

玻恩诠释（波函数归一化条件）：

$$(\psi, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = 1$$

动量算符：

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla$$

定态薛定谔方程（哈密顿算符）：

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$$

含时薛定谔方程：

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

原子单位制：

$$1a.u.x = 1Bohr = 0.529\text{\AA}$$

$$1a.u.t = 0.0242fs = 2.42 \times 10^{-17}s$$

$$1a.u.E = 1Hartree = 27.2eV$$

$$1a.u.v = \frac{1a.u.x}{1a.u.t} = 2185950m/s$$

$$1\hbar \rightarrow 1$$

$$4\pi\epsilon_0 \rightarrow 1$$

分子哈密顿量具体表达形式（五项）：

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} -\frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 + \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + \sum_{\alpha,i} \frac{-Z_{\alpha}e^2}{4\pi\epsilon_0|r_i - R_{\alpha}|} + \sum_{\alpha < \beta} \frac{Z_{\alpha}Z_{\beta}e^2}{4\pi\epsilon_0|R_{\alpha} - R_{\beta}|} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|r_i - r_j|}$$