

术语表

英文简称	中文术语	英文术语
	第一性	<i>ab initio</i>
DFT	密度泛函理论	density functional theory
DFA	密度泛函近似	density functional approximation
WFT	波函数理论	wavefunction theory
SCF	自洽场	self-consistent field
post-SCF	后自洽场	post self-consistent field
post-HF	波函数理论 post-SCF	post Hartree-Fock
	规范原点	gauge origin
	无 (电子) 相互作用体系	noninteracting system
xc	交换相关效应	exchange-correlation effect
LDA	局域密度近似	local density apprioximation
LSDA	局域密度近似	local spin-density apprioximation
GGA	广义梯度近似	generalized gradient approximation
meta-GGA	广义梯度的梯度近似	meta-generalized gradient approximation
hyb	杂化 (泛函)	hybrid (functional)
	离域	non-local
	半定域	semi-local
RSH	长程分离杂化 (泛函)	range-separate hybrid (functional)
	局域混合 (泛函)	local hybrid (functional)
DH	双杂化 (泛函)	doubly hybrid (functional)
xDH	XYG3 型双杂化 (泛函)	XYG3-type doubly hybrid (functional)
bDH	B2PLYP 型双杂化 (泛函)	B2PLYP-type doubly hybrid (functional)
RPA	无规相近似	random phase approximation
OO	轨道优化	orbital-optimized
SS	自旋相同	same-spin
OS	自旋相反	opposite-spin
SCS	自旋组分缩放	spin-component-scaled
DSD	弥散矫正的 SCS DH	dispersion corrected SCS DH

英文简称	中文术语	英文术语
AC	绝热路径	adiabatic curve
RI	恒等算符简化 (近似)	resolution-of-identity (approximation)
FPA		focal-point analysis