

Table 1S.  
Partial atomic charges in Ce6 molecule calculated by different approaches.

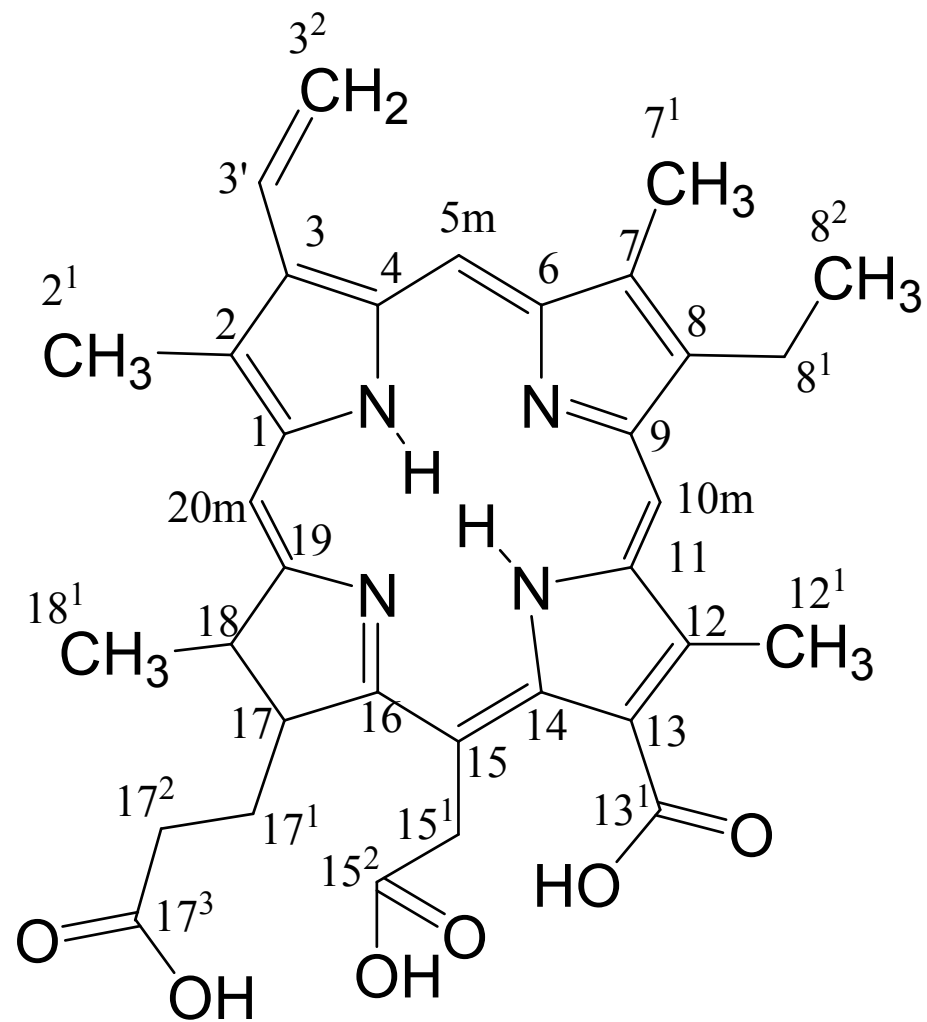
	Basis set for ab initio DFT-B3LYP calculations									Semi-empirical quantum mechanics			Topological approach
	6-311G(2d,2p)			6-311G(2d,2p)			6-31G(d)			PM3	PM6	PM6	Gastaiger-Hückel
	without water			with water			without water			without water		with water	without water
Atom number corresponding to Fig. 1	CHELPG	MPA	NPA	CHELPG	MPA	NPA	CHELPG	MPA	NPA				
1	0.113644	0.189662	0.18117	0.185344	0.196495	0.20154	0.128738	0.415238	0.18036	-0.15804	0.070363	0.176872	0.0778
2	-0.03467	-0.06125	0.01304	-0.0596	-0.0613	0.02654	-0.04558	0.039039	-0.0085	-0.05193	0.091302	0.044146	-0.0034
2 <sup>1</sup>	0.060872	-0.17276	-0.6129	0.029086	-0.16698	-0.6254	0.045637	-0.56079	-0.7149	-0.04936	-0.47997	-0.48068	-0.0302
3 <sup>1</sup>	-0.05726	-0.08433	-0.1895	-0.11281	-0.11124	-0.2179	-0.06025	-0.08952	-0.2226	-0.03671	-0.02578	-0.10086	-0.0662
3 <sup>2</sup>	-0.32461	-0.13179	-0.3836	-0.27939	-0.12493	-0.3369	-0.33101	-0.36909	-0.4399	-0.21386	-0.39532	-0.31512	-0.1032
4	0.066066	0.163647	0.19634	0.090512	0.162584	0.20474	0.080169	0.410867	0.19253	-0.04654	0.238544	0.220315	0.0775
5m	-0.27614	-0.16865	-0.2854	-0.27462	-0.15862	-0.2719	-0.29249	-0.3385	-0.3113	-0.27236	-0.44969	-0.41764	-0.0284

6	0.252178	0.21754	0.20293	0.301098	0.200388	0.22026	0.238944	0.341288	0.19961	0.045912	0.253646	0.276575	-0.0374
7	-0.00491	-0.04239	-0.0720	-0.01018	-0.0469	-0.0591	0.011015	0.028237	-0.0777	-0.15843	-0.11341	-0.10507	-0.0709
7 <sup>1</sup>	-0.01008	-0.17605	-0.5907	-0.04989	-0.16547	-0.6005	-0.06656	-0.52956	-0.6887	-0.0337	-0.43405	-0.44419	-0.049
8	-0.27379	-0.03688	-0.0496	-0.27149	-0.04733	-0.0360	-0.26439	0.044438	-0.0636	-0.10162	-0.04994	-0.05125	-0.0687
8 <sup>1</sup>	0.321662	-0.15683	-0.3921	0.284873	-0.15387	-0.3993	0.277782	-0.33652	-0.4671	-0.02871	-0.21891	-0.22565	-0.0383
8 <sup>2</sup>	-0.00159	-0.13895	-0.5503	0.013741	-0.14996	-0.5521	-0.07606	-0.43055	-0.6633	-0.11142	-0.45026	-0.45157	-0.0595
9	0.253594	0.22498	0.12324	0.278416	0.203044	0.12923	0.246664	0.289458	0.11625	-0.14789	-0.00687	0.045876	-0.0325
10m	-0.29031	-0.10187	-0.1805	-0.3113	-0.09332	-0.1729	-0.28064	-0.27384	-0.2148	0.114524	0.006126	-0.05838	-0.021
11	0.135086	0.116741	0.10007	0.158291	0.095767	0.08854	0.120573	0.360986	0.11582	-0.32262	-0.16604	-0.13904	0.0895
12	-0.04082	-0.06506	0.00191	-0.06943	-0.07468	0.0063	-0.0252	0.000711	-0.0286	-0.1665	0.044344	0.063776	0.0065
12 <sup>1</sup>	0.006507	-0.17285	-0.5931	-0.0301	-0.16883	-0.6008	-0.05647	-0.52852	-0.6918	-0.02325	-0.45826	-0.47431	-0.0255
13	-0.20812	0.086402	-0.1581	-0.27475	0.005834	-0.2096	-0.22545	0.045226	-0.1612	-0.13114	-0.26709	-0.38224	0.0886
13 <sup>1</sup>	0.822944	0.523005	0.83028	0.898141	0.553684	0.84241	0.815831	0.444877	0.81723	0.503644	0.722745	0.75468	0.2448
14	0.159016	0.144088	0.21838	0.147826	0.107287	0.19293	0.17517	0.339848	0.22229	-0.16852	0.082091	0.084396	0.0946
15	-0.00379	0.052776	0.02746	-0.05126	0.011245	-0.0271	-0.01154	0.172592	0.00824	0.135854	0.158265	0.021395	0.0265
15 <sup>1</sup>	-0.36139	-0.29034	-0.5362	-0.31872	-0.29958	-0.5331	-0.35255	-0.48872	-0.5974	-0.20016	-0.51828	-0.47439	0.0337
15 <sup>2</sup>	0.772201	0.524526	0.78924	0.768546	0.514206	0.8033	0.782006	0.548176	0.76088	0.416446	0.747987	0.771414	0.044
16	0.138095	0.309756	0.20147	0.103975	0.270983	0.18359	0.129768	0.218047	0.18929	-0.17579	-0.01669	0.074455	0.0285

17	0.076783	-0.13002	-0.2540	0.076559	-0.12906	-0.2553	0.110537	-0.18017	-0.288	-0.0473	-0.11644	-0.14295	0.0248
17 <sup>1</sup>	-0.02655	-0.02212	-0.3672	-0.0034	-0.03396	-0.3630	-0.10003	-0.24614	-0.4467	-0.09254	-0.22047	-0.20869	-0.0232
17 <sup>2</sup>	-0.03103	-0.17469	-0.4803	-0.02185	-0.19545	-0.4891	-0.05097	-0.3462	-0.5514	-0.17447	-0.46529	-0.46612	0.0029
17 <sup>3</sup>	0.757164	0.435762	0.78726	0.763304	0.413944	0.79781	0.743257	0.525399	0.76456	0.420215	0.74679	0.762301	0.035
18	0.251434	-0.1199	-0.2386	0.220146	-0.12235	-0.2432	0.174137	-0.1793	-0.2803	-0.09223	-0.14168	-0.17904	0.0206
18 <sup>1</sup>	-0.16677	-0.1378	-0.5567	-0.17032	-0.14214	-0.5594	-0.18729	-0.45507	-0.6637	-0.10816	-0.47104	-0.46475	-0.0467
19	0.313097	0.256359	0.26828	0.340808	0.247191	0.28697	0.334643	0.369558	0.2516	-0.0775	0.165464	0.297392	0.0181
20m	-0.39072	-0.13163	-0.2914	-0.43266	-0.14697	-0.3083	-0.40525	-0.31386	-0.3142	-0.11617	-0.26634	-0.40719	-0.0136
N(I)	-0.03686	-0.21965	-0.5207	-0.09111	-0.22373	-0.5243	-0.06536	-0.77889	-0.5271	0.320513	-0.21925	-0.24052	-0.2671
N(II)	-0.45146	-0.52089	-0.5704	-0.50741	-0.52366	-0.5898	-0.43379	-0.66635	-0.5485	-0.11419	-0.39538	-0.46032	-0.4013
N(III)	-0.17538	-0.19813	-0.4859	-0.19562	-0.18358	-0.4881	-0.17537	-0.76141	-0.4964	0.565765	-0.0107	-0.01821	-0.2652
N(IV)	-0.456	-0.50965	-0.5406	-0.47948	-0.50862	-0.5677	-0.44403	-0.61799	-0.5145	-0.04107	-0.35564	-0.46577	-0.3085
H(N(1))	0.147893	0.150948	0.45583	0.148282	0.142221	0.44817	0.150107	0.395506	0.46821	0.13574	0.331838	0.319068	0.222
H(NIII)	0.206881	0.144547	0.4386	0.212809	0.140878	0.43879	0.200658	0.381408	0.45399	0.077884	0.282348	0.289464	0.2248
O(17 <sup>2</sup> )	-0.731	-0.57341	-0.7875	-0.7992	-0.61768	-0.8326	-0.72094	-0.62072	-0.7683	-0.63812	-0.77799	-0.83074	-0.569
O(17 <sup>2</sup> )	-0.785	-0.61009	-0.7912	-0.84352	-0.65067	-0.8385	-0.76824	-0.64372	-0.7688	-0.66226	-0.8065	-0.84453	-0.569
O(15 <sup>2</sup> )	-0.705	-0.58993	-0.7638	-0.77738	-0.63805	-0.8124	-0.70844	-0.60865	-0.7464	-0.62635	-0.75616	-0.81307	-0.5667
O(15 <sup>2</sup> )	-0.75004	-0.62691	-0.8007	-0.81506	-0.66602	-0.8439	-0.75118	-0.65467	-0.7776	-0.65154	-0.7962	-0.84332	-0.5667

O(13 <sup>1</sup> )	-0.61592	-0.45921	-0.6175	-0.66223	-0.49201	-0.6484	-0.60524	-0.47699	-0.6071	-0.43799	-0.58196	-0.63121	-0.371
OH(13 <sup>1</sup> )	-0.55563	-0.41621	-0.6765	-0.59583	-0.43359	-0.6845	-0.5812	-0.53949	-0.6822	-0.26849	-0.47955	-0.49918	-0.2974
H(13 <sup>1</sup> )	0.404817	0.237765	0.49928	0.436449	0.256478	0.50631	0.428116	0.411017	0.50936	0.242569	0.354589	0.360121	0.2515
H(10m)	0.176551	0.041629	0.19752	0.21426	0.082509	0.21975	0.16326	0.118905	0.22966	0.094262	0.145319	0.178037	0.0756
H(CH3-7 <sup>1</sup> )	0.024165	0.035416	0.19112	0.062144	0.065364	0.20928	0.031859	0.132148	0.22406	0.032821	0.144557	0.16664	0.0327
H(CH3-7 <sup>1</sup> )	-0.01122	0.059603	0.19725	0.019368	0.075463	0.2093	0.005645	0.143238	0.23145	0.039422	0.151021	0.165853	0.0327
H(CH3-7 <sup>1</sup> )	-0.01539	0.061145	0.19665	0.009351	0.075629	0.20893	0.003628	0.143558	0.23195	0.040425	0.153004	0.167961	0.0327
H(5m)	0.083181	0.028938	0.18157	0.106301	0.071497	0.20559	0.09133	0.087604	0.21111	0.102006	0.171958	0.200104	0.062
H(CH3-2 <sup>1</sup> )	-0.01185	0.063958	0.20772	0.013443	0.081826	0.22283	-0.00418	0.159056	0.24213	0.04513	0.170154	0.183941	0.0386
H(CH3-2 <sup>1</sup> )	-0.01757	0.059391	0.20501	0.016831	0.082098	0.22296	-0.00813	0.154216	0.23879	0.044231	0.167658	0.185156	0.0386
H(CH3-2 <sup>1</sup> )	0.037133	0.068824	0.21581	0.059162	0.084378	0.22474	0.037093	0.172616	0.24959	0.052627	0.168878	0.179483	0.0386
H(20m)	0.108012	0.046393	0.19931	0.131165	0.077023	0.21891	0.11422	0.110459	0.22755	0.114028	0.170196	0.204017	0.0503
H(C18)	-0.03867	0.040834	0.20918	-0.02684	0.048495	0.2122	-0.02091	0.137305	0.24938	0.090485	0.147829	0.160393	0.0535
H(C17)	0.003238	0.032804	0.21427	0.006071	0.03485	0.21326	-0.00162	0.142454	0.25295	0.097395	0.154198	0.158486	0.054
H(CH3-18 <sup>1</sup> )	-0.00212	0.01674	0.17492	0.036232	0.058153	0.19703	0.010343	0.107951	0.20897	0.016572	0.1266	0.159274	0.0261
H(CH3-18 <sup>1</sup> )	0.011724	0.061641	0.19208	0.01507	0.059407	0.19175	0.026205	0.149239	0.22925	0.04637	0.159456	0.158012	0.0261
H(CH3-18 <sup>1</sup> )	0.018527	0.057613	0.19857	0.023834	0.062828	0.19919	0.031477	0.147549	0.23294	0.048055	0.154958	0.160955	0.0261
H(CH3-12 <sup>1</sup> )	-0.00176	0.052202	0.21237	0.015567	0.054271	0.20848	0.026524	0.160987	0.24611	0.049319	0.166845	0.166567	0.0415

H(CH3-12 <sup>1</sup> )	-0.00299	0.055019	0.19383	0.025741	0.079043	0.21038	0.013473	0.13888	0.22869	0.028036	0.15087	0.174953	0.0415
H(CH3-12 <sup>1</sup> )	-0.02459	0.051737	0.19086	0.013875	0.078482	0.20932	-0.00489	0.133714	0.2251	0.022125	0.14557	0.176389	0.0415
H(vinyl-C3 <sup>1</sup> )	0.094692	0.04307	0.19166	0.12493	0.075925	0.20708	0.093838	0.120768	0.22462	0.09371	0.133677	0.15385	0.0609
H(vinyl-C3 <sup>2</sup> )	0.093255	0.03736	0.1756	0.125029	0.080235	0.19673	0.101841	0.111214	0.20594	0.077332	0.147296	0.164544	0.0485
H(vinyl-C3 <sup>2</sup> )	0.12211	0.052679	0.18871	0.13399	0.079659	0.19431	0.118571	0.140843	0.2131	0.101522	0.164772	0.168085	0.0485
H(CH2-17 <sup>1</sup> )	-0.00722	0.049134	0.21369	-0.03322	0.025815	0.19766	0.022593	0.160234	0.2523	0.083324	0.158426	0.140978	0.0315
H(CH2-17 <sup>1</sup> )	-0.04403	0.023065	0.189	-0.0442	0.031222	0.1877	-0.0128	0.123397	0.23178	0.055479	0.138854	0.137283	0.0315
H(CH2-17 <sup>2</sup> )	-0.05335	0.013414	0.17327	-0.03175	0.04174	0.19067	-0.03646	0.102021	0.21004	0.035389	0.143541	0.171394	0.0432
H(CH2-17 <sup>2</sup> )	-0.03164	0.02836	0.18605	-0.02709	0.051552	0.19641	-0.01609	0.114956	0.22317	0.046321	0.152913	0.170519	0.0432
H(CH2-15 <sup>1</sup> )	0.129748	0.06878	0.23332	0.097181	0.055111	0.22442	0.115807	0.178563	0.26635	0.097767	0.203265	0.192707	0.056
H(CH2-15 <sup>1</sup> )	0.131183	0.081297	0.23465	0.123288	0.086065	0.23233	0.129187	0.171429	0.26763	0.091875	0.193715	0.188327	0.056
H(CH2-8 <sup>1</sup> )	-0.07767	0.036937	0.18595	-0.04887	0.061873	0.20217	-0.05693	0.122001	0.22715	0.044727	0.129691	0.149466	0.0369
H(CH2-8 <sup>1</sup> )	-0.09263	0.049757	0.19417	-0.07591	0.061036	0.20022	-0.06902	0.135106	0.23472	0.051554	0.133739	0.143932	0.0369
H(CH2-8 <sup>2</sup> )	-0.04275	0.026066	0.17502	-0.01381	0.056579	0.19325	-0.02058	0.11121	0.21113	0.025351	0.132376	0.154051	0.0247
H(CH2-8 <sup>2</sup> )	-0.01911	0.066772	0.19645	-0.02942	0.060692	0.19137	0.010132	0.155979	0.23398	0.050625	0.15809	0.153311	0.0247
H(CH2-8 <sup>2</sup> )	-0.0211	0.051098	0.18625	-0.01906	0.064403	0.19144	0.006076	0.139079	0.22316	0.039386	0.148878	0.154596	0.0247



*Chlorin e6*