, 76, 77, 94, 152–154	K_M	integral de troca, 21
<i>j</i>	densidade de fluxo de partículas, 47, 48	K_{AB}	módulo volumétrico, 15
<i>j</i>	momento angular vibracional interno, 33	Kn	número quântico de momento angular (componente), 33 , 34, 36, 37
<i>j</i>	vetor unitário, 13	K	constante de Michaelis, 71
J	densidade de corrente elétrica, 16 , 19, 76, 94	Ki	constante de acoplamento spin-spin nuclear reduzido, 31
<i>J</i>	momento angular, 33, 144	l	número de Knudsen, 86
<i>J</i>	operador de Coulomb, 21 , 22	l	kelvin (unidade SI), 3, 5, 44, 60, 90, 91 , 93, 144
<i>J</i>	vetor fluxo de calor, 47, 48	l	kilobinário (prefixo para binário), 95
<i>J</i>	densidade de fluxo, 85	l	momento angular de orbital eletrônico, 33 , 34
<i>J</i>	função de Massieu, 60	l	momento angular vibracional interno, 33
<i>J</i>	integral de coulomb, 20	l	comprimento, 4, 13 , 21, 46, 49, 57, 85, 86, 89–91, 107, 137, 141, 142, 149–151, 153
<i>J</i>	momento de inércia, 14	l	comprimento da cavidade, comprimento do percurso, 40, 41
<i>J</i>	número quântico do momento angular (componente), 33–35, 55, 70, 71, 99	l	índice de Miller, 48 , 83, 84
J_{AB}	constante de acoplamento spin-spin, 31	l	número quântico vibracional, 28, 33
J	joule (unidade SI), 6, 9, 31, 32, 93 , 97, 143	lb	percurso livre médio, 47, 48
k	vetor de onda angular, 47	lc	líquido, 58, 59, 65
k	vetor unitário, 13	lm	litro (unidade de volume), 6, 96, <u>142</u>
<i>k</i>	coeficiente de transferência de calor, 85	lx	libra (unidade de massa), <u>142</u>
<i>k</i>	condutividade térmica, 85 , 86, 94	l.y.	crystal líquido, 58
k, k_B	constante de Boltzmann, 40, 42, 43, 49, 50, 68–71, 85, <u>115</u> , 116, 139	L	lumen (unidade SI), 93
<i>k</i>	constante de decaimento, 26	<i>L</i>	lux (unidade SI), 93
<i>k</i>	constante de velocidade, coeficiente de velocidade, 67–73, 76	<i>L</i>	ano-luz (unidade de comprimento), <u>142</u>
			momento angular, 14, 27, 33 , 35, 144
			coeficiente de Lorenz, 47
			comprimento, 3, 4, 6, 13 , 21, 46, 49, 57, 85, 89–91, 96, 98, 99, 137, 141, 142,

	149–151, 153	M_r	massa molecular relativa, 51
L_D	comprimento de Debye, 81	M	notação para a matriz de uma super-rede, 83 , 84
L	comprimento de difusão, 47		número quântico de momento angular (componente), 33
L	constante de Avogadro, 9, 49 , 51, 58, 69, 72, 82, <u>115</u> , 116, 138	M	constante de Madelung, 47
L	função de Lagrange, lagrangiano, 14 , 49	M	número de Mach, 86
L	indutância, 18 , 93, 148, 153	Ma	mega (prefixo SI), 95
L	nível de potência, nível de campo, 103 , 104	M	milha náutica (unidade de comprimento), 96
L	número quântico de momento angular, 33, 35	M	molar (unidade de concentração), 52 , 53
L	radiâncias, 39	Mi	megabinário (prefixo para binário), 95
L	símbolo do termo, 121–125	Mx	maxwell (unidade de fluxo magnético), <u>147</u>
Le	número de Lewis, 86		
L	langmuir (unidade do produto pressão-tempo), 85	n	densidade de número, concentração de número, 47– 49 , 52, 53, 57, 58, 71, 75, 85, 139
L	litro (unidade de volume), 6, 96 , <u>142</u>	n	índice de refração, 38 , 41, 44, 45
L_{atm}	litro atmosfera (unidade de energia), <u>143</u>	n	número de carga de uma reação eletroquímica, 75 , 76
m	momento dipolar magnético, 17, 25 , 99, 126, 139, 148, 153	n	número de elétrons, 21
m	massa, 4, 6, 7, 9, 14 , 19, 24, 31, 49, 51 , 52, 68, 81, 85, 96, 97, 115, 119, 120, 139, 142, 149, 150	n	número quântico principal, 25
m^*	massa efetiva, 47	n	ordem de reflexão (Bragg), 46
m	mobilidade elétrica, 77		ordem de reação, 67, 70 , 76
m	molalidade, 52 , 53, 62, 63, 66, 74, 79, 139	n	quantidade de substância, quantidade química, 4–7, 49, 51, 52, 55, 57 , 60, 67, 75, 81, 82, 89, 90, 92, 93
m	número quântico de momento angular (componente), 30, 33	n	fase nemática, 58
m	ordem de reação, 67, 70 , 76	n	nano (prefixo SI), 95
m	símbolo de Hermann-Mauguin, 48		nêutron, 8, 24, 54 , <u>119</u>
m_u	constante de massa atômica, 24 , 51, 98, <u>115</u> , 121	N	momento angular, 33
m_e	massa do elétron, 9, 19, 21, 24, 25, 32, 41, 98 , 99 , 100, <u>115</u> , 138, 142	N	número de entidades, 6, 26, 46, 49 , 51, 81, 82, 93
m_n	massa do nêutron, <u>115</u>	N	número de estados, 48, 49, 71
m_p	massa do próton, 32, <u>115</u>	N	número de eventos, 13, 39
m_W	massa do boson W, <u>115</u>	N_A	número de medidas, 157
m_Z	massa do boson Z, <u>115</u>		número de nêutrons, 24 , 26
m	metro (unidade SI), 3, 6, 28, 31, 45, 57, 90, 91 , <u>141</u> , 149	N_E	constante de Avogadro, 9, 17, 41, 45, 47, 49 , 51, 58, 96, <u>115</u> , 121, 139
m	mini (prefixo SI), 95	Nu	densidade de estados, 47, 49 , 71
mi	milha (unidade de comprimento), <u>141</u>	N_ω	número de Nusselt (transferência de massa), 86
min	minuto (unidade de tempo), 96 , <u>142</u>	N	densidade (espectral) de modos vibracionais, 47 , 48
mis	mistura (subscrito), 63	N	newton (unidade SI), 93 , <u>143</u>
mol	mol (unidade SI), 4, 6, 43, 47, 48, 51, 57, 63, 90, 92 , 103	Np	núcleo, 24
mon	forma monomérica, 58	oz	neper, 9, 96 , 103, 104
$mmHg$	milímetro de mercúrio (unidade de pressão), <u>144</u>	Oe	onça (unidade de massa), <u>142</u>
M	magnetização, 17 , 31, 148, 153		oersted (unidade de intensidade de campo magnético), <u>148</u>
M	momento dipolar de transição, 29	p	momento dipolar elétrico, 17, 25, 28 , 43, 45, 99, 140, <u>147</u> , 152
M	torque, 14		momento, 14 , 19, 49
M_u	constante de massa molar, 51 , 121	p	densidade de número, concentração de número, 47, 48
M	excitância (ou emitância) radiante, 38 , 39	p	
M	indutância mútua, 18		
M	massa molar, 51 , 58, 63, 121, 139		

<i>p</i>	fração de população, 42 , 43	<i>q</i>	densidade de carga, 16 , 19, 25, 47, 48, 146
<i>p</i>	ordem de ligação, 20 , 22	<i>q</i>	fluxo de massa, 85
<i>p</i>	operador de simetria permutação, 34	<i>q</i>	função de partição, 43, 49 , 50, 70
<i>p</i>	pressão, 3, 5–9, 14 , 15, 41–43, 52, 58,	<i>q_D</i>	número de onda angular de Debye, 47
	60–62, 65–67, 76, 81, 85, 86, 93, 104,		
	137, 144	<i>q</i>	ordem de carga, 20
<i>p</i>	probabilidade, 49	Q	momento quadrupolar, 25, 26 , 31, 147
<i>p*</i>	operador de simetria permutação-inversão,	<i>Q</i>	calor, 60 , 61, 78, 85, 93
	34	<i>Q</i>	carga elétrica, 4, 16 , 17, 54, 74–76, 93,
<i>p</i>	pico (prefixo SI), 95	<i>Q_w</i>	99, 140, 145, 149, 151, 152, 154
<i>p</i>	próton, 8, 24, 54 , <u>119</u>	<i>Q</i>	carga eletrofraca (de um núcleo), 26
<i>p</i>	super-redes primitivas, 83	<i>Q</i>	coordenadas vibracionais normais, 29
<i>pc</i>	parsec (unidade de comprimento), <u>142</u>	<i>Q</i>	energia de desintegração, 26
ppcm	parte por cem milhões, 103	<i>Q</i>	energia radiante, 38
pcz	ponto de carga zero, 82	<i>Q</i>	fator de qualidade, 40
pH	pH, 5, 74, 79 , 80	<i>Q</i>	função de partição, 43, 49 , 50, 70
pie	ponto isoelétrico, 82	<i>Q</i>	quociente de reação, 62 , 64
pol	forma polimérica, 58	<i>Q</i>	rótulo ramo Q , 37
ppb	parte por bilhão, 103		
ppm	parte por milhão, 103	r	vetor posição, 13 , 16, 25, 46, 49, 100,
ppq	parte por quatrilhão, 103	<i>r</i>	108, 149, 151, 152
ppt	parte por trilhão, 103	<i>r</i>	coordenadas esféricas, 13 , 19, 21, 22, 100
psi	libras por polegada quadrada (unidade	<i>r</i>	coordenadas vibracionais internas, 29
	de pressão), <u>144</u>	<i>r</i>	distâncias interatômicas, 29 , 30, 101
		<i>r</i>	raio, 13 , 68, 74
P	matriz de densidade, 22, 50	<i>r</i>	velocidade de variação da concentração, 67
P	polarização dielétrica, 16 , 44, 152	<i>r</i>	reação (subscrito), 64
<i>P</i>	densidade de probabilidade, 19 , 157	rad	rad (unidade de dose absorvida de radiação), <u>145</u>
<i>P</i>	fluxo de calor, potência térmica, 61 , 85	rad	radiano (unidade SI), 9, 13, 31, 93 , 103, <u>142</u>
<i>P</i>	fluxo de energia sonora, 15	rem	rem (unidade de dose equivalente), <u>145</u>
<i>P</i>	operador de simetria permutação, 34	refl	reflexão (subscrito), 38
<i>P</i>	peso, 15		
<i>P</i>	polarização (volumétrica), 147	R	momento angular orbital nuclear, 33
<i>P</i>	potência, 14 , 24, 103, 104, 144	R	momento dipolar de transição, 29
<i>P</i>	potência (ou fluxo) radiante, 38 –40	R	vetor da/de rede, 46
<i>P</i>	pressão, 14 , 42, 52, 61, 62, 85, 93, 137, 144	R	vetor de posição de uma partícula, 46
<i>P</i>	probabilidade, 49 , 50, 69, 159, 160	<i>R_H</i>	coeficiente de Hall, 47
<i>P</i>	probabilidade de transição, 69	<i>R_∞</i>	constante de Rydberg, 24, 25, <u>116</u>
<i>P</i> *	operador de simetria permutação-inversão,	<i>R</i>	constante dos gases, 7, 42, 49 , 50, 58, 61–63, 64,
	34		65, 68–70, 75–78, 80, <u>115</u>
<i>Pe</i>	número de Péclet (transferência	<i>R</i>	coordenadas vibracionais internas, 29
	de massa), 86	<i>R</i>	poder de resolução, 40
<i>Pr</i>	número de Prandtl, 86	<i>R</i>	refletância, 40
<i>P</i>	notação de simetria, 55	<i>R</i>	refração molar, 41
<i>P</i>	peta (prefixo SI), 95	<i>R</i>	resistência elétrica, 17 , 93, 146
<i>P</i>	poise (unidade de viscosidade dinâmica),	<i>R</i>	resistência térmica, 85
	<u>144</u>	<i>R</i>	vetor posição, 46 , 47
<i>P</i>	primitiva (rede cristal), 48	<i>Ra</i>	número de Rayleigh, 86
<i>Pa</i>	pascal (unidade SI), 44, 52, 66, 93 , <u>144</u>	<i>Re</i>	número de Reynolds, 5, 86
<i>Pi</i>	petabinário (prefixo para binário), 95	<i>Rm</i> , <i>R_m</i>	número de Reynolds magnético, 86
		<i>R</i>	rede cristalina romboédrica, 48
q	gradiente do campo elétrico, 26 , 31 , 146	<i>R</i>	roentgen (unidade de exposição), 145
q	vetor de onda angular, 46, 47	<i>Ry</i>	rydberg (unidade de energia), <u>143</u>
<i>q</i>	calor, 60 , 78, 93	[°] <i>R</i>	grau Rankine (unidade de temperatura
<i>q</i>	coordenadas generalizadas, 13 , 14, 49		termodinâmica), <u>144</u>
	coordenadas vibracionais normais, 29		

<i>s</i>	momento angular spin eletrônico, 33	tr	transmissão (subscrito), 38
<i>s</i>	coeficiente de sedimentação, 81	trs	transição (subscrito), 63
<i>s</i>	comprimento do percurso, comprimento do arco, 13	T	constante de acoplamento hiperfino (tensor), 30
<i>s</i>	desvio padrão, 157 , 158	T	torque, 14
<i>s</i>	número de simetria, 50	<i>T</i>	energia cinética, 14 , 19, 97, 98
<i>s</i>	parâmetros de ordem, 46	<i>T</i>	período, intervalo de tempo característico, 13
<i>s</i>	solubilidade, 52 , 53	<i>T_C</i>	temperatura de Curie, 47
<i>s²</i>	variância, 157 , 158	<i>T_N</i>	temperatura de Néel, 47
<i>s</i>	segundo (unidade SI), 6, 31, 32, 38, 90, 91 , <i>T</i> 103, 143, 149, 150	<i>T</i>	temperatura termodinâmica, 3, 4, 6, 7, 39, 41, 43, 44, 47, 50, 58, 60 –63, 65, 66, 68–70, 75, 76, 78, 80, 81, 85, 86, 91, 93, 139, <u>144</u>
<i>s</i>	sólido, 58 , 78	<i>T</i>	tempo de relaxação, 13 , 25, 31, 47
<i>sr</i>	esferoradiano (unidade SI), 13, 93	<i>T</i>	termo total, termo eletrônico, 27, 137
<i>sln</i>	solução, 58	<i>T</i>	transmitância, 40
<i>sol</i>	solução (subscrito), 63	<i>T</i>	meia vida, 26 , 68, 120
<i>sub</i>	sublimação (subscrito), 63	<i>T_{1/2}</i>	tera (prefixo SI), 95
S	densidade de corrente de probabilidade, 19	<i>T</i>	tesla (unidade SI), 29, 30, 93 , <u>147</u>
S	matriz de espalhamento, 69	<i>T</i>	terabinário (prefixo para binário), 95
S	momento angular spin eletrônico, 27, 29 , 33 , 35	<i>Ti</i>	torr (unidade de pressão), 85, 137, <u>144</u>
S	operador de spin nuclear, 30 , 31	<i>u</i>	velocidade, 13 , 49, 94, 154
S	vetor de Poynting, 18 , 154	<i>u</i>	vetor de deslocamento, 46
<i>S</i>	ação, 14	<i>u</i>	função de Bloch, 47
<i>S</i>	área, 13 , 26, 38, 42, 82, 85, 94, 142	<i>u</i>	incerteza padrão estimada, 157–160
<i>S</i>	coeficiente de absorção integrado, 41 , 43, 44	<i>u</i>	índice de direção reticular, 48
<i>S</i>	coordenada vibracional de simetria, 29	<i>u</i>	mobilidade elétrica, 77
<i>S</i>	entropia, 5, 59–62, 64, 65, 67, 69, 70, 82, 94, 144, 145	<i>u</i>	velocidade, 13 , 85, 94, 97, 99
<i>S</i>	entropia estatística, 50	<i>u</i>	notação de simetria ungerade, 35, 36
<i>S</i>	integral de sobreposição, 20 , 22	<i>u</i>	unidade de massa atômica unificada, 9, 24, 51, 96 , 98, 116, 120, 121, 126, 142
<i>Sc</i>	número de Schmidt, 86	<i>ua</i>	unidade astronômica (unidade de comprimento), 9, 96 , <u>98</u> , 142
<i>Sh</i>	número de Sherwood, 86		
<i>S_n</i>	operador de simetria rotação-reflexão, 35	<i>U</i>	diferença de potencial elétrico, 16 , 17, 48, 78
<i>Sr</i>	número de Strouhal, 86	<i>U</i>	energia interna, 60–62, 65, 69
<i>St</i>	número de Stanton (transferência de massa), 86	<i>U</i>	incerteza expandida, 157–160
<i>S</i>	siemens (unidade SI), 93 , 138	<i>U</i>	potencial de célula, 75
<i>St</i>	stokes (unidade de viscosidade cinemática), <u>144</u>	<i>U</i>	potencial de eletrodo, 75
<i>Sv</i>	sievert (unidade SI), 93 , <u>145</u>	<i>v</i>	“unidade de enzima”, 93
<i>Sv</i>	svedberg (unidade de tempo), <u>143</u>	<i>v</i>	
<i>t</i>	espessura do filme, espessura da camada, 81	<i>v</i>	velocidade, 13 –16, 47, 49, 77, 94, 156
<i>t</i>	número de transporte, 77	<i>v</i>	índice de direção reticular, 48
<i>t</i>	temperatura Celsius, 42, 50, 60 , 93, 151, <u>144</u>	<i>v</i>	número quântico vibracional, 27 , 28, 36, 55
<i>t</i>	tempo, 4, 9, 13 , 15, 16, 26, 31, 38–40, 61, 67, 70–73, 76, 85, 86, 89–91, 96, 99, 103, 143, 149, 150	<i>vap</i>	velocidade, 13 , 85, 86, 97, 99
<i>t_{1/2}</i>	meia-vida, 26 , 68, 120	<i>V</i>	velocidade de reação, 67 , 68, 72, 73
<i>t</i>	tonelada (unidade de massa), 96, <u>142</u>	<i>V</i>	volume específico, volume, 6 , 13, 14, 94
<i>t</i>	trítion, 54 , <u>119</u> , 120	<i>V</i>	vaporização, (subscrito), 63
<i>tr</i>	ponto triplo (subscrito), 63		substância vítreia, 58
			energia potencial, 14 , 19, 25, 29, 31, 71, 100
			potencial elétrico, 16 , 79, 93, 146
			volume, 5–8, 13 –17, 25, 38, 41, 45, 47, 49, 51, 52, 58–61, 67–71, 85, 94, 96, 115,

V	139, 142, 145, 152, 153 volt (unidade SI), 9, 93 , 98, 140, <u>146</u>	Z	69 fator de compressão, 61 função de partição, 43, 49 , 50, 70 impedância, 17 , 74, <u>115</u> número de prótons, número atômico, 21, 24 –26, 53, 126
w	velocidade, 13 , 94, 156	Z	bóson Z, 115 , <u>119</u>
w	densidade de energia radiante, 38	Z	zetta (prefixo SI), 95
w	fração mássica, 51 , 53, 102, 103	Zi	zettabinário (prefixo para binário), 95
w	índice de uma direção reticular, 48		
w	trabalho, 14, 60 , 74, 93		
w	velocidade, 13 , 85, 99,		
W	energia radiante, 38 , 40	α	polarizabilidade elétrica, 26 , 99, 152
W	número de trajetórias de reação adiabáticas abertas, 71	α	absortividade, 40 , 41
W	número de estados, 49 , 71	α	ângulo da célula unitária, 46
We	número de Weber, 86	α	ângulo de rotação óptica, 41 , 42
W	peso, 15	α	ângulo plano, 13 , 42, 93, 96, 142
W	peso estatístico, degenerescência, 28, 49	α	coeficiente de absorção, 7, 40–42, 45
W	trabalho, 14 , 60 , 74, 93	α	coeficiente de expansão, 47, 60 , 85, 86
W	bóson W, 115 , <u>119</u>	α	coeficiente de transferência de calor, 85
W	watt (unidade SI), 38, 92, 93 , <u>144</u>	α	coeficiente de transferência eletroquímico, 77
Wb	weber (unidade SI), 93 , <u>147</u>	α	coeficientes sonoros (absorção), 15
x	constante de anarmonicidade vibracional, 28	α	constante de estrutura fina, 24 , 99, <u>115</u> , 150, 151
x	coordenada cartesiana, 13 , 19, 22	α	constante de Madelung, 47
x	coordenadas fracionárias, 46	α	função de onda de spin, 20 , 21, 31
x	fração molar, fração da quantidade, 52 , 62, 63, 65, 85, 102, 126, 139	α	grau de reação, 52
̄x	média, 157	α	integral de coulomb, 20 , 21
x	parâmetro de energia, 20	α	poder rotatório óptico, 41
X	reatância, 17	α	polarizabilidade 17, 26 , 45, 99, 140, 141, 147
X	unidade x, <u>141</u>	α	coeficiente de pressão relativa, 60
y	coordenada cartesiana, 13 , 19, 22	β	fase, 59, 74, 75, 82
y	coordenadas fracionárias, 46	β	partícula α, 8, 54 , <u>119</u>
y	fração molar (gas), 52 , 65	β	hiperpolarizabilidade, 17, 26 , 99
y	yocto (prefixo SI), 95	β	ângulo da célula unitária, 46
yd	jarda (unidade de comprimento), <u>141</u>	β	ângulo plano, 13 , 42, 93, 96, 142
Y	admitância (complexa), 17	β	coeficiente de pressão, 60
Y	função de Planck, 60	β	constante de van der Waals retardada, 81
Y	função harmónica esférica, 19 , 22	β	degenerescência, peso estatístico, 28, 49
Y	yotta (prefix SI), 95	β	integral de ressonância, 20
Yi	yottabinário (prefixo para binário), 95	β	função de onda de spin, 20 , 21, 31
z	coordenada cartesiana, 13 , 19, 22	γ	parâmetro do recíproco da energia (para substituir a temperatura), 50
z	coordenadas cilíndricas, 13	γ	fase, 59, 74, 75, 82
z	coordenadas fracionárias, 46	γ	partícula β, 54 , <u>119</u>
z	frequência de colisão, fator de frequência de colisões, 68, 69	γ	hiperpolarizabilidade, 17, 26 , 99
z	função de partição, 43, 49 , 50, 70	γ	ângulo da célula unitária, 46
z	número de carga, 21, 47, 53–55, 63, 74–78,	γ	ângulo plano, 13 , 42, 93, 96, 142
z	zepto (prefixo SI), 95	γ	coeficiente de atividade, 63 , 65, 74, 79, 80
Z	densidade de colisões, número de colisões,	γ	coeficiente de expansão volumétrica, 47 , 60 , 85

γ	parâmetro de Grüneisen, 47	
γ	razão das capacidades caloríficas, 60	ϑ
γ	razão giromagnética, 25, 29–31	ϑ
γ	tensão superficial, 14, 60, 81, 82, 85, 86, 94	ϑ
γ_p	razão giromagnética do próton, 116	
γ	fase, 82	θ
γ	fóton, 54, 72, 92, 119	θ
γ	gama (unidade de massa), 142	θ
Γ		θ
Γ	coeficiente de absorção integrado, 41, 43, 44	θ
Γ	concentração de excesso superficial, 52, 67, 81, 82	θ
Γ	largura de nível, largura de linha, 26, 72	θ
Γ	parâmetro de Grüneisen, 47	
Γ	função gama, 111	θ_w
δ		θ_w
δ	ângulo de perda, 17	
δ	coeficiente de decaimento, 9, 103	
δ	coeficiente sonoro (dissipação), 15	Θ
δ	constantes de distorção centrífuga, 27	Θ
δ	deslocamento ou desvio químico, 31	Θ
δ	espessura, 13, 77, 81	Θ
δ	função delta de Dirac, delta de Kronecker, 22, 25, 46, 110	Θ_D
δ	variação infinitesimal, 8	κ
Δ		κ
Δ	constantes de distorção centrífuga, 27	
Δ	efeito inercial, 27	κ
Δ	excesso de massa, 24	κ
Δ	notação de simetria, 34	κ
Δ	variação de uma grandeza extensiva, 64	κ
Δ	variação finita, 15, 37, 110	κ
ε		κ
ε	coeficiente de absorção molar (na base 10), 7, 41	
ε	emissividade, emitância, 39	
ε_F	energia de Fermi, 47	λ
ε	energia de orbital, 21	λ
ε	permissividade, 16, 44, 45, 94	λ
ε_0	permissividade do vácuo, constante elétrica, 16, 17, 26, 39, 41, 43–45, 47, 74, 99, 115, 140, 149–152	λ
ε	tensão linear, 15	λ
ε	função degrau unitário, função de Heaviside, 49, 71, 111	λ
ε	símbolo de Levi-Civita, 110	λ
ζ	constante zeta de Coriolis, 28, 33	Λ
ζ	magnetizabilidade, 25	Λ
ζ	parâmetro de blindagem, 22	Λ
ζ	potencial eletrocinético, 77	
η	intensificação nuclear Overhauser, 32	μ
η	sobrepotencial, 77	
η	viscosidade, 15, 85, 86, 144	μ
	ângulo plano, 13, 42, 93, 96, 142	
	coordenadas cilíndricas, 13	
	tensão volumétrica, 15	
	ângulo de Bragg, 46	
	ângulo de contato, 81	
	ângulo de espalhamento, 69	
	cobertura superficial, 81, 84	
	coordenada polar esférica, 13, 19, 22, 100	
	coordenada vibracional interna, 29	
	temperatura característica, 50	
	temperatura característica (de Weiss), 47	
	temperatura Celsius, 42, 43, 45, 50, 60, 65–68, 91, 135, 139	
	temperatura característica (de Weiss), 47	
	ângulo de mistura fraca, ângulo de Weinberg, 26, 115, 116	
	momento quadrupolar, 25, 26, 147	
	ângulo plano, 38, 39	
	temperatura, 60	
	temperatura característica, 50	
	temperatura de Debye, 47, 84	
	coeficiente de absorção molar neperiano, 41, 42	
	coeficiente de transmissão, 70	
	compressibilidade, 47, 60	
	condutividade, 7, 18, 77, 85, 86, 94, 138, 146, 153	
	parâmetro de assimetria, 27	
	razão das capacidades caloríficas, 60	
	susceptibilidade magnética, 17, 139, 148, 151, 153	
	viscosidade volumétrica, 85	
	tensor de condutividade térmica, 47	
	atividade absoluta, 50, 61, 62	
	comprimento de onda, 3, 38–42, 46–48, 137	
	condutividade molar de um íon, 58, 77	
	condutividade térmica, 47, 48, 85, 94	
	constante de decaimento, 26	
	constante de van der Waals, 81	
	lambda (unidade de volume), 142	
	número quântico de momento angular (componente), 33	
	percurso livre médio, 48, 69, 84, 85	
	condutividade molar, 7, 58, 77, 94, 138	
	número quântico de momento angular (componente), 33–35	
	momento dipolar elétrico, 17, 25, 28, 39, 43, 45, 99, 147, 152	
	coeficiente de atrito dinâmico, 15	

μ	coeficiente de Joule-Thomson, 61	π	razão entre o perímetro e o diâmetro de um círculo, 38–41, 46, 47, 49, 68, 69, 74, 99, 107, <u>116</u> , 140
μ	coeficiente de Thomson, 47		
μ	massa reduzida, 14 , 68–70, 100		
μ	média, 157	π	
μ	mobilidade, 47	Π	coeficiente de Peltier, 47
μ	mobilidade elétrica, 77	Π	pressão osmótica, 63
μ	momento dipolar magnético, 17, 25 , 99, 119, 126, 139, 148	Π	notação de simetria, 34–36
μ	permeabilidade 5, 17 , 85, 94	Π	produtório, 109
$\tilde{\mu}$	potencial eletroquímico, 75		
μ	potencial químico, 5, 6, 8, 47, 48, 50, 61 , 62, 64–66	ρ	matriz de densidade, 50
μ	viscosidade, 15 , 85	ρ	tensor de resistividade, 47
μ_0	permeabilidade do vácuo, constante magnética, 16, 17 , 30, <u>115</u> , 139, 149, 150, 153	ρ	coeficiente sonoro (reflexão), 15
μ_B	magnéton de Bohr, 25 , 29, 32, 99, <u>116</u> , 119, 139, 148	ρ	coordenadas cilíndricas, 13
μ_N	magnéton nuclear, 25 , 32, <u>116</u> , 120, 126, 148	ρ	densidade de carga, 16 , 19, 25, 47, 48, 146, 152–154
μ_e	momento magnético do elétron, 25 , <u>116</u> , 119	ρ_A	densidade de energia radiante, 38 , 94
μ_n	momento magnético do nêutron, 25 , 120	ρ	densidade de massa, concentração de massa, 6, 14, 15, 42, 52 , 55, 58, 85, 86, 102
μ_p	momento magnético do próton, 25 , <u>116</u> , 120	ρ	densidade de estados, 47, 49 , 71
μ	micro (prefixo SI), 95	σ	densidade superficial, 14
μ	micron (unidade de comprimento), <u>141</u>	σ	operador densidade, 50
μ	múon, 8, 54 , <u>119</u> , 120	σ	refletância, 40
ν	matriz de coeficientes estequiométricos, 57		resistividade, resistividade residual, 17, 47
ν_D	frequência de Debye, 47	σ	
ν	coeficiente estequiométrico, 52 , bb57, 62, 65, 67, 75–78	σ	tensor de condutividade, 47
ν_e	coeficiente estequiométrico do elétron numa reação de eletrodo, 75	σ	tensor de blindagem, 32
ν	frequência, 13 , 25, 27, 30, 31, 32, 38–40, 45, 72, 85, 92, 93, 135	σ	área por molécula, 81
ν	viscosidade cinemática, 15 , 94, 144	σ	condutividade, condutividade elétrica, 18 , 47, 48 , 77, 146
$\tilde{\nu}_D$	número de onda de Debye, 47	σ	constante de blindagem, 32
$\tilde{\nu}$	número de onda (no vácuo), 27 , 28, 38–43, 137	σ	constante de Stefan-Boltzmann, 39, <u>116</u>
ν	símbolo para estado vibracional, 36	σ	densidade de carga superficial, 6, 16, 75
ν_e	neutrino-elétron, 54 , <u>119</u>	σ	desvio padrão, 107, 157
ξ	constantes de acoplamento de Coriolis, 28	σ^2	operador densidade, 50
ξ	extensão da reação, avanço, 52 , 53, 57, 52, 64, 67, 72	σ	operador de simetria reflexão, 34, 35
ξ	magnetizabilidade, 25 , 99, 148, 143	Σ	número de onda, 38
Ξ	frequência de ressonância padronizada, 32	Σ	número de simetria, 50
Ξ	função de partição (ensemble grande canônico), 49		número quântico de spin (componente), 33, 36
π	momento angular vibracional interno, 33	τ	tensão do filme, 81
π	pressão superficial, 81	τ	somatório, 109
π	notação de simetria, 35, 36	τ	
			coeficiente de Thomson, 47
			coeficiente sonoro (transmissão), 15
			espessura da camada, 81
			intervalo de tempo característico,

τ	tempo de relaxação, 13, 47, 68	Ω	ângulo sólido, 13 , 38–40, 69, 93
τ	tempo de correlação, 32	Ω	frequência angular de nutação 30
τ	tensão de cisalhamento, 15 , 85	Ω	função de partição, 50
τ	transmitância, 40	Ω	número quântico de momento angular
τ	vida-média, tempo de vida, 26 , 47, 48, 68, 72, 119, 120	Ω	(componente), 33, 35
φ	ângulo plano, 13 , 42, 93, 96, 142	Ω	volume no espaço de fase, 49
φ	fluídez, 15	Ω	ohm, 93 , <u>146</u>
φ	fração volémica, 102, 103		
ϕ	coeficiente de fugacidade, 62	%	por cento, parte por cem, 102, 103
ϕ	coeficiente osmótico, 63	$\%$	por mil, parte por mil, 102, 103
ϕ_{rst}	constante de força vibracional, 29	\circ	grau (unidade de ângulo plano), 42, 96 , <u>142</u>
ϕ	coordenadas polares esféricas, 13 , 19, 22, 100	\circ , \circ	padrão (sobrescrito), 64 , 76
ϕ	fração volémica, 52 , 102, 103	'	minuto (unidade de ângulo plano), 96 , <u>142</u>
ϕ	função de onda, 19, 50	"	segundo (unidade de ângulo plano), 96 , <u>142</u>
ϕ_w	função trabalho, 84	*	conjuguado complexo, 111
ϕ	orbital molecular, 20–22	*	excitado, 54, 55
ϕ	potencial elétrico, 16 , 75, 93, 146, 152, 153	*	substância pura (sobrescrito), 64
ϕ	potencial elétrico interno, 74, 75	\dagger , \neq	complexo ativado (sobrescrito),
ϕ	rendimento quântico, 72	∞	estado de transição (sobrescrito), 64
Φ	energia potencial, 14 , 25	e	diluição infinita (sobrescrito), 64
Φ	fluxo de calor, potência térmica, 61 , 85	\circ	notação de simetria para paridade par, 35
Φ	fluxo magnético, 17 , 93, 147	[B]	notação de simetria para paridade ímpar, 35
Φ	função trabalho, 47 , 84	Δ_r	concentração de quantidade de B,
Φ	potência radiante, 38		concentração de B, 52 , 58, 73
Φ	rendimento quântico, 72		derivada com relação à extensão de uma
χ	tensor energia de interação quadrupolar, 26	$\dim(Q)$	reação, 62 , 64, 78
χ	constante de acoplamento quadrupolar, 31	∇	dimensão da grandeza Q , 4
χ	eletronegatividade, 24	$[\alpha]_\lambda^\theta$	nabla, 16–19, 21, 47, 85, 100, 111 , 152, 153
χ	orbital atômico/a, 20 , 20	[Q]	poder rotatório óptico específico, 41 , 42
χ	potencial elétrico superficial, 74		unidade da grandeza Q , 4
χ	susceptibilidade magnética, 17 , 139, 148, 151, 153		
χ_e	susceptibilidade elétrica, 16 , 151, 152		
χ_m	susceptibilidade magnética molar, 17 , 139, 148		
ψ	função de onda, 19, 21, 33, 47, 100		
ψ	potencial elétrico externo, 74		
Ψ	fluxo elétrico, 16		
Ψ	função de onda, 19, 50		
Ψ	determinante de Slater normalizado, 21		
ω	ângulo sólido, 13 , 38, 40, 69, 93		
ω	frequência angular, velocidade angular, 9, 13 , 25, 38, 93, 103		
ω_D	frequência angular de Debye, 47		
ω	degenerescência, peso estatístico, 28, 49		
ω	número de onda de uma vibração harmônica, 28,		

13 ÍNDICE DE VARIANTES EUROPEIAS

Este índice lista todas as variantes de ortografia, termos, expressões, etc. utilizadas em Portugal (vide o Prefácio à Tradução Portuguesa). As páginas referidas neste índice indicam a ocasião em que cada variante aparece pela primeira vez neste livro, surgindo então entre parênteses (em verde, na versão digital, ou em cinza, na versão impressa); por exemplo: (*Port.*: eletrão). Todas as variantes estão listadas no singular, mesmo que constem no plural. Por outro lado, se a variante é um adjetivo, está listada no gênero (*Port.*: género) em que consta pela primeira vez (exemplo: “atómica”).

- | | |
|------------------------------------|---------------------------|
| absorvância (absorvência), 5 | helião, 54 |
| aceite, ix | hidrogénio, 9 |
| acertada, 75 | hólvio, 123 |
| acrónimo, ix | homogéneo, 17 |
| amostra do elemento, 53 | ião, 17 |
| anião, 53 | interatómica, 28 |
| anómala, 121 | iónica, 53 |
| antímónio, 123 | isómero, 55 |
| antineutrão, 54 | isotopómera, 55 |
| antiprotão, 54 | kilómetro, 95 |
| antropogénico, 126 | magnetão, 25 |
| árgon, 8 | mnemómica, 8 |
| arsénio, 122 | mole, 4 |
| ástato, 124 | molibénio, 123 |
| astronómica, 9 | muão, 8 |
| atómica, ix | muónio, 54 |
| azoto, 55 | nanómetro, 3 |
| bilião, 102 | néon, 122 |
| bosão, 115 | neutrão, 8 |
| canónico, 50 | nipónio, 124 |
| capacidade térmica, 5 | nucleão, 53 |
| catião, 53 | oganessónio, 125 |
| célula, 40 | ómega, 185 |
| concentração de matéria, 4 | ómicron, 185 |
| crípton, 122 | orbital-spin, 21 |
| crómio, 122 | ósmio, 123 |
| csi, 185 | oxigénio, 51 |
| deuterão, 54 | ozono, 103 |
| diatómica, 24 | padrão de Lorentz, 153 |
| dine, 139 | permitividade, 16 |
| dispersão, 40 | pião, 119 |
| einsténio, 124 | plutónio, 124 |
| eléctrodo, 74 | poliatómica, 24 |
| eletrão, 8 | polónio, 124 |
| eletrão-volt, 9 | positrão, 54 |
| eletrónico, xii | positrónio, 120 |
| epónimo, 96 | protão, 8 |
| epsílon, 185 | quadrilião, 103 |
| espectrómetro, 30 | quantidade de matéria, 4 |
| esterradiano (estereorradiano), 13 | quilómetro, 95 |
| etilo, 9 | rádon ou radão, 124 |
| experiência, 76 | reactânciа, 17 |
| facto, ix | recolha, 40 |
| fenómeno, 74 | registado, ix |
| fonão, 48 | rénio, 123 |
| fotão, 38 | ró, 185 |
| fotónica, 38 | roentgénio, 124 |
| gaussiana, 22 | ruténio, 123 |
| género, 203 | secção reta ou eficaz, 26 |
| harmónica, 19 | selénio, 122 |

sinónimo, 57
trilião, 102
tritão, 54
tungsténio, 123
um diferencial não exato, 60
utilizador, ix
valor próprio, 31
vibrónica, 36
xenón, 123
zircónio, 123

14 ÍNDICE REMISSIVO

Quando mais de uma página de referência for informada, usa-se negrito para indicar a referência geral (que define). Usa-se sublinhado para indicar um registro numérico da respectiva grandeza física. Letras gregas estão ordenadas conforme são soletradas, e acentos são ignorados na ordem alfabética. Formas no plural são listadas na forma singular, sempre que apropriado.

ab initio, 20
abcoulomb, 145
abreviações, 161, 163–170
absorbância, **40**, 43, 44
 na base 10, 5, **40**, 41
 neperiana, 41, **41**
absorção, 36, 39, **41**, 42, 45
 atômica
 espectroscopia de, 102
 banda de, 41, 45
 coeficiente de, 7, 40, 41, 44, 45
 (linear) na base 10, 41
 (linear) neperiano, 41
 molar (na base 10), 41
 molar neperiano, 41
 neperiano, 42
de espécies, 81
de fótons
 velocidade de, 72
espectral, 42, 44
espectro de, 40
espectroscópica
 intensidade de, 44
fator de, 40
índice de, 41
integrada
 secção de choque de, 42
intensidade de, 42–44
linha de, 41
 lorentziana, 72
líquida, 42
 secção de choque de, 42
molar na base 10
 coeficiente de, 41
percurso óptico de, 41
 secção de choque de, 41
absortividade, 40, **40**
 interna, 40
absorvente sólido, 81
abundância isotópica, 126
 dos elementos, **121**
 natural, 53
ação, **14**, 99, 144
 unidade atômica de, 144

aceitador, 48
 energia de ionização do, 47
aceleração, **13**, 94, 143
 da gravidade, 13, 82, 85
 da gravidade padrão, 116, 143
 de centrifugação, 82
acoplamento
 constante de, 30
 constante reduzida, 31
 de Coriolis
 constante de, 28
 de Fermi
 constante de, 115
dipolar
 constante de, 30
hiperfino
 constante de, 30
 hamiltoniano de, 30
indireto de spin
 tensor de, 30
quadrupolar
 constante de, 31
spin-orbital
 constante de, 27
spin-rotação
 constante de, 30
spin-spin nuclear, 31
spin-spin nuclear reduzido
 constante de, 31
via de, 31
acre, 142
acrônimos, 161, 163–170
Acústica, 15
acústica, 14, 103, 104
adimensional, 13
admitância (complexa), 17
adsorção, 82
 reduzida, 82
 relativa, 82
 símbolo (subscrito) para, 63
afinidade, 62
 de reação, **62**, 64
 eletrônica, 24
agregação

estado de, 57, **58**
alfabeto grego, 185
Alfvén
 número de, 86
álgebra de grandezas, 3, 135, 137–140
alongamento relativo, 15
alta energia, 38
 estado de, 36
altura, 13
amagat, 145
 recíproco, 145
Ampère
 lei de, 153
ampere, 4, 89, 90, **91**, 145, 149
amplificador de potência, 104
amplitude, 8, 103
 de espalhamento, 46
 de sinal
 nível de, 103
análise
 de variância (ANOVA), 158
dimensional, 97, 100
espectrométrica, 39
estatística, 158
anarmonicidade vibracional
 constante de, 28
angstrom, **29**, **137**, 141
ângulo, 38
 da célula unitária, 46
 da célula unitária recíproca, 46
 de Bragg, **46**
 de contato, 81
 de espalhamento, 69
 de mistura fraca, **26**, 115
 de perda, **17**
 de rotação, 83
 de rotação óptica, **41**, 42
plano, **13**, 42, 93, 96, 142
plano (grau), **96**, 142
plano (minuto), **96**, 142
plano (segundo), **96**, 142
sólido, **13**, 38, 40, 69, 93
ânion
 número de, 74
ano, 26, 143
 gregoriano, 143
 juliano, 142, 143
 maia, 143
 tropical, 143
ano-luz, 142
ânodo, 79
ANOVA, 158
anticomutador, 20
antineutrino, 54
antineutrino do elétron, 54, 119
antipartícula, 119
antiproton, 54
aparente (sobrescrito), 64
aproximação harmônica dupla, 45
arco
 comprimento do, 13
are, 142
área, 6, **13**, 26, 38–40, 69, 82, 85, 94, 142, 152, 153
 do filme, 82
 do momento quadrupolar elétrico, 126
 do quadrupolo, 147
 do quadrupolo nuclear, 28
infinitesimal, **13**
 por molécula, 81, 82
superficial, 53, 75, 82
 específica, **81**
vetor elemento de, 16
areico (uso deste adjetivo), 6
arranjo
 eletrônico, 56
 escalonado, 55
 estrutural, 55
assimetria
 parâmetro de, 27
Astronomia, 98
ativação
 energia de (Arrhenius), **68**
 energia de Gibbs de
 padrão, **70**
 energia interna de
 padrão, 69
 entalpia de
 padrão, **69**
 entropia de
 padrão, 70
 volume de, **69**
atividade, 61, 64, 74, 76, 79
 absoluta, 50, **61**
 catalítica, 93
 coeficiente de, 62, **63**, 74, 79
 de eletrólito, **74**
 de íons hidrogênio, 79
 dependência com a pressão, 61
 iônica média, **74**

coeficiente de, 74
radioativa, 26, 93, 145
relativa, 61, 75
unitária, 79
atmosfera, 137
litro, 143
padrão, 66, 115, 144
atomização, 65
energia (interna) de, 65
atomização (subscrito), 63
átomo
carga eletrônica do, 20
configuração eletrônica, 36
estado eletrônico do, 35
hidrogenóide, 25
massa do, 24
atrito dinâmico
coeficiente de, 15
atto, 95
autofunção, 49
autoindutância, 18, 148, 153
avaliação
de massa atômica, 126
de tipo A, 158
de tipo B, 158, 159
NUBASE, 126
avanço, 52
Avogadro
constante de, 4, 9, 49, 51, 58, 115
avoirdupois, 142

baixa energia
estado de, 36
banda
de absorção, 41, 45
intensidade integrada líquida de, 43
intensidade de, 29, 41–44
proibida
energia da, 47
quente, 36
rotacional, 37
bar, 52, 66, 137, 144, 249
barn, 126, 142
barreira
de energia eletrônica, 68
de potencial, 98
barril (US), 142
base
de logaritmo natural, 8
grandeza de, 4, 89, 90
unidade de, 4, 89–91, 95, 141, 149, 150
Bates-Guggenheim
convenção de, 80
becquerel, 93, 145
Beer-Lambert
lei de, 39, 40
bel, 96, 103, 104, 104
bilhão, 103
Bioquímica, 66
biosensor eletroquímico, 74
biot, 141, 145, 150
Biot-Savart
lei de, 152
BIPM, 5, 9
blindagem
constante de, 32
de Debye
comprimento de, 82
tensor de, 32
Bloch
função de, 47
Bohr
magnéton de, 25, 32, 99, 116, 119, 139, 148
raio de, 24, 116
bohr, 141, 151
Boltzmann
constante de, 40, 49, 50, 68, 115
bóson
de calibre, 119
de gauge, 119
W, 115, 119
Z, 115, 119
cálculo de grandezas, 137
calor, 60, 78, 93
fluxo de, 85
caloria
a 15 °C, 143
internacional, 143
termoquímica, 62, 143
camada
difusa
comprimento de Debye da, 81
espessura da, 77
dipolar, 74
espessura de, 81
interfacial, 81, 82
superficial, 81, 81
campo, 103
central de Coulomb, 25

elétrico, 26, 99, 108, 152
 componente do, 26
 gradiente do, 31, 146
 intensidade do, 16, 26, 28, 77, 94, 140, 146,
 151–153
 tensor gradiente do, 26
escalar
 gradiente de, 111
local de Lorentz, 44
magnético, 17, 32, 147
 intensidade do, 17, 94, 148, 153
 vide - densidade de fluxo magnético, 17
nível de, 103, 104
tensor gradiente de, 31
vetorial
 divergência de, 111
 rotacional de, 111
candela, 38, 89, 90, 92
capacidade
 calorífica, 5, 60, 94, 144
 específica, 94
 molar, 94, 145
 razão de, 60
calorífica (a pressão constante), 5, 6, 8, 60
 específica, 6, 85, 94
calorífica (a volume constante), 8, 47, 59, 60
capacitância, 16, 146, 152
 elétrica, 93
carga, 16, 19, 21, 48, 75, 76, 79, 99, 119, 154
 areica, 6
 densidade de, 16, 19, 25, 47, 48, 146
 distribuição de, 152
 do elétron, 19
 do próton, 24, 74
 do próton (ua), 145
 efetiva, 22
 elementar, 8, 9, 24, 26, 28, 74, 98–100, 115
 unidade da, 151
elétrica, 4, 16, 54, 74, 93, 140, 141, 145, 150
 densidade de, 94
eletrofraca, 26
eletrônica, 20
 densidade de, 19
iônica, 77
 número de, 53
número de, 21, 53–55, 74, 75, 77, 119
ordem de, 20
partição de, 78
pontual, 17
reduzida, 100
superficial
 densidade de, 6, 16, 75
 transferência de, 75, 76
 unidade eletrostática de, 141, 150
zero
 ponto de, 82
catálise enzimática, 71
cátion
 número de, 74
cátodo, 79
cavalo-força imperial, 144
cavalo-força métrico, 144
cavidade, 40
 de Fabry-Perot, 40
 de laser, 40
 modos longitudinais da, 40
CAWIA, 121, 126
Celsius
 grau (unidade SI), 144
 temperatura, 42, 50, 60, 93, 144
 zero da escala, 115
célula
 de Harned, 80
 diagrama de, 75, 76, 78
 eletrolítica, 77, 79
 eletroquímica, 57, 75, 77, 78, 79
 diferença de potencial, 75, 78
 reação de, 57, 78
 representação de, 78
 voltagem da, 75
 galvânica, 77, 79
 potencial de, 16, 75
 padrão, 78
 sem transferência, 80
unitária, 46
 2D, 83
 ângulo da, 46
 centrossimétrica, 17
 dimensão da, 46
 unitária recíproca
 ângulo da, 46
 dimensão da, 46
centi, 95
centímetro, 140, 141, 150
centipoise, 144
centrifugação
 aceleração de, 82
centro de massa, 34
certeza
 grau de, 107

- CGPM, xiii, **89**, 91, 92, 96
 ciclos por segundo, 93
 Ciéncia dos Polímeros, 52
 cinética, 36, 54, **67**
 - de primeira ordem generalizada, 71
 Cinética Química, 67, 72
 CIPM, **9**, 60, 91, 92, 98
 circuito de corrente, 153
 cisalhamento
 - módulo de, 15
 - tensão de, 15, 85
 - viscosidade de, 94
 clausius, [144](#)
 Clausius-Mossotti
 - fórmula de, 44
 coagulação
 - concentração (crítica) de, 82
 cobertura superficial, **81**, 84
 CODATA, **99**, 115, 119
 coeficiente
 - binomial, 109
 - de absorção, 7, 39–41, 44, 45
 - (linear) na base 10, **41**
 - (linear) neperiano, **41**
 - integrado, **41**, 43–45
 - líquido, 41
 - molar, 7
 - molar (na base 10), **41**
 - molar neperiano, **41**
 - neperiano, 42
 - de absorção (radiação), 15
 - de absorção (sonora), 15
 - de atividade, 62, **63**, 74, 79
 - com base em concentração, **63**
 - com base em fração molar, **63**
 - com base em molalidade, **63**
 - do ânion, 74
 - do cátion, 74
 - iônica média, **74**
 - referenciado à lei de Henry, **63**
 - referenciado à lei de Raoult, **63**
 - de atrito dinâmico, 15
 - de decaimento, 8, **103**
 - de difusão, **47**, 48, 77, 85, **85**, 94
 - de difusão térmica, **85**
 - de dissipação (sonora), 15
 - de Einstein, **39**, 41, 43
 - de expansão linear, **60**
 - de expansão térmica, 61
 - de expansão volumétrica, 47, **60**, 85- de expansibilidade, 61
- de extinção, 41
- de fugacidade, **62**
- de Hall, **47**
- de Joule-Thomson, **61**
- de Lorenz, **47**
- de Nernst, 80
- de Peltier, **47**
- de pressão, **60**
 - relativa, **60**
- de reflexão (sonora), 15
- de sedimentação, **81**
 - limite, 82
 - reduzido, 82
 - reduzido limite, 82
- de Tafel, **77**
- de Thomson, **47**
- de transferência, **77**
 - anódico, **77**
 - catódico, **77**
 - de calor, **85**
 - de massa, **77**, 85
- de transmissão, **70**
- de transmissão (sonora), 15
- de velocidade, vide 71
- do virial
 - de pressão, 61
 - segundo, **61**
 - terceiro, **61**
- estequiométrico, 52, 53, 56, **57**, 64, 65, 75, 76, 79
- matriz de, 57
- osmótico
 - com base em fração molar, **63**
 - com base em molalidade, **63**
 - sonoro, 15
- coleta de luz
 - poder de, **40**
- colisão, 69
- densidade de
 - de A com A, **69**
 - de A com B, **69**
- diâmetro de, **68**
- energia de, 70
- energia translacional de, 69
- entre três corpos, 69
- frequênciade
 - de A com A, **69**
 - de A com B, **69**
- individual, 69

número total, 69
secção de choque de, **68**

Coloides
Química de, 81, 82
combinações lineares de funções
de base, 22
combustão, 64
complexo
ativado (sobrescrito), 64
conjugado, 19
enzima-substrato, 71
número, 111
componente
cartesiana, 111
do momento angular, 33
fixa na molécula, **33**
número quântico da, 33
no espaço, **33**, 39
principal, 31
composição
de misturas, 52, 58
isotópica, **55**, 121, 125
dos elementos, 126–133
terrestre característica, 121, 125
química, 51, **55**, 75
relativa, 53
composto químico
nome de, 8
compressão
fator de, **61**
compressibilidade
fator de, **61**
isentrópica, **60**
isotérmica, 47, **60**
módulo de, **15**
comprimento, 3, 4, 6, **13**, 20, 46, 49, 57, 85, 89–91, 96, 98, 99, 137, 141, 142, 149–151, 153
de blindagem de Debye, 82
de Debye
característico, 82
da camada difusa, **81**
de difusão, **47**
de dipolo, **28**, 147
de dipolo elétrico, 28
de ligação
de equilíbrio, 101
de onda, 3, 38–40, 42, 46, 48, 137
de corte de Debye, 47
de transição, 41
inverso do, **27**, 94
recíproco, 94
do arco, 13
do percurso, 13, 40
comutador, 20
concentração, 42, **52**, 62, 65, 66, 68, 70, 74, 76, 77, 94, 138
coeficiente de atividade em, 63
de coagulação crítica, 82
de excesso superficial
de B, **81**, 82
reduzido, 82
relativo, 82
total, **81**
de massa, 42, **52**, 102
de matéria, 4
de número, 47, **49**, **52**, 67, 68
velocidade de reação com base em, **67**
de quantidade, 4, 41, 42, **52**, 58, 67, 85, 94
velocidade de reação com base em, **67**
de quantidade de substância, 4, 6, 41, 42, **52**, 94
do estado excitado, 72
força iônica com base em, **63**, **74**
iônica média, 74
micelar crítica, 82
na interfase, 76
padrão, **66**, 76
superficial, **52**, 67, 81
superficial relativa em excesso, 82
velocidade de variação da, **67**
vetor, **71**
condições fisiológicas, 66
condições padrão, 61, **65**, **66**, 76
condutância, **17**
elétrica, 93
específica, 77
térmica, **85**
condutividade, 7, **18**, 77, 94, 138, 146, 153
elétrica, 48, 85
equivalente, 77
iônica, 58, **77**
molar, 7, 58, **77**, 94, 138
de um íon, **77**
molecular (de entidades equivalentes), 77
tensor de, 47
térmica, 48, **85**, 94
tensor de, 47
condutor, 91, 149
de elétrons, 77, 78

iônico, 77, 78
metálico, 78
conectividade
fórmula de, 55
confiança
nível de, 157, 159
configuração eletrônica, 8, 35, 36
conjugado
complexo, 111
hermitiano, 20, 111
transposto, 111
conjunto, 70
canônico, 50
completo de unidades SI, 89
de unidades coerente, 89
grande canônico, 50
microcanônico, 50
conservação
matriz de, 57
constante
da lei de Henry, 62
de (velocidade de) desintegração, 26
de acoplamento, 30
de Coriolis, 28
de Fermi, 115
dipolar entre núcleos A e B, 30
hiperfino em líquidos, 30
hiperfino em sólidos, 30
quadrupolar nuclear, 31
reduzida, 31
spin-orbital, 27
spin-rotação do núcleo, 30
spin-spin nuclear reduzido, 31
de anarmonicidade vibracional, 28
de Avogadro, 4, 9, 49, 51, 58, 115
de blindagem, 32
de Boltzmann, 40, 49, 50, 68, 115
de decaimento, 26
de desintegração, 26
de distorção centrífuga, 27
de equilíbrio, 62
com base em concentração, 62
com base em fugacidade, 62
com base em molalidade, 62
com base em pressão, 62
de dissociação da água, 62
de dissociação de um ácido, 62
de dissolução, 62
de hidrólise de uma base, 62
padrão, 61, 62, 64
termodinâmica, 62
de estrutura fina, 24, 99, 115, 150, 151
de Faraday, 74, 115
de força, 29
de força vibracional
diatômica, 29
poliatômica, 29
de Loschmidt, vide 49
de Madelung, 47
de massa atômica, 24, 51, 115, 121
de massa molar, 51, 121
de Michaelis, 71
de movimento, 71
de Planck, 7, 24, 38, 115
dividida por 2π , 24, 38, 99, 115, 151
de radiação
primeira, 40, 116
segunda, 40, 116
de Rydberg, 24, 116
de Stefan-Boltzmann, 39, 116
de tempo, 13
de van der Waals, 81
de van der Waals retardada, 81
de van der Waals-Hamaker, 81
de velocidade, 67, 68–70, 73
de decaimento, 26
de fluorescência, 72
de oxidação, 76
de pré-dissociação, 72
de primeira ordem, 70, 71
de reação de ordem n , 70
de reação unimolecular (alta pressão), 68, 70, 71
de reação unimolecular (baixa pressão), 68
de redução, 76
de segunda ordem, 68
de velocidade específica
para reação bimolecular, 70
para reação unimolecular, 70
dielétrica, 16
dos gases (molar), 49, 115
elétrica, 16, 115, 149
física fundamental, xi, 9, 98–100, 115, 116, 119, 139
gravitacional, 15
heliocêntrica, 96, 98
hamiltoniana efetiva, 28
magnética, 17, 115, 149
matemática, 7, 107, 116
microscópica natural, 91

molar dos gases, 49, [115](#)
 newtoniana da gravitação, [116](#)
 rotacional, 27–29
 em frequência, **27**
 em número de onda, **27**
 ζ de Coriolis, **28**, 33
 contato
 ângulo de, 81
 convenção
 de Bates-Guggenheim, 80
 de Estocolmo, 77
 convenções em termodinâmica química, 63
 conversão
 de unidades, 135
 foto-eletroquímica de energia, 74
 velocidade de, **67**, 72, 93
 convolução das funções f e g , 111
 coordenada, 19, 46, 150
 de simetria, 29
 cartesiana (espacial), **13**, 22
 cilíndrica, 13
 com dimensão de comprimento, 46
 de deformação angular, 29
 de elongação, 29
 de estiramento, 29
 do elétron, **21**, 100
 esférica do elétron, 100
 espacial cartesiana, **13**
 fixa na molécula, 35
 fixa no espaço, 34
 fracionária, **46**
 generalizada, **13**, 14, 49
 interna, 29
 normal, 29
 normal adimensional, 29
 perpendicular à superfície, 84
 polar esférica, 13, 22
 vibracional
 de simetria, **29**
 interna, **29**
 normal, 29
 normal adimensional, **29**
 normal ponderada pela massa, **29**
 coordenadas cartesianas
 sistema de, 111
 Coriolis
 constante de acoplamento, 28
 constante ζ de, 28, 33
 corpo negro, 39
 radiação de, 91
 correlação
 tempo de, 31, 32
 corrente, 74, 78, **91**, 151
 anódica parcial, 76
 catódica, 74
 catódica parcial, 76
 círculo de, 153
 de probabilidade
 densidade de, **19**
 de troca, 76
 densidade de, 76
 elétrica, 4, **16**, **19**, 76, 89–91, 99, 145, 149, 150
 densidade de, **16**, **19**, **76**, 94
 faradaica, 76
 fase de, 17
 fluxo de, 77
 líquida, 79
 no vácuo
 densidade de, 153
 elemento de, 152
 térmica
 densidade de, 48
 unidade eletromagnética de, 141
 zero, 75
 corrosão
 nomenclatura de, 74
 Coulomb
 campo central de, 25
 integral de, **20**, **21**
 lei de, 152
 módulo de, 15
 operador de, **21**, 22
 coulomb, **93**, 140, 145
 covariância, 158
 Cowling
 número de, **86**
 cristal, 17, 59
 líquido, 59
 líquido (símbolo), **58**
 crystalino (símbolo), **58**
 Curie
 relação de, **139**
 temperatura de, 47
 curie, [145](#)
 dalton, 9, 24, 51, [96](#), 98, 121, [142](#)
 Debye
 comprimento
 característico de, 82

da camada difusão, **81**
 de blindagem de, 82
 de onda de corte de, 47
 frequência angular de, **47**
 frequência de, **47**
 número de onda angular de, **47**
 número de onda de, **47**
 temperatura de, **47**, 50
 (símbolo), 84
 debye, **28**, 43, 147
 Debye-Hückel
 teoria de, 80
 Debye-Waller
 fator de, **47**
 deca, **95**
 decaimento
 coeficiente de, 8, **103**
 constante de (velocidade de), **26**
 exponencial, 26, 72
 radioativo, 68
 tempo de, 68
 velocidade de, 40
 deci, **95**
 decibel, 103, **104**
 defeito inercial, **27**
 definição de pH, **79**
 deformação
 angular
 coordenada de, **29**
 específica, **15**
 degenerescência, 28, 43, **49**
 de spin nuclear, 28
 vibracional, 28
 degrau unitário
 função, 111
 delta
 de Dirac
 função, 110
 de Kronecker, 110
 densidade, **14**, 85, 94
 de carga, **16**, 19, 25, 47, 48, 146
 elétrica, 94
 eletrônica, **19**
 superficial, 6, **16**, **75**
 de colisões
 de A com A, **69**
 de A com B, **69**
 de corrente, 76, 153
 de probabilidade, 19
 de troca, 76
 elétrica, **16**, 19, 76, 94
 térmica, 48
 de energia, 39, 94
 de radiação, **154**
 radiante, **38**
 de energia radiante espectral, 39
 em função da frequência, **38**
 em função do comprimento de onda, **38**
 em função do número de onda, **38**
 de estados, **47**, **49**, **71**
 do estado de transição, **71**
 de fluxo, 85
 de calor, **85**, 94
 de massa, **85**
 de moléculas, 85
 de partículas, 48
 magnético, **17**, 31, 85, 93, 99, 147, 151–153
 magnético de radiofrequência, 30
 magnético efetivo, 32
 magnético estático, 30
 de íons, 47
 de massa, 6, **14**, 42, 52, 55, 58, 94, 102
 de número, 47, 48, 52
 de entidades, **49**, 52
 de moléculas, 85
 de probabilidade, **19**, 157
 de quantidade, 145
 espectral de modos vibracionais, **47**
 matriz de, **50**
 elemento da, **50**
 relativa, **14**
 superficial, **14**
 dependência
 da atividade com a pressão, 61
 da concentração (reação unimolecular), 68
 da pressão (reação unimolecular), 68
 da temperatura (reação unimolecular), 68
 deposição de espécies, 81
 descarga, 79
 desdobramento
 assimétrico, 34
 K, 34
 l, 34
 Λ, 34
 deslizamento (símbolo de Hermann-Mauguin), 48
 deslocamento
 elétrico, **16**, 147, **152**
 não racionalizado, 147
 químico, **31**
 vetor de, **46**

vibracional, 29
deslocamento (subscrito), 63
desvio
de frequência, 91
padrão, 107, **157**, 158
combinado, 157
da média, **157**
estimado, 158
determinante
de matriz quadrada, 111
de Slater, 21
secular de Hückel, 20
dêuteron, 54
massa, 119
momento magnético, 120
dia, **96**, 143
astronômico, 143
diagrama de célula, 75, 76, **78**
diâmetro, **13**, 116
de colisão, **68**
diferença
de energia potencial, 14
de potencial, 75, 78, 98
de contato, 78
de Galvani, **75**, 76
de Volta, **74**
elétrico, **16**, 48, 78
externo, 74
fase da, 17
interno, 75
de potencial (célula eletroquímica), **75**, **78**, 80
diferencial não exata, 60
difusão
coeficiente de, **47**, 48, 77, **85**, 94
comprimento de, 47
térmica
coeficiente de, **85**
velocidade de, 78
difusividade térmica, **85**
diluição
(subscrito), 63
infinita, 59, 65
infinita (sobrescrito), 64
dimensão, 4
da célula unitária, 46
recíproca, 46
de comprimento
coordenada com, 46
de tempo (NMR), 31
símbolo para, 4
unitária, 13, 93
grandeza de, 40, 86, 102
dina, 140, 143
dipolo, **17**, 28, 152
camada de, 74
comprimento de, 147
elétrico, 39
comprimento de, 28
momento, 17, **28**, 43, 45
transição de, 43
magnético, 153
momento, **25**, 126
molecular
momento, 28
momento, **17**, 30
vetor de, 17
direção
em um cristal
símbolos, 48
reticular, 48
dispersão esperada, 155
dissipação sonora
coeficiente de, **15**
dissociação
da água
constante de equilíbrio, 62
de um ácido
constante de equilíbrio, 62
energia de, **24**, 101
grau de, **53**, 103
dissolução, 62
constante de equilíbrio de, 62
distância, **13**, 15, 17, 19, 21, 28, 48, 69, 91, 140
de equilíbrio, 29
efetiva
parâmetro de, 29
entre planos da rede, 46
interatômica, 29
da estrutura por substituição, 29
de equilíbrio, 29
do estado fundamental, 29
média no ponto zero, 29
interatômica (internuclear), 29
média Terra-Sol, 96
reduzida, 100
distorção centrífuga
constante de, 27
distribuição
de carga, 152

de massa, 14
de probabilidade, **157**, 160
gaussiana, **157**, 160
normal, **157**, 159
retangular, **157**, 159
t de Student, **157**, 160
triangular, **157**
de velocidade
função, **49**
delta de Dirac, 110
divergência de um campo vetorial, 111
doador, 48
energia de ionização do, 47
dose
absorvida, 93
de radiação, 93, 145
taxa de, 94
de radiação
absorvida, 93, 145
equivalente, 93, 145
duração, 13
efeito
dielétrico, 44, 45
nuclear Overhauser, 32
eficiência, 94, 102
efusão
velocidade de, 85
EHP, **75**, **79**
Einstein
coeficiente de, **39**, 43
probabilidade de transição de, 41, 43
temperatura de, 50
einstein, 72
eixo
cartesiano fixo no espaço, 39, 43
cristalino, 44
de quantização, 33
de simetria, 33
de simetria primário, 35
de zona, 48
parafuso
operação de, 48
elétron, **54**, 119
(símbolo), 8, 54
carga do, 19
condutor de, 77
coordenada do, 21
energia do, 48
função de onda do, 48
função trabalho do, **47**
massa do, 9, 24, 32, 98, 99, 115, 142
neutrino do, **119**
número de (reação eletroquímica), **75**
percurso livre médio (símbolo), 84
velocidade do, 48
elétron-volt, 9, 96, **98**, 138, 143
elétrons de valência, 56
elasticidade
módulo de, **15**
elemento
condutor, 149
da matriz, 22, 71, 83
de densidade, **22**, **50**
de recobrimento, **22**, 23
do operador, 19
de área, 38
de integração, **19**
de matriz, 20, **111**
do operador de Fock, **22**, 23
peso atômico padrão, 121, 125
químico, 53
símbolo de, 8, 9, **53**, 54, 117, 121, 125
elementos
abundância isotópica dos, **121**
composição isotópica dos, 127–133
da matriz de densidade, **50**
massa atômica relativa, 122–125
eletrólito, 77
atividade de, **74**
condutividade, 138
condutividade molar, **138**
constante de equilíbrio de dissolução, 62
fórmula unitária, 74
Eletricidade, xi, 16
eletricidade
quantidade de, **16**
eletrodo, 75, **78**, 79
de hidrogênio padrão (EHP), 75, 76, **79**
negativo, 79
positivo, 79
potencial de, **75**, 78, 79
absoluto, 75
de equilíbrio, **76**
de referência, 75
padrão, **76**, **79**
quimicamente modificado, 74
reação de, 76, **78**
balanceada, 75
eletronegatividade, **24**

Eletroquímica, 74, 77
eletroquímica
convenções de notação, 77–80
convenções de sinal, 77–80
de semicondutores, 74
eletrostática clássica, 74
elongação
coordenada de, 29
emissão, 36, 42
espontânea, 72
coeficiente de Einstein para, 39, 41
estimulada
coeficiente de Einstein para, 39
induzida, 41–43
coeficiente de Einstein para, 39
emissividade, 39
emitância, 39
radiante, 39
emu, 141, 145, 147–151
sistema de unidades, 149, 150
sistema não racionalizado, 139
unidade, 141, 150
energia, 14, 19–21, 24, 35, 36, 38, 40, 49, 60, 69–
71, 92, 93, 96, 98, 99, 138, 143, 152, 153,
250
acústica
fluxo de, 15
cinética, 5, 14, 97, 98
operador de, 19
relativa total, 69
conversão foto-eletroquímica de, 74
da banda proibida, 47
de ativação, 68
de Arrhenius, 68
de Gibbs padrão, 70
de atomização, 65
de colisão, 70
translacional, 69
de desintegração, 26
de dissociação, 24, 101
de ligação, 24
de dissociação (estado fundamental), 24
de dissociação (mínimo de potencial), 24
de excitação, 137, 138
molar, 138
de Fermi, 47
de Gibbs, 6, 60, 78
de ativação padrão, 70
de reação padrão, 62
molar parcial, 6, 61, 75
padrão, 76
padrão de reação, 62
de Hartree, 9, 24, 99, 116
de Helmholtz, 60, 82
de interação eletrostática, 48
de interação quadrupolar
tensor de, 26
de ionização, 24
aceitador, 47
do doador, 47
de orbital, 20
de um elétron, 21
de reação, 62
densidade de, 39, 94
densidade de radiação, 154
do elétron, 48
elétrica, 77
eletrônica, 48
barreira de, 68
total, 21, 22
específica, 94
fatores de conversão, 250
interna, 59, 60
de ativação padrão, 69
de atomização padrão, 65
limiar de, 68, 70
molar, 94, 135, 250
nível de, 42, 43
parâmetro de, 20
por unidade de área, 39
por unidade de tempo radiante, 38
potencial, 14, 25
diferença de, 14
potencial (dipolo), 28
química, 77, 78
radiante, 38
densidade de, 38, 154
por unidade de tempo, 38
taxa do fluxo de, 154
radiante espectral
densidade de, 38, 39
reduzida, 100
sonora
fluxo de, 15
total, 69
translacional de colisão, 69
unidade de, 72, 135
Engenharia Eletroquímica, 74, 75
enpletia, 4, 6
ensemble

canônico, **50**
grande canônico, **50**
microcanônico, **50**
entalpia, 4, 6, 8, **60**
de ativação padrão, **69**
de combustão padrão, 65
de formação
 molar, 59
 molar padrão, **62**
de reação, 62, 73
 molar, 64
 padrão, 5, **62**
de vaporização molar, 64
molar, 6, 8
 parcial padrão, **61**
entidádico (uso deste adjetivo), 6
entidade, 48, 50, **51**, 54, 55, 57, 58, 61, 63, 76, 77, 82, 92
elementar, 4, **57**, 58, 92, 93
equivalente, 77
massa de, 51, 96
número de, 6, 26, 49, 51, 57
 densidade de, 49, 52
produto, 57
reagente, 57
entropia, 4, **60**, 94, 144
 de ativação padrão, 70
de formação padrão (símbolo), 65
de reação
 molar, 64
 padrão, **62**
específica, 94
estatística, **50**
interfacial por unidade de área (símbolo), 82
molar, 94, 145
 da fase α (símbolo), 59
 parcial padrão, **61**
no equilíbrio, 50
 unidade de, 145
enzima, 71
 unidade de, 93
EQM, 74
equação
 da reação, 53, 65
 de autovalores, **33**
 do momento angular, **33**
 de Hartree-Fock, **22**
 de Hartree-Fock-Roothaan, **23**
 de Maxwell, 150, 151, 153
 de medida, 159, 160
de Nernst, **76**, 80
de onda, 154
de Polo-Wilson, **45**
de Schrödinger (hidrogênio), **100**
de van der Waals, **61**
de velocidade (1^a ordem), 71
dos autovalores, **33**
eletromagnética, 151
matricial, 57, 71
química, 53, **56**
 estequiométrica, 53, **64**, 67, 73
 estequiométrica (símbolo), **56**
reação elementar, **72**, 73
reação elementar bimolecular, 73
reação elementar unimolecular, 73
redox, 56
equações
 da Química Quântica, **100**
 da teoria eletromagnética, **149**, 152–154
equilíbrio, 62, 75, **78**, 79
 condição fora de, 62
 constante de (padrão), 61, **62**, 64
 de transferência de carga, 75
 distância de, 29
 distância interatômica de, 29
 potencial de, **76**, **78**
 potencial de eletrodo de, **76**
 químico, 75, 76, **78**
 local, 75, 76
 reação em (símbolo), **56**
 térmico, 43
erg, 140, 141, 143, 144, 148, 150
escala Celsius
 zero da, **115**
escoamento
 velocidade de, 85
escolha
 de uma unidade, 3
 do estado padrão, 61, 62
esfera de Fermi, 48
esferorradiano, 13, 92, **93**
espaço, 13, 33, 34, 43
 das funções de base, 22
de fase
 volume no, **49**
e tempo, 13
nulo, 57
 tridimensional, 19, 39, 43
espalhamento, 40, 41
 amplitude de, 46

ângulo de, 69
atômico
 fator de, **46**
de nêutron, 47
elástico, 69
matriz de, 69
teoria quântica de, 69
espécie
 adsorvida (símbolo), 58
 de simetria, 34–36
 rotulação para, **34**
 símbolo de, 107
 degenerada, 34
 reacional, 57
espécies
 absorção de, 81
 com camada fechada, 22
 deposição de, 81
 químicas, 58
específico (uso deste adjetivo), **6**
espectro
 bidimensional
 frequências variáveis de, 30
 de absorção, 40
 de infravermelho, 44
 de reflexão, 44
 de transmitância, 40
espectrômetro, 40
 densidade de fluxo magnético estático, 30
Espectroscopia, 27, 37, 40
 Atômica, 14, 102
 de Absorção Atômica, 102
 de Ressonância de Spin, 25
 Molecular, 14
 Óptica, 35, 40
espessura, **13**, 81
 de camada, 81
 de camada difusa, 77
 de filme, 81
esquema
 \overline{MS} , 115
 “on-shell”, **115**
estado
 atômico (símbolos), 35
 de agregação (símbolos), 57, **58**
 de alta energia, 36
 de baixa energia, 36
 de referência, 65
 substância simples, 66
 de transição, 68
 densidade de estados do, **71**
 função de partição, **70**
 função de partição (molecular), 70
 nível de ponto zero, 70
 número de estados do, **71**
 teoria do, 70
 de transição (sobrescrito), 64
 dupleto, 55
 eletromônico, 36, 55
 degenerado, 34
 excitado, 8
 excitado (símbolos), 35, 36, **54**
 fundamental (símbolo), 35, 36
estacionário, 19
 transferência de massa no, 77
excitado, 35, 137
 concentração de, 72
 rotulação de, 36
 função de, **19**
fundamental, 8, 24, 36, 65, 137
 distância interatômica no, 29
 do átomo (símbolo), 121–125
 energia de dissociação, 24
 rotulação de, 36
gasoso (símbolo), 59
líquido, 65
molecular (símbolos), 35
padrão, 61, **65**, 66, 70, 76
 do soluto, 65
 em fase gasosa, 65
 escolha de, 62
 estado líquido, 65
 estado sólido, 65
 pressão do, 66
 símbolo de, 61, **64**
puro, 50
quântico, 50
rotacional, **33**, 55
sólido, 46, 48, 65
singuleto, 34
 excitado, 137
tripletô, 55
 fundamental, 137
vibracional, **36**, 55
vibracional degenerado, 34
vibracional fundamental, 28, 29
 número de onda, 28
estados
 de referência, 66
 densidade de, **47**, **49**, **71**

número (cumulativo) de, 49
 número (soma) de, **71**
 número total de, 48, 71
 padrão em Bioquímica, 66
 quânticos
 número de, 49
 soma de, 50
 todos os, **49**
 estiramento
 coordenada de, 29
 estiramento-deformação angular
 interação de, 29
 estrutura
 de ressonância, **56**
 fórmula de, 55
 de superfícies, 83
 fator de
 com índices h, k, l , **46**
 fina
 constante de, **24**, 99, 115, 150, 151
 por substituição
 distância interatômica na, 29
 esu, 140, **141**, 145–147, 150, 151
 não racionalizado, 139
 sistema de unidades, 149
 etapa elementar, 56, 77
 Euler
 número de, **86**
 evaporação (subscrito), 63
 exa, 95
 exabínário, 95
 exbi, 95
 excesso
 de carga, 74
 de massa, **24**
 grandeza de (sobrescrito), 64
 quantidade de, 81
 superficial, **81**, 82
 concentração de, **81**
 quantidade de, **81**
 superficial reduzido
 concentração de, 82
 superficial relativo
 concentração de, 82
 superficial total
 concentração de, **81**
 total, 82
 excitação
 energia de, **137**, 138
 símbolo de, 54
 excitância radiante, **39**
 expansão
 linear
 coeficiente de, **60**
 térmica
 coeficiente de, 61
 volumétrica
 coeficiente de, 47, **60**, 85
 expansibilidade
 coeficiente de, 61
 exposição, **85**
 (raios X e γ), 94
 radiante, 39
 extensão
 da reação, **52**, 57, 64
 fator de, 158, 159
 extensivo (uso deste adjetivo), **6**
 extinção, 41
 coeficiente de, 41
 Fabry-Perot
 cavidade de, 40
 face
 cristalina (símbolos), 48
 monocristalina (designações), 83
 Fahrenheit
 temperatura, 144
 farad, 93, 146
 Faraday
 constante de, **74**, 115
 lei de indução de, **153**
 fase, 74–77, 81, 82
 condensada, 44, 45, 52, 61
 condensada (símbolo), 58
 da corrente, 17
 da diferença de potencial, 17
 fluida, 58
 fronteira de (símbolo), 78
 gasosa, **44**, 45, 59, 65
 estado padrão, **65**
 líquida, 45, 59
 estado padrão, **65**
 maciça, **44**
 nemática, 58
 pura, 42, 63, **65**
 sólida, 59, 62
 estado padrão, **65**
 seio da, 44, 75
 fator
 de absorção, **40**

de compressão, **61**
de compressibilidade, **61**
de Debye-Waller, **47**
de espalhamento atômico, **46**
de estrutura com índices h, k, l , **46**
de extensão, 158, 159
de frequência, **68**
 de colisões, **69**
de normalização, **19**, 21, 22
de qualidade, **40**
de reflexão, **40**
de resposta, 80
de simetria, 77
de transmissão, **40**
pré-exponencial, 67, **68**
fator g , **25**, 30
 de Landé
 para o elétron livre, 116
eletrônico, 25
 para um único spin, **29**
nuclear, **25**
fatores
 de conversão, 96, 135, 140, 141, 151
 da pressão, 249
 de energia, 250
fatorial, 109
fem, vide 16, vide 75
femto, 95
femtometro quadrado, 126
fenômenos
 de transporte, 85
 eletrocinéticos, 74
Fermi
 constante de acoplamento de, 115
 energia de, **47**
 esfera de, 48
fermi, 141
filme, 82
 espessura de, 81
 tensão do, **81**
finesse, **40**
Física
 Atômica, 24
 de Laser, 38
 de Plasma, 24
 Nuclear, 24, 120
Físico-Química Orgânica, 11
fluênciа, **39**
 velocidade de, 39
fluídez, **15**
fluorescência, 72
 constante de velocidade de, **72**
fluxo, 77, 85
 de calor, **85**
 densidade de, **85**, 94
 vetor, 48
de corrente, 77
de energia
 acústica, 15
 sonora, **15**
de energia radiante
 taxa do, **154**
de massa, **85**
 densidade de, 85
de partículas, 69
 por unidade de área, 69
 por unidade de ângulo, 69
de probabilidade, **19**
densidade de, 48, 85
elétrico, **16**
energético, 93
luminoso, 93
magnético, **17**, 93, 147
 densidade de, **17**, 31, 32, 85, 93, 99, 147,
 151–153
magnético de radiofrequência
 densidade de, 30
magnético estático
 densidade de, 30
radiante, **38**
refletido, 15
transmitido, 15
fônon, 48
fonte, 38–40, 79, 92
 de luz, 42
 de radiação, 38
 de variabilidade, 159
 itálica, 7, 8, 107, 108
 não serifada, 108
 negrita, 7, 108
 para símbolos, 7
 romana, 7, 8, 74, 107
força, **14**, 91, 93, 99, 108, 140, 143, 150, 152–154
constants de, 29
de interação, 30
 unidade de, 30
de Lorentz, **154**
de oscilador, 41
eletromagnética, 149, **149**, 150
eletromotriz, vide 16

- eletrostática, **149**, 150
 iônica, 80
 iônica (com base em concentração), **63**, **74**
 iônica (com base em molalidade), **63**, **74**
 lineica, **150**
 momento de, **14**, 94
 termoelétrica, 47, 48
 ua de, 143
 vibracional
 constantes de, **29**
 forma
 de linha, 40
 monomérica (símbolo), 58
 polimérica (símbolo), 58
 formação, 56, 59, **65**
 reação de (símbolo), 63
 fórmula
 de Clausius-Mossotti, 44
 de conectividade, **55**
 de estrutura de ressonância, 55, **56**
 de Lorentz-Lorenz, 44
 do termo vibracional, **28**
 empírica, **55**
 estereoquímica, 55, **56**
 configuração estereoquímica, **56**
 projeção de Fischer, **56**
 estrutural, **55**
 matriz de, 57
 molecular, **55**
 química, 53–55
 unitária, **51**, 55, 58, 74
 fotodissociação, 34
 fóton, 72, 92, 119
 símbolo, 38, 54
 Fotoquímica, 38, 39, 67
 Fourier
 número de, **86**
 para transferência de massa, **86**
 fração
 da população, 42, 43
 da quantidade, **52**, 53, 85, 102, 103, 139
 da quantidade de substância, **52**, 102, 126, 139
 mássica, **51**, 53, 102, 103
 molar, **52**, 65, 66, 126
 coeficiente de atividade em, **63**
 coeficiente osmótico em, **63**
 volúmica, **52**, 53, 102, 103
 frações, 102
 franklin, **140**, 141, 145, 150
 frequência, **13**, 30, 31, **38**, 39, 40, 45, 72, 85, 91–93, 135
 angular, 8, **13**, **38**, 48, 93, 103
 de Debye, **47**
 de Larmor, **25**
 de nutação, 30
 unidade de, 30
 circular
 de Larmor, 25
 de colisão, **69**
 de A com A, **69**
 de A com B, **69**
 de Debye, **47**
 de Larmor, 25
 de ressonância, 31, 32
 de uma molécula referencial, 32
 do campo rf irradiente, 32
 do campo rf observado, 32
 padronizada para o núcleo A, 32
 de transição, **27**
 fator de, **68**
 de colisões, **69**
 padrão, 91
 unidade de, **27**, 28
 variável de espectro bidimensional, 30
 Froude
 número de, **86**
 fugacidade, **62**, 79
 coeficiente de, **62**
 constante de equilíbrio com base em, 62
 função
 amplitude, 19
 de arco, 110
 de base
 do orbital atômico, 20, 22
 integrais de dois elétrons, **22**
 integrais de um elétron, **22**
 de Bloch, **47**
 de estado, **19**
 de Gibbs, **60**, **62**
 de Hamilton, **14**
 de Heaviside, 49, 71, **111**
 de Helmholtz, **60**
 de Lagrange, **14**
 de Legendre, 19
 de Massieu, **60**
 de onda, **19**
 de spin, 20
 de um elétron, 48
 eletrônica, 19

hidrogenoide, **19**
 normalizada, 19
 total, **21**
 de partição, 43
 ensemble canônico, **50**
 ensemble grande canônico, 50
 ensemble microcanônico, **50**
 molécula simples, **49**
 molecular para o estado de transição, **70**
 por unidade de volume, **70**
 de Planck, **60**
 degrau unitário, 111
 delta de Dirac, 110
 dependente do tempo, 19
 distribuição
 de velocidade, **49**
 de velocidades, **49**
 exponencial, 110
 gama, 111
 harmônica esférica, **19**
 hiperbólica, 110
 hiperbólica inversa, 110
 logarítmica, 110
 matemática, 107, **109–111**
 própria, 22, 34
 trabalho, **47**, 84
 do elétron, **47**
 variação da, 84
 trigonometria, **109, 110**
 funções f e g
 convolução das, 111
 fusão (subscrito), 63
 FWHM, **40**, 72

 gal, 142, 143
 galão (UK), 142
 galão (US), 142
 Galvani
 diferença de potencial de, **75**, 76
 gama, 142
 gás, 42, 43, 58, 61, 85, 145
 equação de van der Waals, 61
 ideal, 43, **65**, 70
 volume molar do, 115
 mistura, **65**, 92
 real, 52, 145
 volume molar do, 145
 gases
 constante molar dos, **49**, 115
 gauge de Lorentz, 154

 Gauss
 lei de, **152**
 gauss, 147, 148
 gaussiana (unidade), 140, 141, 145–148
 Gibbs
 energia de, **6, 60**
 da reação total da célula eletroquímica, 78
 de ativação padrão, **70**
 de reação padrão, **62**
 molar parcial, 6, **61**, 75
 padrão, 76
 função de, **60**
 quantidade de
 superficial, 82
 superfície de, **81, 82**
 superfície demarcadora de, **81, 82**
 gibi, 95
 giga, 95
 gigabíntario, 95
 gon, 142
 grão, 142
 gradiente
 de campo escalar, 111
 de potencial químico, 48
 do campo elétrico, **31, 146**
 grama, 95, 142
 grandeza
 adimensional, 5, 11, 19, 100, 102
 algébrica, 19
 de base, 4, 16, 89, 90
 de campo
 nível de, 96
 de dimensão unitária, 86, 102
 de excesso (sobrescrito), 64
 de potência
 nível de, 96
 de reação padrão, 64
 derivada, 4
 eletromagnética, 150
 escalar, 48, 85
 específica, **6, 60**
 espectral, 39
 extensiva, **6, 61, 64, 85**
 extensiva (dividida pela área), 85
 extensiva (dividida pelo volume), 85
 física, **3, 4–9, 89, 96–98, 100, 137, 141, 146, 149**
 nome de, **3, 4, 11, 57**
 produto de, 7
 quociente de, 7

símbolo de, 3, 4, 7–9, 11, 90, 102, 137
tabelas de, 11
unidade de, 3, 89
valor de, 3, 135, 139
fotônica, 38
intensiva, 6
logarítmica, 103, 104
luminosa, 38
matricial, 69
medida, 157
microscópica, 17
molar, 6, 60
molar parcial, 6, 61
molecular, 41
não racionalizada, 151
padrão, 61
reduzida, 100
tensorial, 14, 15, 30
símbolo de, 108
termodinâmica extensiva, 64
vetorial, 25, 85
grandezas
 álgebra de, 3
 uso de, 137–140
Grashof
 número de, 86
 para transferência de massa, 86
grau, 96, 142
 Celsius, 93, 144
 de dissociação, 53, 103
 de ionização, 53
 de liberdade, 157, 158
 de reação, 52
 do ângulo plano, 42
 Rankine, 144
gravidade
 aceleração da, 13, 82, 85
 padrão, 116, 143
gravitação
 constante newtoniana da, 116
gray, 93, 145
grupo
 de inversão-permutação, 34
 de permutação, 34
 de ponto molecular, 35
 pontual, 35, 107
 simétrico, 34
Grüneisen
 parâmetro de, 47
GTO, 22

Hall
 coeficiente de, 47
Hamilton
 função de, 14
hamiltoniano, 19, 34
 de acoplamento hiperfino, 30
 do cerne (caroço), 21
 efetivo, 20
 operador, 19
 rotacional, 27
 vibracional efetivo, 28
Harned
 célula de, 80
Hartmann
 número de, 86
Hartree
 energia de, 9, 24, 99, 116
hartree, 9, 138, 143, 151
Hartree-Fock
 teoria (ab initio SCF), 20, 21
Hartree-Fock-Roothaan
 teoria SCF (teoria LCAO-MO), 22, 23
Heaviside
 função de, 49, 71, 111
hectare, 142
hecto, 95
hectopascal, 52
hélion, 54, 119
 blindado
 momento magnético do, 120
Helmholtz
 energia de, 60, 82
 função de, 60
Henry
 lei de, 62
 constante da, 62
henry, 93, 148
Hermann-Mauguin
 símbolo de, 34, 48
hertz, 6, 92, 93
hidrocarbonetos conjugados planares, 20
hidrólise de uma base, 62
hiperpolarizabilidade, 17
 1^a, 26, 99
 2^a, 26, 99
hipersusceptibilidade
 1^a, 16
 2^a, 16
HMO
 teoria, vide 20

hora, **96**, 143
Hückel
determinante secular de, 20
teoria dos orbitais moleculares de, 20

ideal (sobrescrito), 64
identidade
matriz, 111
operador, 34, 35
IEC, **6**, **95**, 96, 142
iluminância, **93**
imersão (subscrito), 63
impedância, **17**, 74, 103
característica, 115
complexa, **17**
impressão
de números, 107
de símbolos
de elementos químicos, 53
de estados de agregação, 58, 59
de grandezas, 5, 7–9
de partículas, 54
de unidades, 6
matemáticos, 8, 107, 108
para processos físico-químicos, 63
para reações físico-químicas, 63

inércia
momento de, **14**
principal, 27

incerteza, 80, 107, 155, **157**, 158–160
dados termodinâmicos, 66
expandida, 157, **158**, 159
padrão, 107, 157, **158**
combinada, 157, 158, **160**
relativa, **158**
relativa combinada, **158**
relativa, 102

índice
de absorção, **41**
de dose equivalente, **93**
de Miller, **48**, 83
2D, 84
3D, 84
de refração, **38**, 44, 45
complexo, **41**, 44
imaginário, **41**, 44
real, 44

indução
lei de
de Faraday, **153**

magnética, **17**, 30
indutância, 93, 148
mútua, **18**
infravermelho
espectro de, 44

integral
de Coulomb, **20**
de dois elétrons
função de base, **22**
de recobrimento, **20**
de repulsão de dois elétrons, 20
integral de Coulomb, **21**
integral de troca, **21**
de ressonância, **20**
de sobreposição, **20**
de troca, 21
de um elétron
função de base, **22**

intensidade, 38, **39**, 40, 42
da radiação eletromagnética, 39
de absorção, 42–44
convenções para fases condensadas, 44
espectroscópica, 44
de banda, 29, 41–44
de linha, 29, 42–44
de sinal, 32
do campo
de magnetização, **17**
elétrico, 7, **16**, 26, 28, 77, 94, 140, 146, 151–153
magnético, **17**, 94, 148, 153
espectral, **39**, 40
fotônica, 38
incidente, 42
integrada líquida
de banda de absorção, 43
luminosa, 4, 38, 89, 90, 92
radiante, **38**, 39, 92
transmitida, 42

intensificação nuclear Overhauser, 32
intensivo (uso deste adjetivo), **6**

interação
antiligante, 20
de estiramento-deformação angular, 29
dipolar
tensor de, 30
eletrostática
energia de, 48
força de, 30
ligante, 20

nuclear fraca, 26
quadrupolar
 tensor energia de, **26**
spin-rotação
 tensor de, 30
interface, 75, 78
 eletrodo-solução, 76
interfase
 concentração na, 76
intervalo
 de confiança, 160
 de incerteza, 107
 de probabilidade, 157
 de tempo, 39, 68, 91
 de tempo característico, **13**
espectral, 44
 livre, **40**
inversão
 fixa no espaço
 operador, 34
 operação de, **34**
 operador, **35**
inversão-permutação
 operador, 34
inverso
 de matriz quadrada, 111
 do comprimento de onda, **27**, 94
 de corte de Debye, 47
íon, 54
 complexo, 55
 espectador, 56
íons
 densidade de, 47
 hidrogênio
 atividade de, 79
ionização
 energia de, 24, 161
 do aceitador, 47
 do doador, 47
 grau de, 53
 potencial de, 24
irradiância, 38, **39**, 94
 espectral, **39**
ISO, **6**, 11, 13, 14, 16, 18, 24, 27, 38, 46, 49, 51,
 60, 62, 85, 96, 102, 142
ISO 1000, 7
ISO 31, 7, 52
ISO/IEC 80000, 7
ISO/TC 12, xiii
isóbaro, **53**
isômero isotópico, **55**
isótopo, **53**, 121, 126
 mistura de, 92
isotopóloga, 55
isotopômera, 55
ITS-90, 60
IUPAC, **xi**, 11, 19, 31, 38, 66, 67, 81, 161
 Comissão de Abundâncias Isotópicas e Pesos
 Atômicos, 121
 Comissão de Estrutura Molecular e Espec-
 troscopia, 27
 Comissão de Termodinâmica, 62
 Divisão de Físico-Química, xiii
 Divisão de Química Clínica, 4, 6, 52
 Tabela Periódica dos Elementos, xi, 125
IUPAP, **xiii**, 11, 13, 14, 16, 19, 24, 27, 38, 46, 49,
 51, 60, 85
jarda, 141
joule, 6, **93**, 97, 143
Joule-Thomson
 coeficiente, **61**
junção líquida
 potencial de, 76, **78**, 80
 símbolo, 78
kat, 93
katal, **93**
kelvin, 60, 89, 90, **91**, 93, 144
kerma, **93**
kibi, 95
kilo, 95
kilobinário, 95
kilodalton, 98
kilograma, 4, 89, 90, **91**, 92, 95, 142, 149
kilograma-força, 143
kilolibra, 143
kilometro, 95
kilotonelada, 96
kilovolt, 6
Knudsen
 número de, **86**
Lagrange
 função de, **14**
lagrangiano, 49
lambda, 142, 185
Landé
 fator *g* de
 para o elétron livre, 116
langmuir, **85**

largura, 13
de linha, 40
à meia altura do máximo, 40, 72
de pré-dissociação, 72
natural, 72
de nível, 26
de terraço, 83

Larmor
frequência angular de, 25
frequência circular de, 25
frequência de, 25

Laser
Física de, 38

laser, 161
cavidade de, 40
feixe de, 40
pulso de, 39

Legendre
função de, 19

lei
de Ampère, 153
de Beer-Lambert, 39, 40
de Biot-Savart, 152
de Coulomb, 152
de Gauss, 152
de Henry, 62
coeficiente de atividade, 63
constante da, 62
de indução de Faraday, 153
de Raoult
coeficiente de atividade, 63
de velocidade, 67, 73

letra
grega, 8, 9, 20, 35, 59, 185
latina, 8, 35

Levi-Civita
símbolo de, 110

Lewis
número de, 86

libra
(avoirdupois), 142
(métrica), 142
por polegada quadrada, 144

ligação
de equilíbrio
comprimento de, 101
energia de dissociação de, 24
monovalente, 55
ordem de, 20, 22

limiar de energia, 68, 70

limite
de alta pressão, 70, 73
de frequência infinita, 45
de incerteza, 121

lineico (uso deste adjetivo), 6

linha
de absorção, 41
lorentziana, 72
de pré-dissociação
largura de, 72
espectral, 40, 41
forma de, 40
intensidade de, 29, 42, 43, 44
largura de, 40, 72
natural
largura de, 72

líquido, 17, 42, 45
constante de acoplamento hiperfino em, 30
isotrópico, 44
miscível, 78
símbolo, 58

litro, 6, 96, 142
litro atmosfera, 143

logaritmo, 40, 43, 103
de base a , 110
de base 10, 67, 103, 104, 110
de base 2, 110
neperiano (natural), 8, 103, 110
base de, 110

Lorentz
campo local de, 44
força de, 154
gauge de, 154

Lorentz-Lorenz
fórmula de, 44

Lorenz
coeficiente de, 47

lúmen, 93

luminescência, 40, 41

lux, 93

luz, 39, 91
ano-, 142
comprimento de onda, 42
feixe de, 39
fonte de, 42
poder de coleta de, 40
segundo-, 142
transmitida, 40
velocidade da, 9, 13, 16, 27, 38, 47, 99, 115,
149–151

Mach
 número de, **86**
 Madelung
 constante de, **47**
 Magnetismo, xi, 16
 magnetização, **17**, 31, **153**
 intensidade do campo de, **17**
 macroscópica de equilíbrio por unidade de volume, **31**
 volumétrica, **148**
 magnetizabilidade, **25**, 99, **148**
 magnéton
 de Bohr, **25**, 32, 99, 116, 119, 139, 148
 nuclear, **25**, **32**, 116, 126, 148
 massa, 4, 6, 7, 14, 19, 21, 31, 49, 52, 54, 81, 85, 89–93, 95–100, 115, 119, 120, 139, 141, 142, 149, 150
 atômica, **24**, 51, 121, 126
 constante de, **24**, **51**, 115, 121
 relativa, **51**, 121–125
 relativa média, 125
 atômica unificada
 unidade de, 9, **24**, 51, 96, 98, 115, 120, 121, 126, 142
 centro de, 34
 coeficiente de transferência de, **77**
 concentração de, 42, **52**, 102
 da partícula α , 119
 de nuclídeo, 125–133
 de uma entidade, 51
 densidade de, 6, **14**, 42, **52**, 55, 58, 94, 102, 161
 densidade de fluxo de, **85**
 do átomo, **24**, 51, 53
 do carbono-12, 98, 121
 do déuteron, 119
 do elétron, 9, 24, 32, 98, 99, 100, 115, 119, 142
 do hélio, 119
 do mísion, 119
 do nêutron, 115, 119
 do pósitron, 119
 do próton, 32, 115, 119
 do triton, 119
 dos bósons, 115
 efetiva, 47
 excesso de, **24**
 fluxo de, **85**
 média, 121
 molar, **51**, 58, 121, 139
 constante de, **51**, 121
 média, **51**
 média (média z), **81**
 média (média em massa), **81**
 média (média em número), **81**
 relativa, **51**
 molecular, 55
 molecular relativa, 51
 número de, **24**, 53, 54, 126
 reduzida, 8, **14**, 68, 69, 100
 transferência de, 77
 unidade de base do SI para, 95
 mássico (uso deste adjetivo), **6**
 Massieu
 função de, **60**
 matriz, 5, 7, 83, 108, **111**
 (dos coeficientes) de velocidade, **71**
 de coeficientes estequiométricos, 57
 de conservação, 57
 de densidade, **50**
 elemento da, **50**
 de elementos A_{ij} , **111**
 de espalhamento, 69
 de fórmula, 57
 de sobreposição
 elemento da, 22, 23
 do operador \hat{A}
 elemento da, **19**
 do operador de Fock
 elemento da, 22, 23
 elemento de, 83
 identidade, 111
 inversa de matriz quadrada, 111
 nula, 57
 para notação de super-rede (símbolo), 84
 quadrada
 determinante de, 111
 traço de, **111**
 transposta, **111**
 transposta conjugada, **111**
 unitária, 69, 111
 matrizes
 produto de, **111**
 Maxwell
 equações de, 150, 151, 153
 relação de, **149**, 150
 maxwell, 147
 mebi, 95
 Mecânica
 Clássica, 14

Estatística, 70
Quântica, 19
mecanismo
complexo, 72
composto, 72, 73
de catálise enzimática, 71
de reação catalítica, 72
de reação em cadeia, 72
indireto, 72
por etapas, 72
simples, 72
média, 53, 143, 157, 158
desvio padrão da, 157, 158
térmica, 47, 69
medida
da incerteza, 159
de pH
método primário de, 80
equação de, 159, 160
incerteza de, 157
resultado de, 159
incerteza padrão combinada do, 158
relatado, 160
medidas
não correlacionadas
propagação de incerteza para, 160
número de, 157
mega, 95
megabinário, 95
megadalton, 98
megaelétron-volt, 96, 120
megahertz, 6
meia-célula, 78, 79
meia-vida, 26, 68
do trítón, 120
meio, 38, 67
anisotrópico, 16
dielétrico, 17
isotrópico, 16, 17, 48, 152
velocidade da luz em um, 38
melhor estimativa, 155, 157, 159
mensurando, 159
metro, 3, 6, 57, 89, 90, 91, 141, 149
cúbico, 142
quadrado, 142
micro, 95
microfaceta, 83
micrograma, 8
micromolar, 52
micron, 141
migração
velocidade de, 77
milha, 141
náutica, 96, 141
mili, 95
milibar, 52
mililitro, 96
milímetro de mercúrio convencional, 144
milimicron, 141
milimolar, 52
Miller
índices de, 83
2D (símbolo), 84
3D (símbolo), 84
para face cristalina, 48
para plano da rede, 48
minuto, 96, 143
minuto (ângulo plano), 96, 142
mistura, 8, 50–52, 60, 63, 65
aquosa-solvente orgânico, 80
binária, 86
composição de, 52, 58
de fluidos (subscrito), 63
de gases, 92
de isótopos, 92
fraca
ângulo de, 26, 115
gasosa, 52, 65
mobilidade, 47
elétrica, 77
razão de, 47
modelo
de colisão de esferas rígidas, 68
estatístico de trajetórias adiabáticas, 71
modo
degenerado, 28
longitudinal da cavidade, 40
normal, 36
vibracional, 28
densidade espectral de, 47
número total de, 48
módulo
(número complexo), 111
(valor absoluto), 109
de cisalhamento, 15
de compressibilidade, 15
de Coulomb, 15
de elasticidade, 15
de Young, 15
do vetor de Poynting, 39

volumétrico, **15**
mol, 4, 6, 48, 57, 63, 89, 90, **92**, 103
molalidade, **52**, 53, 62, 65, 66, 74, 79, 139
coeficiente de atividade em, **63**
coeficiente osmótico em, **63**
constante de equilíbrio com base em, **62**
força iônica em, **63**, **74**
iônica média, **74**
lei de Henry com base em, 62, **63**
padrão, 65, **66**, 79
molar (uso deste adjetivo), **6**
molaridade, 52
molécula
adsorvida
número de, 82
área por, **81**
em monocamada, **81**, 82
linear, 33–35
molecularidade, 72, 73
momento, **14**, 49
angular, **14**, 19, 21, 29, 30, 33, 70, **99**, 126, **144**
de orbital eletrônico, 30
de spin, 20, 30, 119
número quântico de, **33**, 71
operadores de, 30
operadores de (símbolos), **33**
reduzido, 100
total, 35
de força, **14**, 94
de inércia, **14**
principal, 27
de transição, 43
de um dipolo elétrico, 39
dipolar, 17, 26, 28, 30, 39, 140
de transição de uma molécula, **29**, **43**
elétrico, **17**, 28, 43, 45, **99**, **147**
elétrico de uma distribuição de cargas, **152**
elétrico de uma molécula, **25**, **28**
elétrico induzido num campo elétrico, **152**
elétrico por unidade de volume, **16**
magnético, **17**, 25, 29, **99**, 126, **148**
magnético de uma molécula, **25**, 139
magnético por unidade de volume, **17**
molecular, 28
vetor do, 16
generalizado, 14, **49**
linear, **99**
magnético, 25, 119, 126–133
da partícula α , **120**
do dêuteron, **120**
do elétron, **116**
do fóton, **119**
do hélion blindado, **120**
do múon, **119**
do neutrino, **119**
do nêutron, **120**
do pión, **120**
do próton, **116**, **120**
do próton blindado, **116**, 120
do trítón, **120**
nuclear, 31
quadrupolar, 126–133
de um núcleo, **26**
de uma molécula, **25**
elétrico, 99, 126, **147**
nuclear, 31
transferência de, 47, 115
multiplicidade
de spin (símbolo), 35
de spin eletrônico, 35
múltiplo
binário, **95**
decimal de unidades, 6, 89, **95**
múon, 8, **54**, **119**
neutrino do, 119
muônio, 54, **120**
nano, 95
nanometro, **3**, 6
Néel
temperatura de, 47
neper, 8, **96**, 103, 104
Nernst
coeficiente angular de, 80
equação de, **76**, 80
potencial de, 76
neutrino
do elétron, 54, **119**
do múon, 119
do tau, 119
nêutron, **119**, **120**
(símbolo), 8, 24, 54
massa do, **115**
momento magnético (símbolo), 25
nêutrons, 53
espalhamento de, 47
número de, **24**, 26
newton, 91, **93**, 143
nível

de amplitude de sinal, 103
de campo, **103**, **104**
de confiança, 157, 159
de energia, 42, 43, 49
de energia de orbital, 20
de ponto zero
 do estado de transição, 70
 dos reagentes, 70
de potência, **104**
de potência de sinal, 103
de pressão sonora, 104
de uma grandeza
 de campo, **96**
 de potência, **96**
largura de, **26**
quântico, 50
resultante de desdobramento Λ , 34
rotacional, 33
nome
 de composto químico, 9
 de grandeza física, 3, 4, 57
 de unidade, 4
nomenclatura
 de corrosão, 74
sistêmatica
 bioquímica, 9
 inorgânica, 9
 macromolecular, 9
 orgânica, 9
normalização
 fator de, 19, 21, 22
notação
 de Wood, 83
em Eletroquímica, 77–80
matricial, 36, 83
 de equação química, **57**
para redes terminadas idealmente, 83
para super-redes em superfícies, 83
para superfícies escalonadas, 83
para transições espectroscópicas, 36, 37
 simbólica de equação química, **57**
núcleons
 número de, 24, 53
nuclídeo, **53**, 54, 117
 isobárico, **53**
 isotópico, **53**
nuclídeos
 propriedades de, 126–133
número, **8**, 26, 67
 atômico, **24**, 25, 53, 54, 121, 126
 de nuclídeos, 127–133
 dos elementos, 122–125
característico, 5
 de transporte, **86**
complexo, **111**
concentração de, 47, **49**, **52**, 67, 68
 velocidade de reação com base em, **67**
de Alfvén, **86**
de ânions, 74
de átomos, 46, 54, **57**
de carga, 21, 53–55, 74, 77, 119
de cátions, 74
de colisões
 de A com A, **69**
 de A com B, **69**
de Cowling, **86**
de elétrons, 20, 21, 57
 de uma reação eletroquímica, **75**, 76
total, 48
de entidades, 4, 6, 26, **49**, 51, 57, 93
 densidade de, **49**
de estados, 48, **71**
 (cumulativo), **49**
 do estado de transição, **71**
de Euler, **86**
de eventos
 determinados, 72
 idênticos, 13
de fôtons absorvidos, 72
de Fourier, **86**
 para transferência de massa, **86**
de Froude, **86**
de Grashof, **86**
 para transferência de massa, **86**
de Hartmann, **86**
de Knudsen, **86**
de Lewis, **86**
de Mach, **86**
de massa, **24**, 53, 54, 126
de medidas, **157**
de modos vibracionais, 48
de moléculas adsorvidas, **82**
de moles, **4**, 57
de nêutrons, **24**, 26
de núcleons, **24**, 53
de Nusselt, **86**
 para transferência de massa, **86**
de onda, 27–29, 38–40, 43–45, **94**, 135, 137
 (em um meio), **38**
 angular de Debye, **47**

de Debye, **47**
 de transição, **27**
 de vibração harmônica, 28
 fundamental vibracional, **28**
 harmônico (vibracional), 28
 no vácuo, **38**
 de oxidação, 54
 de partículas, 72
 de Péclét, **86**
 para transferência de massa, **86**
 de Prandtl, **86**
 de prótons, 21, **24**, 26, 53, 126
 de Rayleigh, **86**
 de Reynolds, 5, **86**
 magnético, **86**
 de Schmidt, **86**
 de Sherwood, **86**
 de simetria, 50
 de Stanton, **86**
 para transferência de massa, **86**
 de Strouhal, **86**
 de trajetórias de reação adiabáticas abertas, 71
 de transporte, **77**
 de Weber, **86**
 densidade de, **47**, 48, 85
 densidade de fluxo em, 85
 quântico, 22, 30, **33**, 35, 37, 55, 70, 107
 (símbolos), 33
 azimutal, 33
 de spin (para partículas), 119
 de spin nuclear, 126
 do momento angular, **25**, 28, **33**, 71
 magnético, 33
 principal, **25**
 vibracional, 28, 36
 números
 impressão de, 8, 107
 Nusselt
 número de, **86**
 para transferência de massa, **86**
 nutação
 frequência angular de, 30
 oersted, 148
 ohm, **93**, 146
 ohm internacional
 (EUA), 146
 médio, 146
 onça

(avoirdupois), 142
 (troy), 142
 onda
 de corte de Debye, 47
 elástica da rede, 47
 equação de
 para potencial eletromagnético, **154**
 número de, 27–29, 38–40, 43–45, **94**, 135, 137
 operação
 de deslizamento, 48
 de eixo parafuso, 48
 de inversão, **34**
 de permutação, **34**
 de reflexão, 48
 de rotação, 48
 de roto-inversão, 48
 de simetria, **34**, 48
 operador, 7, 8, 19, 33, 62, 79, 100, 107, 109
 conjugado hermitiano do, **20**
 de Coulomb, **21**, 22
 de densidade, **50**
 de energia cinética, **19**
 de Fock, **21**, 22
 elemento da matriz do, **22**, 23
 de inversão, 35
 de inversão fixa no espaço, 34
 de momento, **19**
 angular, 20, 30
 angular (símbolo), 33
 dipolar, 39
 de orbital eletrônico, 27
 de paridade, 34
 de permutação, 34
 de permutação-inversão, 34
 de reflexão, 35
 de rotação, 35
 de rotação-reflexão, 35
 de simetria (símbolo), 34, 35
 de spin eletrônico, 27, **30**
 de spin nuclear, **30**
 de troca, **21**, 22
 del, **111**
 elemento da matriz do, **19**
 gradiente, 8, 111
 hamiltoniano, **19**
 identidade, 34, 35
 inverso, 110
 laplaciano, **111**
 lógico, 111, 112
 matemático, 7, 8, 107, **109**

- nabla, 19, **111**
- valor esperado do, **19**
- vetorial, 33
- orbital
 - atômico, 20
 - função de base do, **20**, 22
- de um elétron
 - energia de, **21**
 - momento angular, 35
- do tipo Slater, 22
- eletrônico, 30
 - momento angular, 33
 - operador de, 27
- eletrônico mais spin
 - momento angular, 33
- gaussiano, 22
- molecular, **20**, 21, **22**
 - (símbolo), 21
 - ocupado, 22
 - spin- (símbolo), 21
- monoeletônico, 35, 36
- nuclear (rotacional)
 - momento angular, 33
- ordem
 - da função de Legendre, 19
 - de carga, **20**
 - de ligação, **20**, 22
 - de reação, 67, 70, 76
 - global, **67**
 - parcial, **67**, 68
 - de reflexão, 46
 - de um tensor, 17
- parâmetro de
 - de curto alcance, 46
 - de longo alcance, 46
- oscilador
 - força de, 41
 - linear amortecido, 8, 103
- osmols, **63**
- Overhauser
 - intensificação nuclear, 32
- oxidação, 57, 64, 79
 - constante de velocidade de, **76**
- número de, 54
- reação de, 76
- padrão
 - (símbolo), 76
 - primário de pH, 80
 - secundário de pH, 80
- parâmetro
 - de assimetria, **27**
 - de Wang, **27**
 - de blindagem, 22
 - de distância efetiva, 29
 - de energia, **20**
 - de Grüneisen, **47**
 - de impacto, 69
 - de ordem
 - de curto alcance, 46
 - de longo alcance, 46
 - de rede, 46
 - de Weinberg, 115
 - do recíproco da energia, **50**
 - efetivo, 115
- parâmetros
 - da equação de van der Waals, 61
- parafuso
 - n*-ésimo (símbolo de Hermann-Mauguin), 48
- parceiro de colisão, 69
- paridade, 34, 126
 - (símbolo), **35**, 126
 - operador de, 34
 - violação de, 34
- parsec, 142
- parte
 - por bilhão, **103**
 - por cem, **103**
 - por cem milhões, **103**
 - por mil, **103**
 - por milhão, **103**
 - por quatrilhão, **103**
 - por trilhão, **103**
- partição, 34
 - de carga de equilíbrio, 78
 - função de, 43
 - ensemble canônico, **50**
 - ensemble grande canônico, **50**
 - ensemble microcanônico, **50**
 - molécula simples, **49**
 - molecular para o estado de transição, **70**
 - molecular por unidade de volume, **70**
- partícula, 49, 58, 69, 92
 - α , 8, 54, 119, 120
 - β , 54, 119
 - densidade de fluxo de, 48
 - elementar
 - (símbolo), 8, 24, **54**, 117
 - vetor de posição de uma, 46
- pascal, **93**, 144

PDG, **115**, 117, 119
pé, 141
pebi, 95
Péclet
 número de, **86**
 para transferência de massa, **86**
Peltier
 coeficiente de, **47**
percurso
 comprimento do, 13, 40
 livre médio, 48, **69**, 85
 do elétron (símbolo), 84
 óptico, 42
 óptico de absorção, 41
perda
 ângulo de, **17**
 por reflexão, 40
perímetro por diâmetro, 116
período, **13**
permeabilidade, 8, 85, **94**
 do vácuo, 149
 magnética, 151
 relativa, **17**, **153**
 (símbolo), 5
 adimensional, 151
permissividade, **16**, 45, 94
 do vácuo, **16**, 149
 elétrica, 151
 relativa, **16**, 44, 151, 152
 adimensional, 151
 complexa, 44
permutação, 34
 grupo de, 34
 operador de, 34
permutação-inversão, 34
 grupo de, 34
 operador de, 34
perturbação da concentração, 68
peso, **15**
 atômico, **51**, 121, 125
 padrão, **51**, 121–125
estatístico, **28**, **49**
 de spin, 49
 molecular, **51**
peta, 95
petabinário, 95
pH, 5, **74**, **79**, 80
 definição de, 74, **79**
 grandeza, 79
 medição experimental de, 80
 medida de, **80**
 padrão primário de, 80
 padrão secundário de, 80
 símbolo, **74**, 79
pico, 95
picomol, 103
píon, 119
Planck
 constante de, 9, 24, 38, 99, **115**
 dividida por 2π , **24**, **38**, 115, 151
 função de, **60**
plano, 13
 da rede, 48
 de polarização, 42
 de rotação, 13, 34
 em um cristal
 símbolos, 48
 reticular, 83
planos da rede
 distância entre, 46
Plasma
 Física de, 24
poder
 de coleta de luz, **40**
 de resolução, **40**
 rotatório
 específico, 42
 óptico específico, **41**, 42
 óptico molar, **41**, 42
poise, 144
polarização
 (volumétrica), **147**
 dielétrica, **16**, 44, **152**
 elétrica, **16**
 plano de, 42
polarizabilidade, 17, 26, 140, 141, 147
 elétrica, 99
 molar, 17, **45**
 complexa, **45**
 no limite de frequência infinita, **45**
 volume de, 147
polegada, 141
Polímeros
 Química de, 11
politropia, 49
Polo-Wilson
 equação de, **45**
ponderada pela massa
 coordenada vibracional, 29
ponte salina, 78

ponto
de carga zero (abreviação), 82
isoelétrico (abreviação), 82
triplo (subscrito), 63
zero
distância interatômica média no, 29
energia de, 68, 70
população, 45
fração de, 42, 43
média, 50
por mil, 102
porcentagem, 102, 126
posição
vetor, 13, 108
de equilíbrio de um íon, 46
de um elétron, 46
de uma partícula, 46
molecular, 49
pósitron, 54, 119
positrônio, 120
potência, 14, 93, 103, 104, 144
amplificador de, 104
de referência, 103, 104
de sinal
nível de, 103
nível de, 104
uma grandeza de, 96
radiante, 38
por unidade de área, 39
térmica, 61, 85
transmitida, 40
potencial
absoluto de eletrodo, 75
ao redor de dipolo no vácuo, 152
barreira de, 98
de célula, 16, 75, 78
de contato
diferença de, 78
de eletrodo, 75, 76, 79
de equilíbrio, 76
padrão, 76, 79
de equilíbrio, 76, 78
de Galvani
diferença de, 75, 76
de ionização, 24
de junção líquida, 76, 78, 80
de Nernst, 76
de reação de célula eletroquímica, 78
de Volta
diferença de, 74
diferença de, 17, 75, 78, 98
de uma célula eletroquímica, 75, 80
elétrico, 16, 74, 79, 93, 146
diferença de, 16, 48, 78
externo, 74
interno, 74
superficial, 74
eletrocinético, 77
eletromagnético, 153, 154
eletrônico, 25, 68
eletroquímico, 75
diferença de, 75
eletrostático, 74, 152
eletrostático (de uma fase), 74
energia de dissociação
a partir do mínimo de, 24
externo
diferença de, 74
formal, 76
interno, 75
diferença de, 75
na trajetória adiabática, 71
padrão (de eletrodo), 76, 80
de reação de célula eletroquímica, 78
químico, 5, 6, 8, 48, 50, 61, 65
gradiente de, 48
padrão, 61, 65, 66
reversível, 76
superficial, 74
vetor magnético, 18, 152, 153
 ζ , 77
Poynting
vetor de, 18, 39, 154
Poynting-Umov
vetor de, 18
ppb, 103
ppcm, 103
ppm, 102, 103, 148
ppq, 103
ppt, 103
Prandtl
número de, 86
prefixo
(símbolo), 95
decimal, 89
para múltiplo binário, 95
SI, 89, 95, 96, 98
pressão, 6, 14, 43, 52, 68, 85, 93, 137, 144
(total), 52
baixa, 62

coeficiente de, **60**
constante de equilíbrio
 com base em, **62**
de referência, **104**
de vapor, 64, 137
do estado padrão, 66
fatores de conversão da, 249
osmótica, **63**
padrão, 52, 65, **66**, 79
parcial, 5, 42, **52**, 67
relativa
 coeficiente de, **60**
sonora
 nível de, 104
superficial, **81**
unidade de, 135
velocidade de variação da, 8, **67**

primeira ordem
 cinética de, 71
 coeficiente de velocidade de, 71
 constante de velocidade de, 70
 reação de, 76
probabilidade, 49, 50, 69, 159, 160
 de transição, **69**
 de transição de Einstein, 41, 43
densidade de, **19**, 157
 corrente de, **19**
distribuição de, **157**, 160
estimada, 160
média, 50
processo, 64
 de transporte, 5, 67
 físico-químico (símbolo), 63

produto
 antissimetrizado, 21
 cruzado, **111**
 de grandezas físicas, 7
 de matrizes, **111**
 de reação, 56, 57, 71, 76
 trajetória de, 69
 de solubilidade, 62
 de unidades, 7
 entidade, 57
 escalar, **111**
 externo, **111**
 vetorial, **111**

projeção
 da incerteza, 155, **158**
 de Fischer, **56**

propagação

de incerteza, 159, 160
vetor de, **47**

propriedades
 coligativas, 58
 de elementos químicos, **121–125**
 de nuclídeos, **126–133**
 de partículas, **119**, **120**
 de transporte, 85, 86
 termodinâmicas, 66

protótipo internacional do kilograma, 91

próton, 8, 32, 53, **119**
 (símbolo), 24, 54

blindado
 momento magnético do, **116**, **120**
 razão giromagnética do, **116**
 carga do, 24, 74, **145**
 massa do, 32, **115**

momento
 magnético do, **116**, **120**
 magnético do (símbolo), 25
 número de, 21, 24, 26, 53, 126
 razão giromagnética do, **116**

pulsação, **38**

quadrupolo
 área do, **147**
 nuclear
 área de, 28
 constante de, 31
 momento de, 26
 tensor energia de interação de, 26

qualidade
 fator de, **40**

quantidade, 4, **51**, **57**, 58, 63, 93
 adsorvida, 81
 concentração de, 4, 41, 42, **52**, 67, 85, 94
 velocidade de reação com base em, **67**
 de eletricidade, **16**
 de excesso superficial, 81, 82
 de Gibbs superficial, 82
 de substância, 4, 6, 49, **51**, 52, 55, **57**, 58, 60, 67, 75, 89–93
 adsorvida, 82
 concentração de, 6, 94
 de fótons, 72
 fração da, **52**, 85, 102, 126, 139
 densidade de, 145
 fração da, **52**, 53, 102, 103, 139
 química, 4, 49, **51**, **57**
 superficial, 81

quantização
eixo de, 33
quilo, 95
quilograma, 4, 89, 90, **91**, 95, 142
quilometro, 95
quilovolt, 6
Química, 53, 135
 Ambiental, 103
 Analítica, 103
 de Coloides, 81, 82
 de Polímeros, 11
 de Radiação, 38
 de Superfícies, 81
 Geral, 51
 Nuclear, 38, 93, 120
 Quântica, 19, 20, 23, 99, 100
 Teórica, 19, 99, 161
quociente
 de grandezas físicas, 7
 de reação, **62**, 64
 de unidades, 7

rad (dose absorvida de radiação), 145
Radiação
 Química de, 38
radiação, 15, 38, 46, 91
 constante de, **40**
 de corpo negro, 91
 densidade de energia de, **154**
 dose absorvida de, 145
 eletromagnética, 38, 45
 intensidade de, 39
 ionizante de alta energia, 38
 fonte de, 38
 primeira constante de, **40**, 116
 segunda constante de, **40**, 116
 X, 145
 γ , 145
radiância, 38, **39**, 40
radiano, 8, 13, **93**, 103, 142
radical, 54
 livre, 55
 metileno, 137
radioatividade (referida a um nuclídeo), **93**
Radioquímica, 38, 93
raio, 13, 74
 de Bohr, 9, **24**, 99, 116
 de esfera rígida, 68
ramos (de banda rotacional), 37
Rankine
 grau, **144**
Rayleigh
 número de, **86**
razão
 das capacidades caloríficas, **60**
 de mobilidade, **47**
 entre perímetro e diâmetro de círculo (π), 116
 giromagnética, **25**, **29**, **31**
 giromagnética do próton, 116
 giromagnética do próton blindado, 116
 magnetogírica, **25**
reação, 56, 67
 bimolecular, 70, **72**, 73
 constante de velocidade específica para, 70
 de célula,
 potencial padrão de, **76**, 78, 79
 de célula eletroquímica, 57, **78**
 de combustão (subscrito), 63
 de eletrodo, 75, 76, **78**
 de formação (subscrito), 63
 de ordem n , 70
 de oxidação, 76
 de primeira ordem, 71, 76
 de redução, 76
 de segunda ordem, 67, 73
 de terceira ordem, 73
 direta líquida (símbolo), **56**
 elementar, 56, 70, 72, 73, 77
 bimolecular, 73
 molecularidade da, **72**
 unimolecular, 73
 eletroquímica, 75, 76, 79
 número de elétrons de uma, **75**
 potencial de eletrodo de equilíbrio de uma, 76
 em ambas direções (símbolo), 56
 em geral (subscrito), 63
 energia de, 62
 entalpia de, 62, 64
 entropia de, 62, 64
 equilíbrio (símbolo), 56
 extensão da, **52**, 57, 64
 fotoquímica, 72
 global, 73
 grau de, **52**
 monomolecular, **72**
 nuclear (expressão simbólica), 54
 ordem de, **67**, 70, 76
 parcial, 68

- química, **57**, 64, 67, 77
 - equação de uma, 53, 56, 57, 64, 65
 - teoria do estado de transição, 70
- quociente de, 62, 64
- símbolo de, 62
- termolecular, **72**
- trimolecular, **72**
- unimolecular, 70, **72**, 73
 - constante de velocidade de uma, 68, 70
- velocidade de, 67, 73
 - com base em concentração de número, 67
 - com base em concentração de quantidade, 67
- reagente
 - energia de ponto zero do, 68, 70
 - entidade, 57
- reatância, **17**
- recíproco da energia
 - parâmetro do, **50**
- rede
 - cristalina, 46, 83
 - de base centrada (símbolo), 48
 - de corpo centrado (símbolo), 48
 - de face centrada (símbolo), 48
 - distância entre planos da, 46
 - primitiva (símbolo), 48
 - romboédrica (símbolo), 48
 - vetor da, 46
 - vetor de translação fundamental para a, 46
- do substrato, 83
- recíproca
 - vetor da, **46**
 - vetor de translação fundamental para a, **84**
- recíproca 2D
 - vetor de uma (símbolo), 84
- redução, 76, 79
 - assimétrica, 27
 - constante de velocidade de, **76**
 - reação de, 76
 - simétrica, 27
- refletância, **40**
- reflexão, 40, 44
 - (símbolo de Hermann-Mauguin), 48
 - (subscrito), 38
 - coeficiente sonoro de, **15**
 - de Bragg, 48
 - espectro de, 44
 - fator de, **40**
 - operação de, 48
- operador de, 35
- ordem de, 46
- refração, 45
 - índice de, **38**, 44
 - complexo, **41**, 44
 - imaginário, **41**, 44
 - para um líquido, 45
 - real, 44
 - molar, **41**
- refratividade molar, **41**
- regras gerais para símbolos
 - de grandezas, 5
 - de unidades, 6
- relação
 - de Curie, **139**
 - de Maxwell, **149**, 150
- relaxação, 30
 - tempo de, **13**, 31, **47**, **68**
 - longitudinal, 25
 - spin-rede (longitudinal), 31
 - spin-spin (transversal), 31
 - transversal, 25
- rem, 145
- rendimento, **40**, 102
 - fotoquímico, 72
 - quântico, **72**
- repetência, **27**, 135, 137
- representação
 - de célula eletroquímica, 75, **78**
 - de coordenadas, 19
- RES, **29**
- resistência
 - elétrica, **17**, 93, 146
 - térmica, **85**
- resistividade, **17**
 - residual, 47
 - tensor de, **47**
- resolução, 40
 - poder de, **40**
- ressonância, 31, 32
 - de spin
 - espectroscopia de, 25
 - eletrônica de spin, 29
 - estrutura de, 56
 - frequência de, 31, 32
 - de uma molécula referencial, 32
 - do campo de rf irradiante, 32
 - do campo de rf observado, 32
 - padronizada para o núcleo A, 32
 - integral de, **20**

magnética nuclear, 30
 paramagnética eletrônica, 29
 Reynolds
 número de, 5, **86**
 magnético, **86**
 RMN, 29, **30**, 31, 161
 bidimensional
 dimensões de tempo para, 31
 roentgen, 145
 roentgen equivalente homem, 145
 rotação, 126
 ângulo de, 83
 específica, 42
 n-ésima (símbolo de Hermann Mauguin), 48
 operação de, 48
 óptica, 42
 ângulo de, 41, 42
 plano de, 13, 34
 por $2\pi/n$
 operador de (símbolo de Schönflies), 35
 rotação-reflexão
 operador de (símbolo de Schönflies), 35
 rotacional de um campo vetorial, 111
 roto-inversão
 n-ésima (símbolo de Hermann Mauguin), 48
 rotor
 assimétrico, 33, 34, 37
 esférico
 outros, 33
 vibracional interno, 33
 quase oblato, 27
 quase prolato, 27
 simétrico, 33, 37
 simétrico prolato, 33
 rotulação
 de estado excitado, 36
 de estado fundamental, 36
 para espécie de simetria, 34
 RPE, 29
 RRKM
 teoria, 71
 Rydberg
 constante de, **24**, 116
 rydberg, 143
 SACM, 71
 SCF, **20**, 22
 de Hartree-Fock-Roothaan, 23
 Schönflies
 símbolos de, 35
 Schmidt
 número de, **86**
 secção
 circular, 91
 de choque, 26, 42
 de absorção integrada, **42**
 de absorção líquida, **41**
 de absorção líquida integrada, **41**
 de colisão, **68**, 69
 de colisão média, 68
 diferencial, **69**
 integrada líquida, **43**
 total, **69**
 sedimentação
 coeficiente de, **81**
 limite (símbolo), 82
 reduzido (símbolo), 82
 reduzido limite (símbolo), 82
 velocidade de, 82
 segundo, 6, 89, 90, **91**, 96, 103, 143, 149, 150
 segundo (de arco), **96**, 142
 segundo coeficiente do virial, **61**
 segundo-luz, 142
 seio da fase, 44, 75
 semicondutores
 eletroquímica de, 74
 teoria de carga espacial de, 82
 Sherwood
 número de, 86
 SI, **4**
 unidade de base do, 4, 89–92, 95
 unidades, **89**, 99, 141, 149
 conjunto completo de, **89**
 unidades do, **89**, 140
 siemens, 93
 sievert, **93**, 145
 SIG, **4**, 16, 149
 símbolo
 da fórmula, 58
 de (sub)múltiplo decimal, **95**
 de dimensão de grandeza de base, **4**
 de direções em um cristal, **48**
 de elemento químico, 8, 9, **53**, 54, 125
 de espécie de simetria, 107
 de estado eletrônico excitado, **54**
 de estado padrão, 61, **64**, 76
 de grandeza de base, **4**
 de grandeza física, 4–9, 11, 74, 137
 específica, 6
 extensiva, 6

- regras gerais, 5
- de Hermann-Mauguin, **48**
- de Levi-Civita, 110
- de múltiplos binários, **95**
- de operador de momento angular, **33**
- de operador de simetria, **34**
- de operador matemático, 7, **8**
- de partícula elementar, 8, **54**
- de planos em um cristal, **48**
- de prefixo SI, **95**
- de processo físico-químico (subscrito), **63**
- de reação, 62, **64**
- de Schönfliess, **35**
- de termo para estado eletrônico, 55
 - de átomo, **35**
 - de molécula, **35, 36**
- de unidade, 4–6
 - atômica, **99**
 - de base do SI, **90**
 - fora do SI, **96**
 - regras gerais para, **6**
 - SI derivada, **93, 94**
- de variação de uma grandeza, 64, 65
- fontes para, 7
- matemático, 7, 8, 107–112
 - impressão de, **107**, 108
- para estado de agregação, **58**, 59
- para rede cristalina, **48**
- simetria, 8, 17, 26, 34
 - coordenada de
 - constante de força vibracional para, **29**
 - coordenada vibracional de, 29
 - de permutação-inversão, 34
 - eixo de, 33, 35
 - esférica, 151
 - espécie de, 28, 34–36
 - fator de, **77**
 - número de, 50
 - operação de (símbolo), **34, 48**
 - operador de, 34, 35
- Sinal
 - Transmissão de, 103
- sinal
 - convenção de (em Eletroquímica), 77–79
 - de conjunção, **111**
 - de disjunção, **111**
 - de multiplicação, 7
 - decimal, **107**
 - intensidade de, 32
 - para quociente, 7
- sistema, 50
 - americano de nomes, 103
 - aquoso, 79
 - coerente, **97**
 - de camada fechada, 21, 22
 - de coordenadas cartesianas, 111
 - de unidades
 - atômicas, 149, 151
 - coerente, 89, **97**
 - eletromagnético (emu), 149
 - eletrostático (esu), 149
 - emu, 149
 - esu, 149
 - gaussiano, 149, **150**
 - não racionalizado, 139, 151
 - racionalizado, 151
 - eletroquímico, 74
 - multifásico, 75
 - multirreacional, 57
 - não aquoso, 79
- Sistema Internacional (SI), 97
 - de Unidades (SI), 4, **89, 141, 149, 151**
- sobrepotencial, **77**
- sólido, 30, 42, 44, 58, 65, 83
 - (símbolo), **58**
 - amorfo, 59
 - (símbolo), **58**
 - constante de acoplamento hiperfino em, **30**
 - cristalino, 59
- solubilidade, **52, 53**
 - produto de, 62
- solução, 42, 57, 58, 61, **65, 78, 79, 139**
 - (subscrito), 63
 - aquosa
 - (símbolo), **58, 59, 61, 79, 102**
 - infinitamente diluída, 59, 65
 - diluída, 44, 62, 102
 - eletrolítica, 76, 78, 138
 - infinitamente diluída, **58**
 - molal, 52
 - saturada, 52
- soluto, 42, 44, 52, 63, 65, 66, 139
- solvente, 31, 40, 52, 63, **65, 139**
 - orgânico
 - mistura aquosa-, 80
 - puro, 138
- som
 - velocidade do, 13, 85
- soma
 - de estados, **71**

(função de partição), 50
 de operadores de momento angular, **33**
 de todos os estados (função de partição), **49**,
50
 em quadratura, 160
 spin
 eletrônico, 29
 momento angular de, 33
 multiplicidade de, 35
 operador de, 27, 30
 função de onda de, 31
 momento angular de, 20, 30, 119
 multiplicidade de, 35
 número quântico de, 119
 nuclear, 29, 32, 33
 degenerescência de, 28
 momento angular de, 33
 número quântico de, 126, **127–133**
 operador de, 30
 peso estatístico de, 49
 ressonância eletrônica de, 29
 tensor de acoplamento indireto de, 30
 spin-orbital
 constante de acoplamento, **27**
 molecular, 21
 spin-rede
 tempo de relaxação
 (longitudinal) para núcleo A, 31
 spin-rotação
 do núcleo A
 constante de acoplamento, 30
 tensor de interação, 30
 spin-spin
 nuclear através de n ligações
 acoplamento, 31
 nuclear reduzido
 constante de acoplamento, **31**
 tempo de relaxação
 (transversal) para o núcleo A, 31
 Stanton
 número de, **86**
 para transferência de massa, **86**
 statcoulomb, 150
 Stefan-Boltzmann
 constante de, **39**, 116
 STO, 22
 stokes, 144
 Strouhal
 número de, **86**
 sublimação (subscrito), **63**
 submúltiplo decimal de unidade, 6, 89, **95**
 substância
 adsorvida
 quantidade de, 82
 concentração de, **52**
 pura, 60, **65**
 (sobrescrito), 64
 química, 55
 quantidade de, **92**, 93
 simples
 estado de referência de uma, **66**
 vítrea, 58
 substrato, 71, 83
 2D
 vetor da base de um (símbolo), 84
 recíproco 2D
 vetor da base de um (símbolo), 84
 rede do, 83
 super-rede, 83
 2D
 vetor da base de uma (símbolo), 84
 centrada, 83
 matriz para a notação de uma (símbolo), 84
 primitiva, 83
 recíproca 2D
 vetor da base de uma (símbolo), 84
 superfície, 39, 82, 85
 área de, 53, 75
 2D
 vetor de base de, 83
 coordenada perpendicular à (símbolo), 84
 de Gibbs, 81, 82
 demarcadora de Gibbs, 81, 82
 densidade de, **14**
 densidade de carga de, **75**
 efeito de, 40
 escalonada, 83
 espécie adsorvida em (símbolo), **58**
 estrutura de, 83
 potencial elétrico de, 74
 super-rede em (notação), 83
 Superfícies
 Química de, 81
 susceptância, **17**
 susceptibilidade
 elétrica, **16**, 151, 152
 magnética, **17**, 139, 148, 151, 153
 molar, **17**, 139, 148
 molar não racionalizada, 148
 svedberg, 143

t de Student
distribuição de probabilidade, 157, 160
tabelas de conversão para unidades, 141–148
Tafel
coeficiente de, 77
tampão de pH padrão primário, 80
tau
neutrino do, 119
taxa
de dose absorvida, 94
de fluxo de energia radiante, 154
de transferência, 40
tebi, 95
Telecomunicação, 103
temperatura, 6, 39, 42, 43, 45, 60, 65–68, 91, 135, 139
característica, 47, 50
Celsius, 42, 50, 60, 93, 115, 144
centígrada, 60
centesimal, 60
de Curie, 47
de Debye, 47, 50
(símbolo), 84
de Einstein, 50
de Néel, 47
de Weiss, 47
Fahrenheit, 144
international, 60
padrão, 65
Rankine, 144
rotational, 50
termodinâmica, 4, 60, 85, 89–91, 93, 144
vibracional, 50
tempo, 4, 8, 13, 39, 85, 89–91, 96, 141, 143, 149, 150
característico
intervalo de, 13
constante de, 13
de correlação, 31, 32
de decaimento, 68
de relaxação, 13, 47, 68
longitudinal, 25
spin-rede (longitudinal) para o núcleo A, 31
spin-spin (transversal) para o núcleo A, 31
de vida, 26, 48, 68, 126
médio, 68
natural, 72
dimensões de
para RMN bidimensional, 31
transversal, 25
unidade atômica de, 99, 143
tensão, 93
de cisalhamento, 15, 85
tensor, 85
do filme, 81
elétrica, 16, 93, 146
interfacial, 81, 82
linear, 15
normal, 15
superficial, 14, 60, 81, 82, 85, 94
volumétrica, 15
tensor, 7, 8, 17, 25, 26, 30, 48
(símbolo), 5
de acoplamento indireto de spin, 30
de blindagem, 32
de condutividade, 47
térmica, 47
de interação
dipolar, 30
spin-rotação, 30
de resistividade, 47
de segunda ordem, 16, 17
(símbolo), 5, 108
energia de interação quadrupolar, 26
gradiente do campo elétrico, 26, 31
ordem de, 17
tensão de cisalhamento, 85
teoria
ab initio SCF, 20
da relatividade, 150
de carga espacial de semicondutores, 82
de Debye-Hückel, 80
de Gouy-Chapman, 82
de grupos, 107
de Hückel, 20
de Hartree-Fock, 20
de quase-equilíbrio, 70
de reações unimoleculares, 70
de Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus, 70, 71
do campo autoconsistente, 20
do estado de transição, 70
do grupo simétrico, 34
eletromagnética, 149, 152
equações da, 152–154
geral de colisões, 69
HMO, 20
LCAO-MO, 22
quântica de espalhamento, 69
RRKM, 71

- SCF de Hartree-Fock-Roothaan, 22
 tera, 95
 terabinário, 95
 terceiro coeficiente do virial, **61**
 termo, 27, 28, 38
 eletrônico, **27**
 símbolo para, **35**, 55
 rotacional, **27**
 total, **27**
 valor de, 27
 vibracional, **27**, 28
 fórmula do, **28**
 Termodinâmica
 Estatística, 49
 Química, 60, 63
 tesla, 93, 147
 Thomson
 coeficiente de, **47**
 tonelada, 96
 métrica, 142
 torque, **14**
 torr, 144
 trabalho, **14**, 60, 74, 93
 (símbolo), 84
 função, **47**
 do elétron, **47**
 variação da (símbolo), 84
 traço de matriz quadrada, 111
 trajetória, 69
 adiabática, 71
 potencial na, 71
 de partículas, 69
 de produtos, 69
 de reagentes, 69
 trajetórias
 adiabáticas
 modelo estatístico de, 71
 de reação adiabáticas abertas
 número de, **71**
 transferência
 coeficiente de, **77**
 anódico, 77
 catódico, 77
 de calor
 coeficiente de, **85**
 de carga, 75, 76, 78
 de massa
 coeficiente de, **77**, 85
 número de Fourier para, **86**
 número de Grashof para, **86**
 número de Nusselt para, **86**
 número de Péclet para, **86**
 número de Stanton para, **86**
 no estado estacionário, 77
 de momento, **47**, 115
 taxa de, 40
 transição, 36, 37, 39, 41–43, 45
 comprimento de onda de, 41
 de dipolo elétrico, 39, 43
 de Einstein
 probabilidade de, 41, 43
 eletrônica, 41
 entre fases (subscrito), **63**
 espectroscópica, **36**
 estado de, 68, 70
 (sobrescrito), **64**
 densidade de estados do, **71**
 função de partição molecular para o, **70**
 número de estados do, **71**
 teoria do, 70
 frequência de, **27**
 momento de, 39, 43
 momento dipolar de (molécula), **29**, 45
 número de onda de, **27**
 probabilidade de, **69**
 quente, 45
 radiante, 42
 induzida, 42
 velocidade de, 44
 rotacional, 37
 vibracional, 36
 vibrônica, 36
 translação fundamental
 (angular) para a rede recíproca
 vetor de, **46**
 para a rede cristalina
 vetor de, **46**
 transmissão, 44
 fator de, 40
 Transmissão de Sinal, 103
 transmitância, **40**
 espectro de, 40
 transporte
 de matéria, 86
 fenômeno de, 85
 número característico de, 86
 número de, **77**
 processo de, 5, 67
 propriedades de, 85, 86
 trilhão, 103

trítón, 54, 119, 120

ua (unidade atômica), **99**

de ação, 144

de corrente elétrica, 145

de densidade de carga, 146

de densidade de fluxo magnético, 147

de força, 143

de gradiente do campo elétrico, 146

de intensidade do campo elétrico, 146

de magnetizabilidade, 148

de momento dipolar elétrico, 147

de momento dipolar magnético, 148

de momento quadrupolar elétrico, 147

de polarizabilidade, 147

de potencial elétrico, 146

de tempo, 143

unidade

astronômica, 9, **96**, 98, 142

atômica, 4, 19–21, 24, 26, 28, **99**, 99, 100, 101, 135, 138, 141, 149–151

símbolo para, 99–101

CGS, 101, 141–144

de base, 38, 91, 150

de base do SI, 4, 89–92, 95

símbolo para, 90

de entropia, **145**

de enzima, 93

de massa atômica unificada, 9, 24, 51, **96**, 98, 115, 120, 121, 126, 142

derivada coerente, 89

eletromagnética, 135, 141, 150

eletrostática, 141, 150

fora do SI, 28, 29, 52, 96, 141–148

aceita, 96

múltiplo decimal de, 89, **95**

não racionalizada, 135, **151**

produto de, 7

quociente de, 7

racionalizada, **151**

símbolo de, 4, 6, 87, 96

SI, 101

SI coerente, 89

SI derivada, 89, 93, 94

submúltiplo decimal de, 89, **95**

térmica britânica, 143

x, 141

unidades

conversão de, 135

do SI, 89

conjunto completo de, 89

valência

elétrons de, 56

valor

de *f*, **41**

de termo, 27

esperado

de *x*, **157**

do operador \hat{A} , **19**

máximo, 25, 26, 126

para o hamiltoniano do cerne, **21**

médio

de *a*, 109

estimado, 45

relativo, 102

van der Waals

constante de, 81

retardada, 81

equação de estado de, 61

parâmetros da equação de, **61**

van der Waals-Hamaker

constante de, 81

vapor

(símbolo), 58

pressão de, 64

da água (a 20°C), 137

vaporização (subscrito), 63

variação

(símbolo), 64

da concentração (devido a reação química)

velocidade de, **67**

da função trabalho (símbolo), 84

da grandeza *X*

velocidade de, **67**

de *x*, **110**

infinitesimal

de *f*, 110

infinitesimal (símbolo), 8

variância, **157**, 158

análise de (ANOVA), 158

estimada, 158

velocidade, **13**, 73, 85, 94, 97, 99, 154

angular, **13**, 93, 94

coeficiente de, 67, 71

constante de, 67–70, 73

de fluorescência, 72

de oxidação, **76**

de pré-dissociação, 72

de reação bimolecular, 70

- de reação unimolecular, 68, 70, 71
- de redução, **76**
- da luz, 9, 13, 16, 27, **38**, 47, 99, 115, 149–151
- de absorção de fôtons, 72
- de conversão, **67**, 72, 93
- de decaimento
 - constante de, **26**
 - da energia armazenada, 40
- de desintegração
 - constante de, **26**
- de difusão, 78
- de efusão, 85
- de escoamento, 85
- de fluência, 39
- de migração, 77
- de reação, **67**, 73
 - (com base em concentração de número), **67**
 - (com base em concentração de quantidade), **67**
- de sedimentação, 82
- de transição radiante, 44
- de variação, 39
 - da concentração (devido a reação química), **67**
 - da grandeza X , **67**
 - da pressão, 8, **67**
- do elétron na esfera de Fermi, 48
- do som, 13, 85
- equação de, 71
- função distribuição de, 49
- lei de, 73
- limitante, 71
- média, **49**, 85
- matriz dos coeficientes de, 71
- molecular
 - vetor, 49
- relativa média, 68
- relativa média entre A e B, 68
 - vetor, **13**
- velocidades
 - função de distribuição de, 49
- vetor, 5, 7, 13, 16, 76, 83, 108, **111**, 149
 - \mathbf{a} , 111
 - (símbolo), 8
 - concentração, **71**
 - da rede, **46**
 - de Bravais, **46**
 - recíproca (angular), **46**
 - de base
- de um substrato 2D, 84
- de um substrato recíproco, 84
- de uma super-rede 2D, 84
- de uma super-rede recíproca, 84
- de uma superfície 2D, 83
- de Burgers, 46
- de deslocamento de um íon, **46**
- de dipolo, 17
- de onda angular, **47**
- de posição, 46
 - de equilíbrio de um íon, 46
 - de uma partícula, 46
- de Poynting, **18**, 39, 154
- de Poynting-Umov, 18
- de propagação, **47**
- de translação fundamental
 - (angular) para a rede recíproca, **46**
 - para a rede cristalina, 46
- de uma rede recíproca 2D, 84
- de uma super-rede 2D, 83
- do índice de Miller, 83
- fluxo de calor, 48
- intensidade do campo elétrico, 77
- magnético
 - potencial, 18, **152**, **153**
- momento dipolar, 16
- momento molecular, **49**
 - posição, **13**, 108
 - posição molecular, 49
 - unitário, 13, 85
 - em sistemas de coordenadas cartesianas, 111
- velocidade, **13**
 - velocidade molecular, **49**
- via de acoplamento, 31
- vibração
 - fundamental, 28
 - harmônica
 - número de onda de uma, **28**
- vida-média, **26**, **68**, 119, 120
- violação de paridade, 34
- virial
 - coeficiente do
 - de pressão, 61
 - segundo, **61**
 - terceiro, **61**
- viscosidade, **15**, **85**
 - cinemática, **15**, 94, 144
 - de cisalhamento, 94
 - dinâmica, **15**, **85**, 94, 144

volumétrica, **85**
volt, **93**, 98, 140, 146
 internacional
 (EUA), 146
 médio, 146
Volta
 diferença de potencial de, **74**
voltagem da célula eletroquímica, 75
volume, 6, 13, 26, 47, 48, 52, 61, 67, 69, 70, 85,
 94, 96, 140, 142, 153
 de ativação, **69**
 de polarizabilidade, 147
enplético, 6
específico, **6**, **14**, 94
mássico, 6
molar, 5, **6**, 17, 45, **51**, 61, 94, 145
 da fase β (símbolo), **59**
 da fase líquida (símbolo), **59**
 da fase sólida (símbolo), **59**
 de um cristal líquido (símbolo), **59**
 do gás ideal, 115
 parcial, 61
no espaço de fase, **49**
total, 51
volúmico (uso deste adjetivo), **6**

Wang
 parâmetro de assimetria de, **27**

watt, 92, **93**, 144

Weber
 número de, **86**

weber, **93**, 147

Weinberg
 parâmetro de, 115

Weiss
 temperatura de, 47

Wood
 notação de, 83

yobi, 95
yocto, 95
yotta, 95
yottabinário, 95

Young
 módulo de, **15**

zebi, 95
zepto, 95
zetta, 95
zettabinário, 95
zona

NOTAS

FATORES DE CONVERSÃO DA PRESSÃO

	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	$\approx 0,986\ 923$	$\approx 750,062$	$\approx 14,5038$
1 atm	= 101 325	= 101,325	= 1,013 25	= 1	= 760	$\approx 14,6959$
1 Torr	$\approx 133,322$	$\approx 0,133\ 322$	$\approx 1,333\ 22 \times 10^{-3}$	$\approx 1,315\ 79 \times 10^{-3}$	= 1	$\approx 1,933\ 68 \times 10^{-2}$
1 psi	$\approx 6894,76$	$\approx 6,894\ 76 \times 10^{-2}$	$\approx 6,894\ 76 \times 10^{-2}$	$\approx 6,804\ 60 \times 10^{-2}$	$\approx 51,714\ 94$	1

Exemplos do uso desta tabela:

1 bar	$\approx 0,986\ 923$	atm
1 Torr	$\approx 133,322$	Pa

Nota: 1 mmHg = 1 Torr, até melhor que 2×10^{-7} Torr, vide Secção 7.2, p. 144.

FATORES DE CONVERSÃO PARA EQUIVALENTES DA ENERGIA

$$E = h\nu = hc\tilde{\nu} = kT; E_m = N_A E$$

	número de onda $\tilde{\nu}$ cm ⁻¹	frequência ν MHz	energia E aJ	energia E eV	energia molar E_m E_h	energia molar E_m kJ mol ⁻¹	temperatura T K
$\tilde{\nu}$: ν :	1 cm ⁻¹ \cong 1 MHz \cong $3,335 \times 10^{-5}$	$2,997 \times 10^4$ 1	$1,986 \times 10^{-5}$ 6,626 $\times 10^{-10}$	$1,239 \times 10^{-4}$ 4,135 $\times 10^{-9}$	$4,556 \times 10^{-6}$ 1,519 $\times 10^{-10}$	$11,962 \times 10^{-3}$ 3,990 $\times 10^{-7}$	$2,859 \times 10^{-3}$ 9,537 $\times 10^{-8}$
E :	1 aJ \cong 1 eV \cong E_h	50×10^9 $8065,544$ 219×10^6	$1,509 \times 10^9$ $2,417 \times 10^8$ $6,579 \times 10^9$	1 $0,160 \times 10^{-1}$ $4,359 \times 10^{-3}$	$0,229 \times 10^{-2}$ $3,674 \times 10^{-2}$ $27,211 \times 10^{-3}$	602×10^{14} $96,485 \times 10^{33}$ $2625,500$	$143,9326$ $23,060 \times 10^5$ $627,5095$
E_m :	1 kJ mol^{-1} \cong 1 kcal mol^{-1}	$83,593 \times 10^6$ $349,7551$	$2,506 \times 10^6$ $1,048 \times 10^7$	$1,660 \times 10^{-3}$ $6,947 \times 10^{-3}$	$1,036 \times 10^{-2}$ $4,336 \times 10^{-2}$	$3,808 \times 10^{-4}$ $1,593 \times 10^{-3}$	1 $4,184$
T :	1 K	\cong $0,695 \times 10^4$	$2,083 \times 10^4$	$1,380 \times 10^{-5}$	$8,617 \times 10^{-5}$	$3,166 \times 10^{-6}$	$8,314 \times 10^{-3}$
					1	$0,239 \times 10^{-7}$	$120,2724$
						1	$503,2197$
						$1,987 \times 10^{-3}$	1

O símbolo \cong deve ser lido com o significado de ‘aproximadamente correspondendo a’ ou ‘é aproximadamente equivalente a’. A conversão de kJ para kcal é exata por definição da kcal termodinâmica (vide Secção 2.11, nota 16, p. 62). Os valores nesta tabela foram obtidos a partir das constantes apresentadas no Capítulo 5, p. 115. O último algarismo é fornecido, mas pode não ser significativo. Valores atualizados de alguns desses fatores podem ser consultados na seguinte página web do *National Institute of Standards and Technology*: <http://physics.nist.gov/cuu/Constants/energy.html>.

Exemplos do uso desta tabela:

$$\begin{aligned} 1 \text{ aJ} &\cong 50 \text{ 341,17 cm}^{-1} \\ 1 \text{ eV} &\cong 96,485 \text{ 33 kJ mol}^{-1} \end{aligned}$$

Exemplos da derivação dos fatores de conversão:

1 aJ para MHz

$$\begin{aligned} \left(\frac{1 \text{ aJ}}{h} \right) &\cong \frac{10^{-18} \text{ J}}{6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}} \cong 1,509 \times 10^{15} \text{ s}^{-1} \cong 1,509 \times 10^9 \text{ MHz} \\ \left(1 \text{ cm}^{-1} \right) hc \left(\frac{e}{c} \right) &\cong \frac{(1,986 \times 10^{-14} \text{ J}) \times 10^2}{1,602 \times 10^{-19} \text{ C}} \cong 1,239 \times 10^{-4} \text{ eV} \end{aligned}$$

1 E_h para kJ mol⁻¹

$$(1 E_h) N_A \cong (4,359 \times 10^{-18} \text{ J}) \times (6,022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}) \cong 2625,500 \text{ kJ mol}^{-1}$$

1 kcal mol⁻¹ para cm⁻¹

$$\begin{aligned} \left(\frac{1 \text{ kcal mol}^{-1}}{hcN_A} \right) &\cong \frac{4,184 \times (1 \text{ kJ mol}^{-1})}{(1,986 \times 10^{-14} \text{ J}) \times 10^2 \text{ cm} \times (6,022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1})} \cong 349,7551 \text{ cm}^{-1} \end{aligned}$$

Tabela Periódica dos Elementos - IUPAC



Símbolo
número atômico
peso atômico convencional
peso atômico padrão

1	H hidrogênio 1,008 [1,0078-1,0082]	2	He helíio 4,0026
3	Li lítio 6,94 [6,938-6,997]	4	Be berílio 9,0122
11	Na sódio 22,990 [24,004-24,307]	12	Mg magnésio 24,305
19	K potássio 39,098 [40,078-41]	20	Ca cálcio 44,956 [47,867]
37	Rb rubídio 85,468 [87,82]	38	Sr estrôncio 88,906 [91,224(2)]
55	Cs célio 132,91 [137,33]	56	Ba bário 178,49(2) [180,95]
87	Fr frâncio 232,04 [231,04]	88	Ra actinídeos [89-103]
57	La lanthanio 138,91 [140,12]	58	Ce cério 140,91 [144,24]
89	Ac actínio [232,04]	59	Pr praseodímio [140,91]
90	Th tório 238,03 [231,04]	60	Nd neodímio [150,36(2)]
61	Pm promécio [151,96]	62	Sm samário [157,25(3)]
63	Eu europio [158,93]	64	Gd gadolinio [162,50]
65	Tb térbio [164,93]	66	Dy disprosio [167,26]
67	Ho hólmio [168,93]	68	Er érbio [173,05]
69	Tm túlio [174,97]	70	Yb íterbio [175,05]
71	Lu lutécio [174,97]	72	Sc silício [175,99]
13	B boro 10,81 [10,806-10,821]	14	C carbono 12,011 [12,009-12,012]
15	N nitrogênio 14,007 [14,006-14,008]	16	O oxigênio 15,999 [15,999-16,000]
17	F fluor 18,998 [18,998-19,000]	18	Ne neônio 20,180 [20,180-20,182]
19	Al alumínio 26,982 [26,982-26,983]	20	Si silício 28,005 [28,004-28,006]
21	Ge germânio 74,922 [74,922-74,923]	22	As arsêno 79,901 [79,901-79,907]
23	Zn zincos 65,38(2) [65,38(2)-65,393]	24	Co cobalto 58,993 [58,993-59,994]
25	Mn manganês 54,938 [54,938-55,939]	26	Fe ferro 55,935(2) [55,935(2)-55,936]
27	Ni níquel 58,693 [58,693-59,694]	28	Cu cobre 63,546(3) [63,546(3)-63,547]
29	Zn zincos 65,38(2) [65,38(2)-65,393]	30	Ga gálio 69,723 [69,723-69,724]
31	Ga gálio 72,630(8) [72,630(8)-72,631]	32	Ge germânio 78,971(8) [78,971(8)-78,972]
33	As arsêno 74,922 [74,922-74,923]	34	Se selênio 79,901 [79,901-79,907]
35	Br bromo 79,904 [79,904-79,905]	36	Kr criptônio 83,798(2) [83,798(2)-83,799]
37	Ag prata 50,51 [50,51-51,52]	38	Te telúrio 52,53 [52,53-53,54]
39	Cd cadmio 49,51 [49,51-50,52]	39	I iodo 79,904 [79,904-79,905]
40	Rh ródio 101,07(2) [101,07(2)-101,07(3)]	41	Pd paládio 106,42 [106,42-106,43]
42	Mo molibdênio 95,95 [95,95-96,96]	43	Tc tecncêio 107,87 [107,87-107,88]
44	Ru rutenio 102,91 [102,91-102,92]	45	Rh ródio 112,41 [112,41-112,42]
46	Pd paládio 106,42 [106,42-106,43]	47	Ag prata 114,82 [114,82-114,83]
48	Pd paládio 106,42 [106,42-106,43]	49	In índio 118,71 [118,71-118,72]
50	Sb estanho 118,71 [118,71-118,72]	51	Sb estanho 121,76 [121,76-121,77]
52	Te telúrio 127,60(3) [127,60(3)-127,60(4)]	53	I iodo 126,90 [126,90-126,91]
53	Te telúrio 127,60(3) [127,60(3)-127,60(4)]	54	Xe xenônio 131,29 [131,29-131,30]
54	Te telúrio 127,60(3) [127,60(3)-127,60(4)]	55	Rn radônio 186,97 [186,97-186,98]
55	Os ósmito 183,84 [183,84-183,85]	56	Pb chumbo 195,08 [195,08-195,09]
57	Ir íridio 188,21 [188,21-188,22]	58	Au ouro 192,22 [192,22-192,23]
59	Pt platina 190,23(3) [190,23(3)-190,23(4)]	59	Hg mercúrio 196,97 [196,97-196,98]
60	Ir íridio 190,23(3) [190,23(3)-190,23(4)]	61	Tl tálio 200,59 [200,59-200,60]
61	Ds darmstádio 110,111 [110,111-110,112]	62	Pb bismuto 204,38 [204,38-204,39]
62	Ds darmstádio 110,111 [110,111-110,112]	63	Bi bismuto 207,2 [207,2-207,3]
63	Rg roentgenio 111,112 [111,112-111,113]	64	Po polônio 208,98 [208,98-208,99]
64	Cn copernício 112,113 [112,113-112,114]	65	At astato 211,114 [211,114-211,115]
65	Nh níhonio 113,114 [113,114-113,115]	66	Rn radônio 216,9 [216,9-216,10]
66	Fl fleróvio 114,115 [114,115-114,116]	67	Lv livermório 216,9 [216,9-216,10]
67	Mc moscovio 115,116 [115,116-115,117]	68	Ts tennesso 217,0 [217,0-217,1]
68	Mc moscovio 115,116 [115,116-115,117]	69	Og oganessonio 217,0 [217,0-217,1]

Para notas e atualizações a esta tabela, vide www.iupac.org. Esta é a versão de 28 de novembro de 2016.
© 2016 IUPAC - União International de Química Pura e Aplicada.



INTERNATIONAL UNION OF
PURE AND APPLIED CHEMISTRY

Tabela Periódica dos Elementos - IUPAC



número atómico
Símbolo
nome
peso atómico convencional
peso atómico padrão

1	H hidrogénio [1.0078, 1.0082]	2	He hélio 4.0026
3	Li lítio 6.94 [6.938, 6.957]	4	Be berílio 9.0122
11	Na sódio 22.990 [24.304, 24.307]	12	Mg magnésio 24.305
19	K potássio 39.098 [40.0784]	20	Ca cálcio 44.956 [47.867]
37	Rb rubídio 85.468 [87.62]	38	Sr estrônio 88.906 [91.224(2)]
55	Cs céssio 132.91 [137.33]	56	Ba barío 178.949(2) [180.95]
87	Fr frâncio 232.04 [231.04]	88	Ra rádio actinídeos [89-103]
57	La lántanio 138.91 [140.12]	58	Ce cério 140.91 [144.24]
89	Ac actínio 232.04 [231.04]	90	Th tório 238.03
13	B boro 10.81 [10.806, 10.821]	14	C carbono 12.011 [12.009, 12.012]
15	N nitrogénio 14.007 [14.006, 14.008]	16	O oxigénio 15.999 [15.999, 16.000]
17	F flúor 18.998 [18.998]	18	Ne néon 20.180 [20.180]
19	Al alumínio 26.982 [28.084, 28.086]	20	Si silício 28.085 [28.084, 28.086]
21	Ga gálio 63.546(3) [65.38(2)]	22	Ge germânio 72.630(8) [74.922]
23	Mn manganês 54.938 [55.845(2)]	24	Cr cromo 51.996 [50.942]
25	Fe ferro 58.933 [58.693]	26	Co cobalto 58.693 [58.693]
27	Ni níquel 63.546(3) [65.38(2)]	28	Cu cobre 65.38(2) [69.723]
29	Zn zincó 95.95 [92.906]	30	Zn zincó 95.95 [92.906]
31	Ga gálio 72.630(8) [74.922]	32	As arsénio 78.971(8) [79.901, 79.907]
33	Ge germânio 79.904 [79.904]	34	Se selénio 83.798(2) [83.798(2)]
35	Br bromo 79.904 [79.904]	36	Kr criptônio 83.798(2) [83.798(2)]
37	Al alumínio 26.982 [28.084, 28.086]	38	Si silício 28.085 [28.084, 28.086]
39	Tc tecnetício 101.07(2) [102.91]	40	Ru rutenio 106.42 [107.87]
41	Nb nióbio 95.95 [92.906]	42	Rh ródio 112.41 [107.87]
43	Pd paládio 106.42 [107.87]	44	Ag prata 114.82 [112.41]
45	Pd paládio 106.42 [107.87]	46	Cd cadmio 114.82 [112.41]
47	Ag prata 112.41 [114.82]	48	In índio 118.71 [117.16]
49	Sb estanho 127.60(3) [127.60(3)]	50	Sn antimónio 127.60(3) [126.90]
51	Te telúrio 127.60(3) [126.90]	52	I iodo 131.29 [131.29]
53	Br bromo 126.90 [127.60(3)]	54	Xe xénon 126.90 [131.29]
55	Tl tálio 200.59 [204.38, 204.38]	56	Pb chumbo 208.98 [207.2]
57	Os ósimo 190.23(3) [192.22]	58	Bi bismuto 208.98 [207.2]
59	W tungsténio 183.84 [186.21]	59	Hg mercúrio 200.59 [200.59]
60	Re réntio 186.21 [183.84]	61	Tl tálio 200.59 [204.38, 204.38]
61	Pm promécio 150.36(2) [157.25(3)]	62	Eu europio 157.25(3) [158.93]
63	Sm samário 157.25(3) [158.93]	64	Gd gadolinio 164.93 [162.50]
65	Tb terbício 162.50 [164.93]	66	Dy disprosio 167.26 [164.93]
67	Ho holímio 167.26 [164.93]	68	Er érbio 173.05 [168.93]
69	Tm túlio 168.93 [173.05]	70	Yb ilérbio 174.97 [174.97]
71	Lu lutécio 174.97 [174.97]	72	Fr fieróvio 174.97 [174.97]
73	Db darmstádio 110.00 [111.00]	74	Cn copernício 111.00 [112.00]
75	Rg roentgenio 109.00 [110.00]	76	Nh níponio 113.00 [114.00]
77	Ds meitnerio 110.00 [111.00]	78	Fl moscovio 114.00 [115.00]
79	Rg roentgenio 111.00 [112.00]	80	Mc livernório 115.00 [116.00]
81	Ts temnese 116.00 [117.00]	82	Lv oganessonio 117.00 [118.00]
83	Fr fieróvio 114.00 [115.00]	84	Rn rádon 118.00 [103.00]
85	At ástatio 114.00 [102.00]	86	Og oganessonio 118.00 [103.00]
87	Fr fieróvio 114.00 [115.00]	88	Lu lutécio 117.00 [118.00]
89	Th tório 231.04 [238.03]	90	Pa protactínio 231.04 [238.03]
91	U urâno 231.04 [238.03]	92	Np neptúnio 231.04 [238.03]
93	Pu plutônio 231.04 [238.03]	94	Am amerício 231.04 [238.03]
95	Cm curio 231.04 [238.03]	96	Bk berquélio 231.04 [238.03]
97	Cf califórnia 231.04 [238.03]	98	Es einstênia 231.04 [238.03]
99	Fm férmio 231.04 [238.03]	100	Md mendelevio 231.04 [238.03]
101	Ts temnese 231.04 [238.03]	102	No nobélvio 231.04 [238.03]
103	Og oganessonio 231.04 [238.03]		



INTERNATIONAL UNION OF
PURE AND APPLIED CHEMISTRY

Para notas e atualizações a esta tabela, visite www.iupac.org. Esta é a versão de 28 de novembro de 2016.

© 2016 IUPAC - União Internacional de Química Pura e Aplicada.



Grandezas, Unidades e Símbolos em Físico-Química

Tradução atualizada para o Português (nas variantes brasileira e portuguesa) da 3^a edição em Inglês

O primeiro “IUPAC Manual of Symbols and Terminology for Physicochemical Quantities and Units” (o “Livro Verde”), do qual o presente manual é um sucessor, foi publicado em 1969, com o objetivo de “assegurar clareza e precisão, e uma concordância mais ampla no uso de símbolos pelos químicos, físicos e engenheiros de diferentes países, e pelos editores de revistas científicas”. As revisões subsequentes tiveram em conta os muitos avanços alcançados nesta área, culminando na importante extensão e revisão representada pela edição de 1988, sob o título **Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry**.

A terceira edição (2007) representa uma revisão adicional do manual, refletindo a experiência dos contribuintes e usuários das edições anteriores. O livro foi sistematicamente atualizado e novas secções foram adicionadas. Pretende-se melhorar a troca de informação científica entre diferentes disciplinas na realização de investigação científica de natureza internacional. Numa literatura científica em rápida expansão, onde cada disciplina tende a utilizar a sua linguagem específica, este livro procura fornecer uma compilação de termos e símbolos amplamente usados, extraídos a partir de muitas fontes, juntamente com definições breves simples de entender e explicações de melhor prática. São também incluídas tabelas de constantes fundamentais e fatores de conversão.

Uma linguagem científica precisa, codificada por definições apropriadas de grandezas, unidades e símbolos, é crucial para o sucesso dos intercâmbios internacionais em ciência e tecnologia, com consequências importantes até para a economia industrial moderna. Este é um guia definitivo para cientistas, organizações e editores científicos que trabalham transversalmente em inúmeras disciplinas que requerem nomenclatura internacionalmente aprovada na área da Físico-Química. Pela primeira vez, o Livro Verde está disponível em Português (nas variantes brasileira e portuguesa), com valores atualizados da maioria das constantes físicas (e fatores de conversão delas decorrentes) bem como de algumas propriedades de partículas, elementos e nuclídeos.

