



b)

Atom	CHARMM36 Protein	B3LYP	B3LYP ECC	Clarke	Clarke ECC
P	1.000	0.184	0.13800	0.728	0.546
C1	0.000	0.044	0.03300	-0.111	-0.083
C2	-0.115	-0.047	-0.03525	-0.170	-0.128
C3	-0.115	-0.091	-0.06825	-0.150	-0.113
C4	-0.115	-0.053	-0.03975	-0.143	-0.107
H2	0.115	0.061	0.04575	0.199	0.150
H3	0.115	0.125	0.09375	0.188	0.141
H4	0.115	0.117	0.08775	0.188	0.141