

Базиси	Число базисних функцій		Опис
	Неводневі атоми	Водень	
STO-3G	5	1	Економічний з точки зору витрат часу та машинних ресурсів. Краще підходить для атомів.
3-21G	9	2	Двоекспоненційний базис. Точніше описує валентні орбіталі і системи без поляризації.
6-31G* або 6-31G(d)	15	2	Системи з анізотропією заряду
6-31G** або 6-31G(d,p)	15	5	Там де є водневий зв'язок
6-31+G* або 6-31+G(d)	19	2	Молекули з неподіленими параметрами, молекулярні аніони, збуджені стани.
6-31+G** або 6-31+G(d,p)	19	5	Уточнення для попереднього базису