

Table 14. Variation of atomic charges for conformers of **I**

Atom	Conformer						Mean value
	1R, 1S	2R, 2S	3R, 3S	4R, 4S	5R, 5S	6R, 6S	
S1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
O1	-1.14	-1.15	-1.15	-1.14	-1.14	-1.15	-1.15
O2	-1.06	-1.06	-1.06	-1.06	-1.06	-1.06	-1.06
N1	-1.13	-1.13	-1.13	-1.13	-1.13	-1.13	-1.13
N3	-1.10	-1.10	-1.10	-1.10	-1.10	-1.10	-1.10
C2	0.58	0.58	0.58	0.58	0.58	0.58	0.58
C4	0.38	0.38	0.38	0.37	0.37	0.38	0.38
C4'	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02
C5	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01
C5'	1.47	1.46	1.45	1.46	1.46	1.46	1.46
C6	0.39	0.39	0.39	0.39	0.39	0.39	0.39
C6'	0.03	0.02	0.02	0.03	0.04	0.02	0.03
C7	0.45	0.45	0.44	0.44	0.44	0.45	0.45
C8	0.04	0.03	0.03	0.03	0.03	0.04	0.04
H1	0.41	0.41	0.41	0.41	0.41	0.41	0.41
H3	0.41	0.41	0.40	0.41	0.41	0.40	0.41
H4	0.05	0.04	0.04	0.05	0.05	0.04	0.05
H41'	0.03	0.02	0.02	0.03	0.03	0.02	0.02
H42'	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
H43'	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
H61'	0.03	0.03	0.03	0.07	0.06	0.03	0.04
H62'	0.01	0.01	0.01	0.03	0.04	0.01	0.02
H63'	0.07	0.09	0.09	0.01	0.00	0.10	0.06
H71	0.04	0.05	0.02	0.02	0.05	0.03	0.03
H72	0.03	0.02	0.05	0.05	0.02	0.04	0.03
H81	0.01	0.02	0.00	0.00	0.02	0.01	0.01
H82	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00	0.01	0.01
H83	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01
Σ	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01