

Atomare Einheiten

In der theoretischen Chemie ist es üblich in so genannten atomaren Einheiten zu rechnen (au), da es bei der Verwendung von SI-Einheiten zu Problemen bei der Genauigkeit kommt, da die auftretenden Fließkommazahlen zu klein werden um vom Computer adäquat berechnet zu werden.

In atomaren Einheiten werden einige Naturkonstanten gleich 1 gesetzt:

$$m_e = e = \hbar = 1$$

Daraus folgt für die Größen der atomaren Einheiten:

Symbol	Größe	Wert in au	Wert in SI-Einheit
m_e	Elektronen Masse	1	$9.110 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
e	Elektronen Ladung	1	$1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
t	Zeit	1	$2.419 \cdot 10^{-17} \text{ s}$
\hbar	Atomare Einheit d. Impulses	1	$1.055 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
h	Planck Konstante	2π	$6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
a_0	Bohr'scher Radius (atomare Längeneinheit)	1	$5.292 \cdot 10^{-11} \text{ m}$
E_H	Hartree (atomare Energieeinheit)	1	$4.360 \cdot 10^{-18} \text{ J}$
c	Lichtgeschwindigkeit	137.036	$2.998 \cdot 10^8 \text{ m/s}$
α	Feinstrukturkonstante	0.00729735	0.00729735
μ_B	Bohr'sches Magneton ($e\hbar/2m_e$)	$\frac{1}{2}$	$9.9274 \cdot 10^{-24} \text{ J/T}$
μ_N	Kernmagneton	$2.732 \cdot 10^{-4}$	$5.051 \cdot 10^{-27} \text{ J/T}$
$4\pi\epsilon_0$	Permittivität des Vakuums	1	$1.113 \cdot 10^{-10} \text{ C}^2/\text{J} \cdot \text{m}$
μ_0	Permeabilität des Vakuums ($4\pi/c^2$)	$6.692 \cdot 10^{-4}$	$1.257 \cdot 10^{-6} \text{ N} \cdot \text{s}^2/\text{C}^2$