

**Table S7. Summary of four D-series dipole-interaction polarizable models in anisotropic polarizability calculations.**

D-Series Models		Set1	Set2	Set3	Set4	Set5	Set6	Set7	Set8	Set9	Set10	Set11	Set12	Set13	All
#Data		595	665	107	38	444	28	85	606	105	1252	799	57	61	4842
<b>Applequist</b>															
Diagonal Elements	AUE	12.18	6.71	23.88	27.16	12.09	14.68	12.19	9.10	14.45	14.48	6.44	25.04	22.65	11.41
	RMSE	15.54	7.53	28.52	29.70	13.56	17.04	15.03	10.32	16.17	16.79	7.25	31.10	24.23	13.27
	APE	15.01	36.26	33.89	26.63	10.96	8.35	17.67	6.37	6.09	16.26	35.23	50.05	32.01	21.08
All elements	AUE	7.18	4.77	15.24	15.98	8.37	9.49	8.00	6.35	9.64	8.71	4.66	15.17	12.49	7.32
	RMSE	11.52	6.29	21.42	21.61	10.76	12.76	11.26	8.05	12.39	12.47	6.14	23.46	17.53	10.19
Molecular Polarizability	AUE	7.68	4.15	18.21	17.92	7.15	6.88	9.25	6.17	10.28	8.98	4.12	17.66	14.98	7.31
	APE	8.72	19.85	27.52	17.06	6.52	3.16	12.73	4.34	4.39	9.44	20.01	40.36	20.36	12.49
MPAD	APE	18.32	41.56	42.43	27.94	11.75	7.78	21.44	7.32	6.93	18.20	40.45	74.08	33.93	24.35
<b>Thole Exponential</b>															
Diagonal	AUE	3.18	1.34	10.20	20.38	4.84	11.75	2.77	3.70	4.38	7.41	1.24	10.24	17.79	4.54
	RMSE	3.93	1.55	10.63	21.45	5.45	14.74	3.08	4.08	4.81	9.35	1.47	10.81	19.03	5.38
	APE	3.94	7.91	14.97	20.21	3.64	4.72	4.20	2.57	1.84	6.51	7.57	19.81	24.44	6.33
All Elements	AUE	1.85	0.93	5.61	11.12	3.12	7.37	1.75	2.57	3.00	4.26	0.88	5.46	9.31	2.74
	RMSE	2.90	1.27	7.62	15.29	4.14	10.97	2.36	3.25	3.77	6.80	1.22	7.71	13.52	4.01
Molecular Polarizability	AUE	1.79	0.40	7.07	15.27	3.43	10.88	1.74	2.34	2.95	5.95	0.33	6.95	12.15	3.14
	APE	2.04	1.74	10.20	15.25	2.54	4.95	2.62	1.59	1.24	5.38	1.65	12.84	16.07	3.38
MPAD	APE	4.87	8.76	15.21	21.48	4.11	6.73	4.63	2.83	2.03	8.93	8.47	20.03	25.66	7.47
<b>Thole Linear</b>															
Diagonal Elements	AUE	3.07	1.21	11.54	19.84	5.25	11.53	3.38	5.02	6.90	7.45	1.16	10.96	18.04	4.81
	RMSE	3.77	1.31	11.94	20.90	5.83	13.93	3.70	5.56	7.89	9.29	1.25	11.42	19.23	5.61
	APE	3.88	6.13	17.17	19.56	4.05	4.78	4.93	3.58	2.96	6.67	6.00	21.43	25.05	6.13
All Elements	AUE	1.82	0.80	6.31	10.95	3.38	7.17	2.07	3.61	4.72	4.37	0.78	5.86	9.48	2.95
	RMSE	2.81	1.03	8.55	14.94	4.46	10.43	2.76	4.47	6.12	6.82	0.99	8.17	13.67	4.20
Molecular Polarizability	AUE	1.74	0.60	8.13	14.77	3.66	9.69	2.37	3.64	4.50	6.05	0.58	7.45	12.33	3.48
	APE	2.11	2.25	11.94	14.71	2.79	4.36	3.42	2.64	1.98	5.61	2.30	13.90	16.61	3.86
MPAD	APE	4.81	6.60	17.39	20.83	4.51	6.34	5.42	4.02	3.45	9.10	6.47	21.32	26.16	7.18
<b>Thole Amoeba</b>															
Diagonal Elements	AUE	3.33	1.79	12.07	20.31	5.40	13.77	4.00	4.50	5.84	7.92	1.65	11.23	18.77	5.10
	RMSE	4.12	2.11	12.51	21.42	6.01	16.75	4.33	4.90	6.60	9.91	1.97	11.68	20.02	6.00
	APE	4.14	7.82	18.23	19.78	4.27	5.64	5.90	3.21	2.54	6.93	7.64	22.13	25.93	6.77
All Elements	AUE	1.95	1.15	6.61	11.21	3.55	8.37	2.43	3.35	4.16	4.60	1.09	5.99	9.83	3.12
	RMSE	3.05	1.61	8.96	15.31	4.68	12.36	3.20	4.07	5.29	7.24	1.51	8.35	14.22	4.49
Molecular Polarizability	AUE	2.07	1.39	8.30	15.27	3.67	12.53	2.72	2.98	3.25	6.55	1.32	7.46	12.86	3.81
	APE	2.39	5.76	12.28	15.02	2.86	5.68	3.95	2.11	1.40	5.94	5.79	13.98	17.23	5.00
MPAD	APE	5.15	9.86	18.31	21.14	4.74	7.63	6.36	3.51	2.86	9.53	9.66	21.82	27.13	8.31