

原子单位

物理常数

在原子单位制中，一些物理常量的数值就是 1，例如普朗克常数，电子质量，元电荷和真空介电常数。这样，一些物理公式就可以简化为无单位的形式。例如，薛定谔方程就可以写成：

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + V \right) \psi$$

在原子单位制中，动量等于波数，能量等于频率。这些关系可以从动量和能量的本征方程推导出来。例如，一维动量的本征方程为：

$$-i \frac{d}{dx} \psi(x) = k \psi(x)$$

其中 k 就是原子单位中的动量，它和波数 $k = 2\pi/\lambda$ 数值相同。动量的本征态（已归一化）为平面波：

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

这些本征态就是傅里叶变换中的基底。所以在原子单位中，把波函数投影到动量本征态上就是做傅里叶变换。

其他物理常量在原子单位下的大小可以通过国际单位制和原子单位制之间的换算关系来确定。例如，光速 c 在原子单位下的大小为：

$$c = \frac{1}{\alpha} = 137.035999084(21)$$

其中 α 是精细结构常数，它在原子单位下也是 1。类似地，玻尔磁子 μ_B 在原子单位下的大小为：

$$\mu_B = \frac{\alpha}{2} = 0.5$$

其他物理常量在原子单位下的大小也可以用类似的方法推导出来。下表给出了一些常用物理常量在原子单位下的大小：

物理常量	符号	原子单位
真空介电常数	ϵ_0	1
真空磁导率	μ_0	1
真空速度	c	137.035999084(21)

物理常量	符号	原子单位
精细结构常数	α	1
玻尔半径	a_0	1
哈特里能量	E_h	1
原子时间	t_0	1
原子质量	m_0	1
原子电荷	e_0	1
原子角动量	\hbar	1
玻尔磁子	μ_B	0.5

转换单位到原子单位

根据原子单位制的定义，物理单位转换成原子单位的系数就是物理常数的倒数。例如，国际单位制中的时间单位秒转换成原子单位制中的时间单位（原子时间）的系数就是哈特里能量除以约化普朗克常数，即：

$$1 \text{ s} = \frac{E_h}{\hbar} = 4.1341373335182 \times 10^{16} \text{ a.u. of time}$$

类似地，国际单位制中的长度单位米转换成原子单位制中的长度单位（玻尔半径）的系数就是电子质量乘以元电荷的平方除以四倍圆周率乘以真空介电常数乘以约化普朗克常数的平方，即：

$$1 \text{ m} = \frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} = 1.8897261249936 \times 10^{10} \text{ a.u. of length}$$

其他物理量的转换系数也可以用类似的方法推导出来。下表给出了一些常用物理量的转换系数：

物理量	国际单位	原子单位	转换系数
时间	s	a.u. of time	$4.1341373335182 \times 10^{16}$
长度	m	a.u. of length	$1.8897261249936 \times 10^{10}$
质量	kg	a.u. of mass	$1.0977683829(31) \times 10^{-30}$
电荷	C	a.u. of charge	$6.2415090744(14) \times 10^{18}$
力	N	a.u. of force	$8.2387225(14) \times 10^{-8}$
能量	J	a.u. of energy (Hartree)	$4.3597447222071(85) \times 10^{-18}$
功率	W	a.u. of power	$9.954253568(17) \times 10^{-3}$
压强	Pa	a.u. of pressure	$2.9421015696(51) \times 10^{13}$

物理量	国际单位	原子单位	转换系数
频率	Hz	a.u. of frequency (inverse Hartree)	$2.418884326505(16) \times 10^{-17}$
角频率	rad/s	a.u. of angular frequency (inverse Hartree)	$1.5198298460570(98) \times 10^{-16}$
磁通量 密度	T	a.u. of magnetic flux density (inverse Bohr magneton)	$2.350517567(41) \times 10^5$