Systèmes d'unités en physique

1. Système d'unités atomiques

1.1. Établissement des unités de grandeurs

Comme son nom l'indique, ce système d'unité est sourtout utilisé en physique atomique et moléculaire. La raison principale pour laquelle ce système existe est de simplifier l'expression du Hamiltonien. En effet, on fixe :

$$m_e = 1$$
$$\hbar = 1$$
$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} = 1$$

Ceci veut dire que toutes les masses seront exprimées en fonction de la masse des électrons et que toutes les actions seront exprimées comme multiples de la constante de Planck réduite.

Il faut à présent retrouver les unités dérivées des différentes grandeurs physiques fréquemment utilisées en physique atomique, à savoir la longueur et l'énergie. Pour rappel, le rayon de Bohr a_0 s'écrit :

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} \qquad \text{avec } m = m_e$$

En utilisant les unités atomiques définies plus haut, on obtient, assez élegemment, le résultat suivant :

$$a_0 = 1$$

On choisi alors a_0 comme étant l'unité de la longueur dans le système d'unité atomique :

$$a_0 = [L]$$

À ce stade, il serait judicieux de se rappeler que la constante de Rydberg R_∞ est homogène à une énergie avec :

$$R_\infty = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2h^2}$$

Il serait donc, à première vue, on ne peut plus logique de choisir la constante de Rydberg R_∞ comme unité de l'énergie dans le système d'unités atomiques.
Cependant, afin d'obtenir une expression plus familière du Hamiltonien et afin qu'on obtienne une expression égale à 1 (ce qui lui permettra de véritablement caractériser l'unité énergétique de notre nouveau système), on a décidé d'octroyer ce rôle au double de R_∞ :

$$\frac{me^4}{4\varepsilon_0^2\hbar^2} = [ML^2T^{-2}]$$

$$\left[\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \times \frac{m}{\hbar^2}\right] = [ML^2T^{-2}]$$

L'unité d'énergie dans le système d'unités atomiques est donc le Hartree. Il correspond également au double de la constante de Rydberg R_∞

Note: L'expression de la constante de Rydberg R_∞ utilisée est écrite en fonction de la constante de Planck h et non en fonction de la forme réduite de cette dernière $\hbar$

1.2. Expression du Hamiltonien

On peut à ce stade faire usage de l'équation de Schrödinger exprimée en unités atomiques (u.a.) afin d'établir notre nouveau Hamiltonien relatif aux atomes hydrogénoïdes :

$$H = -\frac{1}{2}\vec{\nabla}^2 - \frac{Z}{r}$$

Les énergies propres de ce systèmes, exprimées en u.a., s'écrivent :

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2}$$

Ce qui est logique. En effet, le produit par Z^2 vient du fait qu'il s'agit d'un atome hydrogénoïde, alors que la division par 2 vient du fait qu'on utilise le double de la constante de Rydberg comme unité d'énergie (l'expression conventionnelle étant, sans tenir compte de la correction relative à la masse du noyau : $E_n = -Z^2\frac{R_\infty}{n^2}$)

2. Système d'unités naturelles

Ce système d'unités est surtout utilisé en relativité et en physique nucléaire. Son but est de faciliter les calculs en égalisant à l'unité les grandeurs physiques les plus omniprésentes. Il consiste donc à établir les relations suivantes :

$$\hbar = 1$$

et

$$c = 1$$

La grande particularité de ce système est que **toutes** les dimensions apparaissent comme étant des puissances de l'énergie. À titre d'exemples, le mètre et la seconde seront tous deux des multiples du MeV^{-1}

3. Système d'unités de Heavyside-Lorentz

Le système de Heavyside-Lorentz n'est autre que le système d'unités naturelles avec une (ou plutôt deux) contrainte supplémentaire. En effet, cette dernière se manifeste à travers l'équation suivante :

$$\varepsilon_0 = \mu_0 = 1$$

Ce système simplifie encore davantage l'expression des formules utilisées. Notamment, la constante de structure fine, dans le système d'unités de Heavyside-Lorentz, s'écrira :

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi}$$