residue atom $\varepsilon/kJ.mc$	ol^{-1} $\sigma/\mathrm{Å}$ q
N 0.7112	280 3.25 -0.30
H1 0.0000	
H2 0.0000	
H3 0.0000	
CA 0.2761	
HA 0.1255	
CB 0.2761	
HB1 0.1255	
1 HB2 0.1255	
CG 0.2761	
HG1 0.1255	
HG2 0.1255	
CD 0.4393	
OE1 0.8786	
OE2 0.8786	
C 0.4393	
O 0.4393	
N 0.7112	
H 0.0000	
CA 0.2761	
HA 0.1255	
CB 0.2761	
HB1 0.1255	
HB2 0.1255	
CG 0.2761	
2–20 HG1 0.1255	
HG2 0.1255	
CD 0.4393	
OE1 0.4393	
OE1 0.8786 OE2 0.8786	
C 0.4393	
N 0.7112 H 0.0000	
CA 0.2761 HA 0.1255	
CB 0.2761	
HB1 0.1255	
HB2 0.1255	
CG 0.2761	
21 HG1 0.1255	
HG2 0.1255	
CD 0.4393	
OE1 0.8786	
OE2 0.8786	
C 0.4393	
O1 0.8786	
O2 0.8786	340 2.96 -0.80

Table 1: Lennard-Jones and partial atomic charges for Poly-L-Glutamate (PGA).

atom	$\varepsilon/\mathrm{kJ.mol^{-1}}$	$\sigma/{ m \AA}$	\overline{q}
$Na^{+,1}$	6.724270	1.89744	1.00
$Na^{+,2}$	0.011598	3.33045	1.00
Cl^-	0.492830	4.41724	-1.00

Table 2: Lennard-Jones and partial atomic charges for $\mathrm{Na}^{+,1},\ \mathrm{Na}^{+,2},$ and $\mathrm{Cl}^-.$

atom	$\varepsilon/\mathrm{kJ}.\mathrm{mol}^{-1}$	$\sigma/{ m A}$	q
OW	0.650194	3.16557	-0.8476
HW1	0.000000	0.00000	0.4238
HW2	0.000000	0.00000	0.4238

Table 3: Lennard-Jones and partial atomic charges for (SPC/E) water.

residue atom ε/kJ.mol ⁻¹ σ/Å q N 0.711280 3.25 -0.30 H1 0.000000 0.00 0.33 H2 0.000000 0.00 0.33 CA 0.276144 3.50 0.25 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HG1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.71			/1 7 1-1	/ Å	
H1	resique				
H2					
H3					
CA 0.276144 3.50 0.25 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 HB 0.000000 0.00 0.30 CB 0.276144 3.50 </td <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>					
HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HG1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HG1 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 CG 0.439320 3.75 0.50 CG 0.276144 3.50 -0.12 CD 0.439320 3.75 0.50 CD 0.439320 3.75 0.50 CD 0.439320 3.75 0.50 CD 0.439320 3.75 0.50 CD 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 CG 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 CA 0.276					
CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 N 0.711280 3.02 -0.50 N 0.711280 3.02 -0.50 N 0.711280 3.02 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.14 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50<					
HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HG1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HG1 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.00 CA 0.276144 3.50 0.14 HAA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 CG 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 CG 0.276144 3.50 -0.12 PHC2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 PHC2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 PHC2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB2 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12			0.125520	2.50	0.06
1 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HG2 0.125520 2.50 0.06		$^{\mathrm{CB}}$	0.276144	3.50	-0.12
CG 0.276144 3.50 -0.12 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.52 OE1 0.878640 2.96		HB1	0.125520	2.50	0.06
HG1	1	$_{ m HB2}$	0.125520	2.50	0.06
HG2		$^{\mathrm{CG}}$	0.276144	3.50	-0.12
HG2		$_{ m HG1}$	0.125520	2.50	0.06
OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.14 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 2-20 HG1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 2-20 HG1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 </td <td></td> <td></td> <td>0.125520</td> <td>2.50</td> <td>0.06</td>			0.125520	2.50	0.06
OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.14 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 2-20 HG1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 2-20 HG1 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 <td></td> <td>$^{\mathrm{CD}}$</td> <td>0.439320</td> <td>3.75</td> <td>0.52</td>		$^{\mathrm{CD}}$	0.439320	3.75	0.52
OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.14 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 2-20 HG1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 2-20 HG1 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>					
HE2					
C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.14 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 2-20 HG1 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 N 0.711280 <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>					
O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.14 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.50 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>					
N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.14 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 2-20 HG1 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.00000 0.00 0.45 CA 0.276144 3.50 -0.12 N 0.711280 3.25 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 HA 0.00000 0.00 0.00 CA 0.276144 3.50 0.04 HB2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.00000 0.00 0.00 CA 0.276144 3.50 0.04 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 CG 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 CC 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 CC 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80					
H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.14 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 2-20 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.00000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 HA 0.00000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 -0.12 HA 0.00000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.04 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 CG 0.2					
CA 0.276144 3.50 0.14 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 2-20 HG1 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.04 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>					
HA					
CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 2-20 HG1 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 N 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.04 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520<					
HB1					
HB2					
CG 0.276144 3.50 -0.12 2-20 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.03 CA 0.276144 3.50 0.04 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>					
2-20 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 -0.44 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 HB2 0.125520 2.50 0.06 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 21 HG1 0.125520 2.50 0.06 CD					
HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.04 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50					
CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.04 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.0	2-20				
OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.04 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0		$_{ m HG2}$	0.125520	2.50	0.06
OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.04 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 21 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280<			0.439320		0.52
HE2		OE1	0.878640	2.96	-0.44
C 0.439320 3.75 0.50 O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.04 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CB 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HG1 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 <td></td> <td>OE2</td> <td>0.711280</td> <td>3.00</td> <td>-0.53</td>		OE2	0.711280	3.00	-0.53
O 0.878640 2.96 -0.50 N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.04 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 21 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80		HE2	0.000000	0.00	0.45
N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.04 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 21 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.276144 3.50 -0.12 21 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80		$^{\mathrm{C}}$	0.439320	3.75	0.50
N 0.711280 3.25 -0.50 H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.04 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 HG1 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 21 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80		O	0.878640	2.96	-0.50
H 0.000000 0.00 0.30 CA 0.276144 3.50 0.04 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 21 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80		N	0.711280	3.25	-0.50
CA 0.276144 3.50 0.04 HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 21 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80	21	H	0.000000	0.00	
HA 0.125520 2.50 0.06 CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 21 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80		CA			
CB 0.276144 3.50 -0.12 HB1 0.125520 2.50 0.06 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 21 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80					
HB1 0.125520 2.50 0.06 HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 21 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80					
HB2 0.125520 2.50 0.06 CG 0.276144 3.50 -0.12 21 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80					
CG 0.276144 3.50 -0.12 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80					
21 HG1 0.125520 2.50 0.06 HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80					
HG2 0.125520 2.50 0.06 CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80					
CD 0.439320 3.75 0.52 OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80					
OE1 0.878640 2.96 -0.44 OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80					
OE2 0.711280 3.00 -0.53 HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80					
HE2 0.000000 0.00 0.45 C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80					
C 0.439320 3.75 0.70 O1 0.878640 2.96 -0.80					
O1 0.878640 2.96 -0.80					
O2 0.878640 2.96 -0.80					
		O2	0.878640	2.96	-0.80

Table 4: Lennard-Jones and partial atomic charges for Poly-L-Glutamic acid (PGL).