

Appendix

Table 8 Partial atomic charges calculated for MDEA using 3 different schemes

Atom	MPA	LPA	CM4	Atom	MPA	LPA	CM4
N1	-0.46013	-0.19702	-0.46258	H12	0.09469	0.09825	0.05337
C2	-0.16432	-0.22775	-0.00278	H13	0.12202	0.11344	0.07352
H3	0.11847	0.10917	0.06274	O14	-0.57709	-0.35763	-0.48039
H4	0.11185	0.10673	0.06005	H15	0.32501	0.22577	0.31673
H5	0.08830	0.07969	0.03748	C16	-0.04059	-0.11617	0.06112
C6	-0.05649	-0.13928	0.03249	C17	0.04654	-0.04938	0.06983
H7	0.06342	0.07176	0.02954	H18	0.10118	0.09037	0.04852
H8	0.11454	0.11133	0.06565	H19	0.10822	0.09691	0.05437
H9	0.07888	0.07918	0.03789	O20	-0.56651	-0.36062	-0.49044
C10	0.06906	-0.05336	0.06754	H21	0.33075	0.23240	0.32242
H11	0.09220	0.08620	0.04292				

Table 9 Partial atomic charges calculated for PZ using 3 different schemes

Atom	MPA	LPA	CM4	Atom	MPA	LPA	CM4
C1	-0.04494	-0.13372	0.04385	H9	0.11413	0.10965	0.06458
C2	-0.05667	-0.12607	0.05419	H10	0.08922	0.09267	0.04785
C3	-0.05669	-0.12752	0.05274	H11	0.07603	0.07231	0.03022
C4	-0.04494	-0.13399	0.04359	H12	0.10708	0.10742	0.06275
H5	0.07591	0.07175	0.02965	N13	-0.53651	-0.29572	-0.58745
H6	0.10736	0.10799	0.06333	H14	0.25172	0.17477	0.28535
H7	0.08947	0.09316	0.04834	N15	-0.52638	-0.28888	-0.58130
H8	0.11408	0.10885	0.06377	H16	0.24114	0.16733	0.27854

Table 10 Partial atomic charges calculated for PZCOO using 3 different schemes

Atom	MPA	LPA	CM4	Atom	MPA	LPA	CM4
C1	-0.03902	-0.12251	0.05474	H10	0.05102	0.06642	0.02490
C2	0.01618	-0.12053	0.05709	H11	0.07175	0.07387	0.03180
C3	0.01601	-0.12015	0.05749	H12	0.11930	0.10726	0.06271
C4	-0.03896	-0.12323	0.05403	N13	-0.51931	-0.29944	-0.58704
H5	0.07161	0.07326	0.03119	H14	0.25134	0.17263	0.28296
H6	0.11933	0.10722	0.06266	N15	-0.55732	-0.21256	-0.47952
H7	0.05107	0.06700	0.02548	C16	0.58155	0.12315	0.41829
H8	0.08355	0.10667	0.06889	O17	-0.68076	-0.50273	-0.61708
H9	0.08350	0.10665	0.06883	O18	-0.68083	-0.50299	-0.61741

Table 11 Partial atomic charges calculated for PZH using 3 different schemes

Atom	MPA	LPA	CM4	Atom	MPA	LPA	CM4
C1	-0.07148	-0.10275	0.06204	H10	0.12610	0.10751	0.06198
C2	-0.08444	-0.11862	0.06166	H11	0.17468	0.13158	0.08630
C3	-0.08439	-0.11906	0.06123	H12	0.19144	0.14515	0.10147
C4	-0.07163	-0.10221	0.06258	N13	-0.43636	0.00650	-0.34428
H5	0.17468	0.13172	0.08644	N14	-0.53021	-0.27374	-0.56959
H6	0.19143	0.14527	0.10158	H15	0.26313	0.18313	0.29360
H7	0.12638	0.10830	0.06278	H16	0.38804	0.25416	0.35686
H8	0.13460	0.12847	0.08299	H17	0.37350	0.24604	0.34926
H9	0.13454	0.12856	0.08309				