

Energien:

	Joule	Hartree (a.u.)	eV	cm ⁻¹	kJ/mol	kcal/mol
1 Joule sind	1	2,2937 10 ¹⁷	6,2415 10 ¹⁸	5,0352 10 ²²	N _A /1000	
1 Hartree sind	4,3597 10 ⁻¹⁸	1	27,2112	219475	2626	627.51
1 eV sind	1,602 10 ⁻¹⁹	0,03675	1	8065,5	96.485	23.06
1 cm ⁻¹ sind	1,986 10 ⁻²³	4,5553 10 ⁻⁶	1,2398 10 ⁻⁴	1	1.196 10 ⁻²	2.858 10 ⁻³
1 kJ/mol sind	1/N _A	3.809 10 ⁻⁴	0.0104	83.593	1	0.239
1 kcal/mol sind		1.5936 10 ⁻³	0.0434	349.75	4.19	1

$$x \text{ nm sind } x^{-1} \cdot 1239.8 \text{ eV}$$

Dipolmomente:

	C m	a ₀ e (a.u.)	D
1 C m sind	1	1,179475 10 ²⁹	2,99793 10 ²⁹
1 a ₀ e sind	8,47835 10 ⁻³⁰	1	2,5417463126
1 D sind	3,33564 10 ⁻³⁰	0,393430294	1

Längen:

$$1 \text{ m} = 1,889726 \cdot 10^{10} \text{ a}_0$$

$$1 \text{ a}_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 5,291772 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

Ladungen:

$$1 \text{ C} = 6,241508 \cdot 10^{18} \text{ e}$$

$$1 \text{ e} = 1,602177 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

Massen:

$$1 \text{ amu} = 1 \text{ g/mol} = 1,66054 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$1 \text{ kg} = 6,02214 \cdot 10^{26} \text{ amu}$$

Konstanten:

$$c = 2,99792458 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

$$k = 1,38066 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$$

$$h = 6,62608 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$h(\text{quer}) = 1,05457 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$N_A = 6,02214 \cdot 10^{23} \text{ 1/mol}$$

$$m_e = 9,10939 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$\epsilon_0 = 8,85419 \cdot 10^{-12} \frac{\text{C}^2}{\text{J m}}$$