

Supporting Information for:
Assessment of Model Chemistries for Noncovalent Interactions

Yan Zhao and Donald G. Truhlar

To be published in *J. Chem. Theory Comput.*

This supporting information was revised on April 25, 2006 and consists of a total of 17 pages.

Contents:	<i>page</i>
S1. Binding energies and mean errors for CT7/04 by multilevel methods	S-2
S2. Binding energies and mean errors for CT7/04 by single-level methods	S-4
S3. Binding energies and mean errors for DI6/04 by multilevel methods	S-6
S4. Binding energies and mean errors for DI6/04 by single-level methods	S-8
S5. Binding energies and mean errors for WI7/05 by multilevel methods	S-10
S6. Binding energies and mean errors for WI7/05 by single-level methods	S-12
S7. Binding energies and mean errors for PPS5/05 by multilevel methods	S-14
S8. Binding energies and mean errors for PPS5/05 by single-level methods	S-16

Table S1. Binding energies (kcal/mol) and mean errors (kcal/mol) for the CT7/04 database by multilevel methods

Method	C ₂ H ₄ ...F ₂	NH ₃ ...F ₂	C ₂ H ₂ ...ClF	HCN...ClF	NH ₃ ...Cl ₂	H ₂ O...ClF	NH ₃ ...ClF	MSE	MUE
best estimate	1.06	1.81	3.81	4.86	4.88	5.36	10.62		
best estimate	1.06	1.81	3.81	4.86	4.88	5.36	10.62		
N⁷ methods									
MCG3-MPW	1.14	1.68	4.12	4.95	4.81	5.20	10.55	0.00	0.13
MCG3-MPWB	1.35	1.91	4.21	5.06	4.97	5.29	10.46	0.12	0.18
MCG3	1.27	1.88	4.25	5.02	4.97	5.32	10.92	0.17	0.19
G3SX(MP3)//Q	1.31	1.96	4.29	5.15	5.03	5.37	10.64	0.19	0.19
CBS-QB3//Q	1.47	2.01	4.24	5.26	5.12	5.50	10.64	0.26	0.26
G3SX//Q	1.32	1.98	4.22	5.31	5.52	5.61	11.11	0.38	0.38
N⁶ methods									
MCQCISD-MPWB	1.17	1.75	4.12	4.85	4.68	5.27	10.59	0.00	0.12
MCQCISD-MPW	1.08	1.60	4.13	4.88	4.75	5.24	10.65	-0.01	0.12
MCUT-MPWB	1.20	1.84	4.25	4.93	4.94	5.30	11.07	0.16	0.18
MCUT/3	1.33	1.87	4.36	5.20	5.00	5.50	10.45	0.19	0.23
MCUT-MPW	1.29	1.94	4.29	4.98	5.01	5.40	11.20	0.24	0.24
MC-QCISD/3	1.34	1.89	4.26	5.23	5.01	5.53	10.32	0.17	0.25
BMC-CCSD	1.40	2.12	4.43	5.06	5.19	5.50	11.63	0.42	0.42
N⁵ methods									
MC3MPWB	1.23	1.83	4.36	4.82	4.75	5.37	11.61	0.22	0.27

Table S2. Binding energies (kcal/mol) and mean errors (kcal/mol) for the CT7/04 database by single-level methods

Method	C ₂ H ₄ ...F ₂	NH ₃ ...F ₂	C ₂ H ₂ ...ClF	HCN...ClF	NH ₃ ...Cl ₂	H ₂ O...ClF	NH ₃ ...ClF	MSE	MUE
best estimate	1.06	1.81	3.81	4.86	4.88	5.36	10.62		
<i>N</i>⁷ methods									
CCSD(T)/6-311+G(d,p)	1.37	2.54	2.59	4.07	4.87	5.53	9.54	-0.27	0.62
MP4/6-31G(2df,p)	1.85	2.51	3.92	4.94	6.29	7.03	10.43	0.65	0.71
MP4/6-31G(d)	1.33	2.46	2.91	4.47	6.40	6.74	10.46	0.34	0.75
QCISD(T)/6-31G(d)	1.23	2.41	2.64	4.15	6.27	6.54	10.02	0.12	0.83
MP4/6-31G+(d)	1.85	3.75	3.14	4.71	5.73	6.58	11.72	0.73	0.96
<i>N</i>⁶ methods									
MP4(SDQ)/6-31G(2df,p)	1.47	2.05	2.98	4.30	5.45	6.39	8.65	-0.16	0.80
MP4(SDQ)/6-311+G(d,p)	1.13	2.13	2.04	3.90	4.32	5.21	8.53	-0.74	0.84
MP3/6-31G(2df,p)	1.56	1.98	3.29	3.84	5.52	6.20	8.37	-0.24	0.85
MP4(SDQ)/6-31G(d)	1.08	2.12	2.28	4.01	5.78	6.33	9.21	-0.23	0.85
MP3/6-31G+(d)	1.47	2.98	2.48	3.67	5.07	5.78	9.31	-0.24	0.86
QCISD/6-31G(d)	1.02	2.10	2.20	3.87	5.73	6.28	9.10	-0.30	0.89
MP3/6-31G(d)	1.12	2.00	2.47	3.58	5.76	6.11	8.85	-0.36	0.90
CCSD/6-311+G(d,p)	1.03	2.03	1.90	3.67	4.20	5.05	8.07	-0.92	0.99
MP3/6-311+G(d,p)	1.17	1.91	2.23	3.41	4.36	4.98	7.76	-0.94	1.00
MP4(DQ)/6-31B(d)	1.46	3.27	4.66	6.26	8.58	8.24	13.86	1.99	1.99
CCSD/6-31B(d)	1.44	3.48	4.69	6.37	8.86	8.45	14.43	2.19	2.19
<i>N</i>⁵ methods									
MP2/MG3S-CP	0.92	1.33	3.96	4.89	4.66	4.81	10.39	-0.21	0.26

MP2/6-311+G(d,p)	1.59	2.54	3.36	4.69	5.28	5.93	11.10	0.30	0.47
MP2/6-31+G(d,p)	1.87	3.36	3.40	4.83	5.51	6.19	11.37	0.59	0.71
MP2/MG3	1.61	1.98	4.85	5.70	5.53	5.93	11.84	0.72	0.72
MP2/MG3S	1.59	2.00	4.85	5.69	5.55	5.98	11.84	0.73	0.73
MP2(full)/G3Large	1.64	1.98	4.97	5.82	5.59	6.01	11.96	0.80	0.80
MP2/6-31G(d)	1.55	2.52	3.38	4.81	6.74	7.05	11.46	0.73	0.87
MP2/6-31G+(d)	1.91	3.61	3.51	4.87	5.93	6.68	12.35	0.92	1.01
MP2/6-31G(2df,p)	2.11	2.57	4.70	5.44	6.84	7.42	11.58	1.18	1.18
MP2/6-31B(d)	2.14	4.00	6.03	7.35	9.85	9.30	17.17	3.35	3.35
N^4 methods									
PWB6K/MG3S-CP	1.01	1.55	3.95	4.58	4.61	5.41	10.68	-0.09	0.16
PWB6K/MG3S	1.31	1.91	4.12	4.79	4.92	5.85	11.14	0.23	0.25
M05-2X/MG3S-CP	0.99	1.47	4.52	4.69	4.89	5.74	10.99	0.13	0.30
M05-2X/MG3S	1.30	1.82	4.70	4.92	5.24	6.17	11.43	0.46	0.46
HF/6-31G(d)	-0.24	0.05	0.35	2.45	3.42	4.70	4.93	-2.39	2.39
HF/6-311+G(d,p)	-0.76	-0.33	-0.59	2.54	1.96	3.78	4.15	-3.09	3.09
HF/G3Large	-0.83	-0.81	-0.50	1.94	0.85	2.69	2.65	-3.77	3.77
HF/MG3S	-0.82	-0.80	-0.51	1.94	0.86	2.69	2.62	-3.77	3.77
HF/MG3	-0.82	-0.80	-0.51	1.94	0.86	2.69	2.62	-3.77	3.77
Average								-0.15	1.26

Table S3. Binding energies (kcal/mol) and mean errors (kcal/mol) for the DI7/04 database by multilevel methods

Method	(H ₂ S) ₂	(HCl) ₂	HCl...H ₂ S	CH ₃ Cl...HCl	HCN...CH ₃ SH	CH ₃ SH...HCl	MSE	MUE
best estimate	1.66	2.01	3.35	3.55	3.59	4.16		
<i>N</i>⁷ methods								
MCG3-MPW	1.62	1.97	3.37	3.51	3.60	4.93	0.11	0.15
MCG3-MPWB	1.55	1.89	3.26	3.40	3.51	4.78	0.01	0.20
MCG3	1.77	2.13	3.47	3.81	3.77	5.13	0.29	0.29
G3SX(MP3)//Q	1.84	2.17	3.55	3.83	3.85	5.22	0.35	0.35
CBS-QB3//Q	1.81	2.28	3.62	3.85	3.74	5.20	0.36	0.36
G3SX//Q	1.86	2.20	3.57	3.86	3.92	5.27	0.39	0.39
<i>N</i>⁶ methods								
MCQCISD-MPW	1.62	1.98	3.42	3.47	3.49	4.94	0.10	0.18
MCQCISD-MPWB	1.57	1.93	3.31	3.42	3.44	4.81	0.02	0.19
MCUT-MPW	1.60	1.94	3.44	3.37	3.44	4.92	0.06	0.22
MCUT-MPWB	1.50	1.84	3.27	3.26	3.37	4.71	-0.06	0.25
MCUT/3	1.87	2.22	3.55	3.86	3.78	5.16	0.35	0.35
MC-QCISD/3	1.87	2.24	3.57	3.90	3.72	5.23	0.37	0.37
BMC-CCSD	1.95	2.36	3.78	4.15	3.97	5.59	0.58	0.58
<i>N</i>⁵ methods								
SAC-MP2/6-31+G(d,p)	1.64	2.08	3.22	3.54	3.79	4.63	0.10	0.15
SAC-MP2/6-31G(d)	1.63	1.94	3.34	3.28	3.80	4.60	0.05	0.17

Table S4. Binding energies (kcal/mol) and mean errors (kcal/mol) for the DI7/04 database by single-level methods

Method	(H ₂ S) ₂	(HCl) ₂	HCl...H ₂ S	CH ₃ Cl...HCl	HCN...CH ₃ SH	CH ₃ SH...HCl	MSE	MUE
best estimate	1.66	2.01	3.35	3.55	3.59	4.16		
N⁷ methods								
MP4/6-31G(2df,p)	1.47	1.63	2.86	2.94	3.45	4.14	-0.31	0.31
CCSD(T)/6-311+G(d,p)	1.25	1.61	2.51	2.95	3.33	3.85	-0.47	0.47
MP4/6-31G+(d)	1.30	1.64	2.60	2.75	3.46	3.57	-0.50	0.50
MP4/6-31G(d)	1.20	1.44	2.54	2.45	3.20	3.37	-0.69	0.69
QCISD(T)/6-31G(d)	1.17	1.42	2.50	2.41	3.09	3.30	-0.74	0.74
N⁶ methods								
MP3/6-31G(2df,p)	1.41	1.54	2.77	2.74	3.22	3.92	-0.45	0.45
MP3/6-311+G(d,p)	1.22	1.57	2.45	2.84	3.21	3.70	-0.55	0.55
MP3/6-31G+(d)	1.28	1.63	2.58	2.70	3.28	3.50	-0.56	0.56
MP4(SDQ)/6-31G(2df,p)	1.26	1.41	2.52	2.51	3.10	3.56	-0.66	0.66
MP4(SDQ)/6-311+G(d,p)	1.12	1.47	2.30	2.66	3.12	3.46	-0.70	0.70
MP3/6-31G(d)	1.19	1.44	2.54	2.41	3.05	3.32	-0.73	0.73
CCSD/6-311+G(d,p)	1.09	1.45	2.26	2.63	3.04	3.40	-0.74	0.74
MP4(DQ)/6-31B(d)	3.63	2.80	4.18	3.48	2.96	5.01	0.62	0.86
CCSD/6-31B(d)	3.64	2.80	4.18	3.50	2.93	5.02	0.62	0.86
MP4(SDQ)/6-31G(d)	1.10	1.34	2.38	2.23	2.98	3.07	-0.87	0.87
QCISD/6-31G(d)	1.06	1.31	2.32	2.18	2.88	2.99	-0.93	0.93
N⁵ methods								
MP2/6-31G(2df,p)	1.69	1.89	3.32	3.34	3.63	4.81	0.06	0.18

MP2/6-31+G(d,p)	1.44	1.83	2.93	3.11	3.48	4.13	-0.23	0.23
MP2/MG3S-CP	1.52	1.80	3.19	3.26	3.42	4.68	-0.08	0.25
MP2/6-311+G(d,p)	1.38	1.74	2.80	3.17	3.49	4.29	-0.25	0.29
MP2/6-31G+(d)	1.40	1.78	2.89	2.97	3.52	4.00	-0.29	0.29
MP2/MG3	1.82	2.21	3.69	3.90	3.91	5.43	0.44	0.44
MP2/MG3S	1.84	2.23	3.71	3.90	3.89	5.43	0.45	0.45
MP2/6-31G(d)	1.32	1.59	2.86	2.67	3.33	3.83	-0.46	0.46
MP2(full)/G3Large	1.92	2.32	3.83	4.04	4.01	5.62	0.57	0.57
MP2/6-31B(d)	3.83	3.03	4.65	3.93	3.26	5.77	1.03	1.13
N^4 methods								
PWB6K/MG3S	1.47	1.80	3.23	3.09	3.46	4.51	-0.12	0.24
M05-2X/MG3S	1.39	1.82	3.24	3.40	3.74	4.87	0.02	0.27
PWB6K/MG3S-CP	1.37	1.68	3.07	2.95	3.38	4.32	-0.26	0.32
M05-2X/MG3S-CP	1.25	1.65	3.04	3.22	3.62	4.65	-0.15	0.32
HF/6-31G(d)	0.27	0.42	1.25	0.64	1.75	1.26	-2.12	2.12
HF/6-311+G(d,p)	0.19	0.34	1.11	0.67	1.71	1.26	-2.17	2.17
HF/MG3S	-0.12	0.21	0.80	0.49	1.66	0.87	-2.40	2.40
HF/MG3	-0.12	0.21	0.80	0.49	1.66	0.87	-2.40	2.40
HF/G3Large	-0.12	0.20	0.79	0.48	1.66	0.86	-2.41	2.41
Average							-0.53	0.79

Table S5. Binding energies (kcal/mol) and mean errors (kcal/mol) for the WI7/05 database by multilevel methods

Method	HeNe	HeAr	Ne ₂	NeAr	CH ₄ ...Ne	C ₆ H ₆ ...Ne	(CH ₄) ₂	MSE	MUE
best estimate	0.04	0.06	0.08	0.13	0.22	0.47	0.51		
<i>N</i>⁷ methods									
MCG3-MPWB	0.06	0.05	0.18	0.18	0.28	0.43	0.42	0.01	0.05
MCG3	0.06	0.06	0.19	0.21	0.29	0.55	0.51	0.05	0.05
MCG3-MPW	0.05	0.04	0.20	0.19	0.28	0.43	0.38	0.01	0.06
G3SX(MP3)//Q	0.07	0.07	0.20	0.23	0.37	0.62	0.51	0.08	0.08
CBS-QB3//Q	0.07	0.06	-0.34	0.21	0.21	0.58	0.39	-0.05	0.11
G3SX//Q	0.08	0.08	0.23	0.25	0.42	0.71	0.52	0.11	0.11
<i>N</i>⁶ methods									
MCQCISD-MPWB	0.07	0.06	0.17	0.18	0.27	0.46	0.39	0.01	0.05
MCUT-MPWB	0.07	0.06	0.17	0.17	0.26	0.41	0.34	0.00	0.06
MCUT/3	0.06	0.07	0.19	0.22	0.31	0.61	0.54	0.07	0.07
MC-QCISD/3	0.06	0.07	0.19	0.22	0.30	0.62	0.54	0.07	0.07
MCQCISD-MPW	0.05	0.04	0.18	0.18	0.27	0.39	0.30	-0.01	0.07
MCUT-MPW	0.05	0.03	0.18	0.18	0.26	0.31	0.23	-0.04	0.09
BMC-CCSD	0.06	0.08	0.21	0.25	0.38	0.86	0.60	0.14	0.14
<i>N</i>⁵ methods									
MCCO/3	0.08	0.12	0.14	0.18	0.25	0.47	0.53	0.04	0.04
MC3MPWB	0.08	0.08	0.13	0.13	0.20	0.49	0.17	-0.03	0.07

MCCO-MPWB	0.08	0.08	0.15	0.14	0.21	0.36	0.24	-0.03	0.07
SAC-MP2/MG3S	0.05	0.05	0.18	0.21	0.30	0.65	0.43	0.05	0.08
MCCO-MPW	0.07	0.05	0.15	0.14	0.18	0.26	0.00	-0.09	0.12
MC3MPW	0.07	0.05	0.13	0.12	0.15	0.36	-0.15	-0.11	0.13
SAC-MP2/6-31G(d)	0.02	-0.01	0.13	0.18	0.39	0.78	0.23	0.03	0.14
SAC-MP2/6-31+G(d,p)	0.09	0.11	0.14	0.18	0.18	1.00	0.22	0.06	0.15
MC3BB	-0.04	-0.05	-0.04	-0.07	-0.02	0.05	-0.18	-0.27	0.27
Average								0.00	0.09

Table S6. Binding energies (kcal/mol) and mean errors (kcal/mol) for the WI7/05 database by single-level methods

Method	HeNe	HeAr	Ne ₂	NeAr	CH ₄ ...Ne	C ₆ H ₆ ...Ne	(CH ₄) ₂	MSE	MUE
best estimate	0.04	0.06	0.08	0.13	0.22	0.47	0.51		
<i>N</i>⁷ methods									
CCSD(T)/6-311+G(d,p)	0.02	0.01	0.14	0.13	0.21	0.63	0.31	-0.01	0.07
QCISD(T)/6-31G(d)	0.01	-0.01	0.11	0.14	0.33	0.53	0.12	-0.04	0.10
MP4/6-31G(d)	0.01	-0.01	0.12	0.15	0.34	0.56	0.13	-0.03	0.10
MP4/6-31G+(d)	0.08	0.11	0.15	0.16	0.19	0.82	0.12	0.02	0.14
MP4/6-31G(2df,p)	0.05	0.03	0.40	0.32	0.46	1.28	0.34	0.20	0.25
<i>N</i>⁶ methods									
MP3/6-311+G(d,p)	0.01	0.01	0.14	0.13	0.19	0.57	0.28	-0.02	0.07
MP4(SDQ)/6-311+G(d,p)	0.01	0.01	0.14	0.12	0.19	0.53	0.24	-0.04	0.07
CCSD/6-311+G(d,p)	0.01	0.01	0.14	0.12	0.19	0.52	0.22	-0.04	0.07
MP3/6-31G(d)	0.01	-0.01	0.11	0.13	0.31	0.49	0.09	-0.05	0.09
MP4(SDQ)/6-31G(d)	0.01	-0.01	0.11	0.14	0.32	0.50	0.08	-0.05	0.10
QCISD/6-31G(d)	0.01	-0.01	0.11	0.14	0.32	0.50	0.06	-0.05	0.10
MP3/6-31G+(d)	0.08	0.11	0.13	0.14	0.17	0.69	0.08	-0.01	0.12
CCSD/6-31B(d)	0.01	-0.01	0.03	0.07	0.26	0.22	0.07	-0.12	0.13
MP4(DQ)/6-31B(d)	0.01	-0.01	0.03	0.07	0.25	0.21	0.07	-0.13	0.14
MP3/6-31G(2df,p)	0.05	0.03	0.37	0.30	0.43	1.14	0.30	0.16	0.23
MP4(SDQ)/6-31G(2df,p)	0.05	0.03	0.38	0.30	0.43	1.15	0.25	0.16	0.24
<i>N</i>⁵ methods									
MP2/MG3S	0.05	0.05	0.18	0.20	0.29	0.62	0.40	0.04	0.07

MP2/6-311+G(d,p)	0.01	0.01	0.13	0.12	0.18	0.61	0.28	-0.02	0.08
MP2/MG3	0.05	0.05	0.18	0.20	0.34	0.66	0.41	0.05	0.09
MP2(full)/G3Large	0.06	0.05	0.19	0.23	0.37	0.71	0.41	0.07	0.10
MP2/6-31G(d)	0.01	-0.01	0.12	0.15	0.33	0.61	0.08	-0.03	0.12
MP2/6-31B(d)	0.01	-0.01	0.03	0.08	0.27	0.26	0.07	-0.12	0.13
MP2/6-31+G(d,p)	0.08	0.10	0.12	0.14	0.15	0.79	0.11	0.00	0.13
MP2/6-31G+(d)	0.07	0.10	0.12	0.14	0.16	0.79	0.05	-0.01	0.14
MP2/MG3S-CP	-0.01	0.02	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.29	-0.18	0.18
MP2/6-31G(2df,p)	0.05	0.03	0.39	0.33	0.46	1.34	0.34	0.21	0.26
<i>N</i>⁴ methods									
M05-2X/MG3S-CP	0.04	0.07	0.05	0.13	0.18	0.56	0.49	0.00	0.03
PWB6K/MG3S-CP	0.14	0.17	0.17	0.20	0.27	0.47	0.55	0.07	0.07
M05-2X/MG3S	0.07	0.07	0.16	0.19	0.31	0.82	0.53	0.09	0.09
PWB6K/MG3S	0.16	0.19	0.24	0.28	0.40	0.75	0.56	0.15	0.15
HF/6-31G(d)	0.01	-0.01	0.05	0.05	0.16	0.04	-0.42	-0.23	0.23
HF/MG3S	0.01	-0.04	0.07	0.01	0.09	-0.22	-0.51	-0.30	0.30
HF/MG3	0.01	-0.04	0.07	0.01	0.09	-0.22	-0.51	-0.30	0.30
HF/G3Large	0.01	-0.04	0.07	0.00	0.09	-0.23	-0.50	-0.30	0.30
HF/6-311+G(d,p)	0.00	-0.03	0.07	-0.04	0.05	-0.27	-0.47	-0.31	0.31
Average								-0.03	0.15

Table S7. Binding energies (kcal/mol) and mean errors (kcal/mol) for the PPS5/05 database by multilevel methods

Method	(C ₆ H ₆) ₂ -S	(C ₆ H ₆) ₂ -T	(C ₆ H ₆) ₂ -PD	(C ₂ H ₂) ₂	(C ₂ H ₄) ₂	MSE	MUE
best estimate	1.81	2.74	2.78	1.34	1.42		
<i>N</i>⁷ methods							
MCG3-MPWB	1.49	2.84	2.88	1.17	1.27	-0.08	0.17
MCG3-MPW	1.66	2.92	3.00	1.19	1.20	-0.02	0.18
CBS-QB3//Q	2.59	3.45	3.88	1.19	1.29	0.46	0.57
G3SX(MP3)//Q	2.95	3.85	4.35	1.36	1.57	0.80	0.80
MCG3	2.92	3.83	4.46	1.34	1.54	0.80	0.80
G3SX//Q	2.98	3.89	4.35	1.40	1.64	0.84	0.84
<i>N</i>⁶ methods							
MCQCISD-MPWB	1.37	2.69	2.77	1.13	1.21	-0.18	0.18
MCQCISD-MPW	1.25	2.56	2.53	1.11	1.01	-0.33	0.33
MCUT-MPWB	0.83	2.29	2.16	1.09	1.12	-0.52	0.52
MCUT/3	2.79	3.71	4.30	1.38	1.61	0.74	0.74
MCUT-MPW	0.62	2.07	1.77	1.05	0.86	-0.75	0.75
MC-QCISD/3	3.02	3.79	4.57	1.36	1.58	0.85	0.85
BMC-CCSD	3.56	4.10	5.11	1.44	1.70	1.17	1.17
<i>N</i>⁵ methods							
MC3MPWB	0.88	2.45	2.22	1.08	1.05	-0.48	0.48
MCCO-MPWB	0.58	2.08	1.97	1.03	0.98	-0.69	0.69

MCCO-MPW	0.64	2.03	1.84	0.98	0.55	-0.81	0.81
MC3MPW	0.46	2.07	1.50	0.97	0.46	-0.93	0.93
SAC-MP2/6-31G(d)	3.22	4.21	4.37	1.71	1.76	1.04	1.04
MC3BB	0.11	1.81	1.39	0.73	0.53	-1.10	1.10
SAC-MP2/MG3S	3.87	4.38	5.55	1.52	1.65	1.38	1.38
MCCO/3	4.53	4.71	6.20	1.70	1.96	1.80	1.80
SAC-MP2/6-31+G(d,p)	5.27	5.62	6.97	1.47	1.62	2.17	2.17
Average						0.28	0.83

Table S8. Binding energies (kcal/mol) and mean errors (kcal/mol) for the PPS5/05 database by single-level methods

Method	(C ₆ H ₆) ₂ -S	(C ₆ H ₆) ₂ -T	(C ₆ H ₆) ₂ -PD	(C ₂ H ₂) ₂	(C ₂ H ₄) ₂	MSE	MUE
best estimate	1.81	2.74	2.78	1.34	1.42		
N⁷ methods							
MP4/6-31G(d)	1.34	2.79	2.13	1.43	1.27	-0.23	0.28
QCISD(T)/6-31G(d)	0.98	2.57	1.73	1.37	1.21	-0.45	0.46
MP4/6-31G(2df,p)	2.65	3.27	3.69	1.66	1.70	0.58	0.58
CCSD(T)/6-311+G(d,p)	3.09	4.30	4.65	1.31	1.45	0.94	0.95
MP4/6-31G+(d)	3.30	4.27	4.65	1.24	1.11	0.90	1.06
N⁶ methods							
MP4(SDQ)/6-31G(2df,p)	1.47	2.49	2.31	1.48	1.41	-0.18	0.24
MP3/6-31G(2df,p)	1.49	2.64	2.37	1.58	1.63	-0.08	0.26
CCSD/6-311+G(d,p)	2.12	3.56	3.51	1.16	1.14	0.28	0.46
MP4(SDQ)/6-311+G(d,p)	2.13	3.59	3.55	1.18	1.20	0.31	0.47
MP3/6-31G+(d)	2.16	3.65	3.38	1.20	1.07	0.27	0.47
MP3/6-311+G(d,p)	2.32	3.89	3.79	1.31	1.47	0.54	0.55
MP4(DQ)/6-31B(d)	0.40	2.44	1.26	1.41	1.27	-0.66	0.69
MP3/6-31G(d)	0.49	2.38	1.23	1.38	1.23	-0.67	0.69
CCSD/6-31B(d)	0.33	2.39	1.17	1.37	1.23	-0.72	0.73
MP4(SDQ)/6-31G(d)	0.49	2.23	1.18	1.31	1.08	-0.76	0.76
QCISD/6-31G(d)	0.47	2.17	1.14	1.27	1.02	-0.81	0.81
N⁵ methods							
MP2/6-31G(d)	1.98	3.20	2.92	1.53	1.34	0.17	0.21
MP2/6-31B(d)	1.95	3.45	3.06	1.62	1.52	0.31	0.31
MP2/MG3S-CP	2.60	3.05	3.77	1.27	1.17	0.35	0.48

3MP2/6-31G(2df,p)	3.60	3.81	4.84	1.81	1.86	1.16	1.16
MP2/MG3S	3.66	4.24	5.31	1.49	1.58	1.24	1.24
MP2/MG3	3.83	4.33	5.43	1.50	1.59	1.32	1.32
MP2/6-31G+(d)	3.85	4.62	5.37	1.31	1.12	1.24	1.37
MP2/6-31+G(d,p)	3.99	4.66	5.46	1.30	1.26	1.31	1.40
MP2(full)/G3Large	3.95	4.43	5.56	1.52	1.62	1.40	1.40
MP2/6-311+G(d,p)	4.30	5.07	6.13	1.46	1.58	1.69	1.69
<i>N</i>⁴ methods							
M05-2X/MG3S	0.67	2.36	1.99	1.42	1.49	-0.44	0.49
M05-2X/MG3S-CP	0.35	1.98	1.50	1.39	1.40	-0.69	0.71
PWB6K/MG3S	0.04	1.94	1.35	1.33	1.46	-0.79	0.81
PWB6K/MG3S-CP	-0.23	1.60	0.91	1.30	1.40	-1.02	1.02
HF/6-31G(d)	-2.14	-0.15	-1.90	0.91	-0.07	-2.69	2.69
HF/MG3S	-3.12	-0.56	-2.69	0.33	-0.79	-3.39	3.39
HF/MG3	-3.12	-0.56	-2.69	0.33	-0.79	-3.39	3.39
HF/G3Large	-3.13	-0.58	-2.70	0.32	-0.79	-3.39	3.39
HF/6-311+G(d,p)	-3.22	-0.62	-2.76	0.36	-0.77	-3.42	3.42
Average						-0.28	1.12
