



Table S2. Geometric parameter  $\sigma_2$  of 210 interactive-site pairs (nm). “hs” means hard-sphere

	G	A	V	P	T	S	N	D	R	K	E	Q	L	I	F	Y	W	M	C	H
G	0.75																			
A	0.60	0.55																		
V	0.70	0.65	0.65																	
P	0.75	0.65	0.70	0.70																
T	0.65	0.60	0.65	0.65	0.65															
S	hs	0.60	0.65	0.65	0.60	0.60														
N	0.65	0.62	0.70	0.65	0.70	0.70	0.65													
D	0.60	0.65	hs	0.60	hs	0.40	0.55	0.85												
R	0.65	0.65	hs	0.80	hs	hs	0.50	0.80	0.65											
K	0.75	0.70	0.65	0.70	0.60	hs	0.70	0.80	0.80	1.00										
E	0.65	0.65	hs	0.65	0.80	hs	0.60	0.80	0.70	0.80	0.80									
Q	0.75	0.65	0.70	0.70	0.70	0.70	0.70	hs	0.65	0.70	0.60	0.75								
L	0.75	0.65	0.70	0.70	0.65	0.65	0.70	hs	0.70	0.70	0.80	0.75	0.70							
I	0.70	0.65	0.70	0.70	0.70	0.65	0.70	hs	hs	0.75	hs	0.70	0.70	0.70						
F	0.75	0.65	0.70	0.70	0.65	0.60	0.70	0.68	0.55	0.65	0.75	0.75	0.70	0.70	0.70					
Y	0.70	0.60	0.60	0.70	0.65	0.60	0.70	0.80	0.70	0.65	0.85	0.70	0.70	0.70	0.70	hs				
W	0.80	0.70	0.70	0.70	0.70	0.60	0.70	0.80	0.65	0.70	0.80	0.80	0.75	0.75	0.75	hs	hs			
M	0.75	0.65	0.65	0.70	0.65	0.65	0.70	hs	0.75	0.65	0.75	0.75	0.70	0.70	0.65	0.65	0.70	0.65		
C	0.60	0.60	0.65	0.65	0.70	0.65	0.65	0.45	0.65	0.65	0.50	0.65	0.70	0.70	0.70	0.75	0.75	0.70	0.65	
H	0.75	0.65	0.70	0.70	hs	hs	0.70	0.55	0.60	0.70	0.58	0.75	0.70	0.70	0.70	0.70	0.70	0.70	0.75	0.75

Table S3. Energetic parameter  $\epsilon$  of 210 interactive-site pairs ( $k_B T$ )

	G	A	V	P	T	S	N	D	R	K	E	Q	L	I	F	Y	W	M	C	H
G	-0.16																			
A	-0.08	-0.14																		
V	-0.12	-0.10	-0.12																	
P	-0.14	-0.08	-0.08	-0.14																
T	-0.04	-0.08	-0.08	-0.08	-0.04															
S	hs	-0.11	-0.08	-0.06	-0.04	-0.06														
N	-0.08	-0.10	-0.11	-0.10	-0.06	-0.08	-0.08													
D	0.04	-0.02	hs	0.04	hs	-0.10	-0.10	0.08												
R	-0.04	-0.02	hs	-0.08	hs	hs	-0.02	-0.08	0.08											
K	-0.04	-0.04	-0.06	-0.08	-0.06	hs	-0.06	-0.08	0.08	0.04										
E	-0.04	-0.04	hs	-0.04	0.04	hs	-0.08	0.06	-0.06	-0.08	0.06									
Q	-0.12	-0.11	-0.08	-0.10	-0.08	-0.04	-0.08	hs	-0.06	-0.06	-0.04	-0.06								
L	-0.14	-0.12	-0.10	-0.10	-0.08	-0.10	-0.10	hs	-0.04	-0.08	-0.04	-0.12	-0.12							
I	-0.12	-0.08	-0.10	-0.12	-0.08	-0.08	-0.08	hs	hs	-0.04	hs	-0.08	-0.10	-0.08						
F	-0.16	-0.10	-0.08	-0.14	-0.08	-0.04	-0.12	-0.04	-0.16	-0.04	-0.04	-0.12	-0.12	-0.12	-0.12					
Y	-0.12	-0.08	-0.04	-0.06	-0.02	-0.04	-0.04	0.06	-0.22	-0.14	0.04	-0.08	-0.08	-0.06	-0.08	hs				
W	-0.12	-0.08	-0.08	-0.12	-0.04	-0.04	-0.06	0.06	-0.24	-0.28	0.040	-0.08	-0.10	-0.08	-0.08	hs	hs			
M	-0.14	-0.10	-0.10	-0.12	-0.04	-0.06	-0.12	hs	-0.10	-0.10	-0.04	-0.12	-0.11	-0.11	-0.10	-0.08	-0.10	-0.10		
C	-0.08	-0.08	-0.08	-0.08	-0.08	-0.06	-0.10	-0.30	-0.11	-0.08	-0.24	-0.07	-0.10	-0.08	-0.10	-0.05	-0.08	-0.08	-0.07	
H	-0.08	-0.08	-0.10	-0.10	hs	hs	-0.08	-0.15	-0.04	-0.04	-0.12	-0.10	-0.12	-0.12	-0.11	-0.10	-0.10	-0.08	-0.06	-0.06