

理論方法及基底搭配

MP2 通常配 **apdz**

CCSD(T) 至少要搭 **aptz**

HF 用 **aptz** 則太多了

主族及鈍氣原子使用的基底

第三週期 **Ar, S** 等

→ **aug-cc-pV(n+d)Z** **n=D, T, Q, 5** 等 (文獻↓)

T. H. Dunning Jr, K. A. Peterson, and A. K. Wilson, *J. Chem. Phys.* **2001**, *114*, 9244.

第五週期 **Xe, I** 等

→ **aug-cc-pVnZ-pp** **n=D, T, Q, 5** 等