Table 29. Variation of atomic charges for conformers of **II**

Atom	Conformer						Mean value
	1R, 1S	2R, 2S	3R, 3S	4R, 4S	5R, 5S	6R, 6S	
S	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.01
O	-1.10	-1.11	-1.11	-1.11	-1.10	-1.10	-1.11
N1	-1.12	-1.13	-1.13	-1.13	-1.12	-1.13	-1.13
N3	-1.10	-1.09	-1.09	-1.10	-1.10	-1.10	-1.10
C2	0.58	0.57	0.57	0.58	0.58	0.59	0.58
C4	0.36	0.36	0.36	0.36	0.36	0.36	0.36
C4'	0.05	0.05	0.05	0.05	0.06	0.05	0.05
C4"	0.03	0.02	0.03	0.02	0.03	0.02	0.03
C5	-0.03	-0.04	-0.04	-0.04	-0.03	-0.03	-0.04
C5'	0.94	0.95	0.95	0.95	0.94	0.94	0.94
C5"	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.01
C6	0.37	0.39	0.39	0.39	0.37	0.38	0.38
C6'	0.03	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03
H1	0.41	0.41	0.41	0.42	0.41	0.41	0.41
H3	0.41	0.41	0.40	0.40	0.41	0.41	0.41
H4	0.05	0.01	0.02	0.01	0.06	0.05	0.03
H41	0.02	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01
H42	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.00
H43	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00
H44	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
H45	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
H51"	0.04	0.04	0.04	0.04	0.01	0.01	0.03
H52"	0.01	0.01	0.02	0.01	0.01	0.04	0.02
H53"	0.01	0.01	0.01	0.01	0.04	0.01	0.02
H61	0.03	0.06	0.07	0.07	0.03	0.03	0.05
H62	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.02	0.00
H63	0.03	0.06	0.05	0.06	0.03	0.03	0.05
Σ	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01