

# Supplementary information: Validation of experimental charge densities: the refinement of the macrolide antibiotic roxithromycin

Julian J. Holstein, Peter Luger, Roman Kalinowski, Stefan Mebs, Carsten Paulmann and Birger Dittrich\*

## Deformation- and residual density plots of the lactone group (O14, C1, O21)

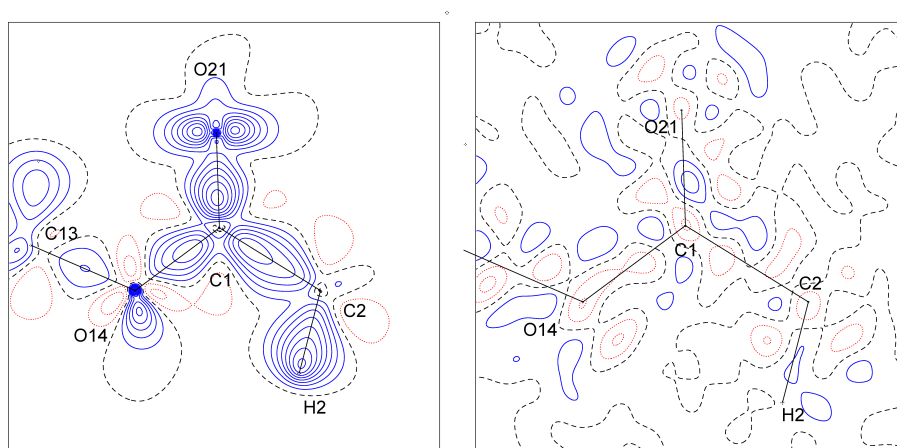
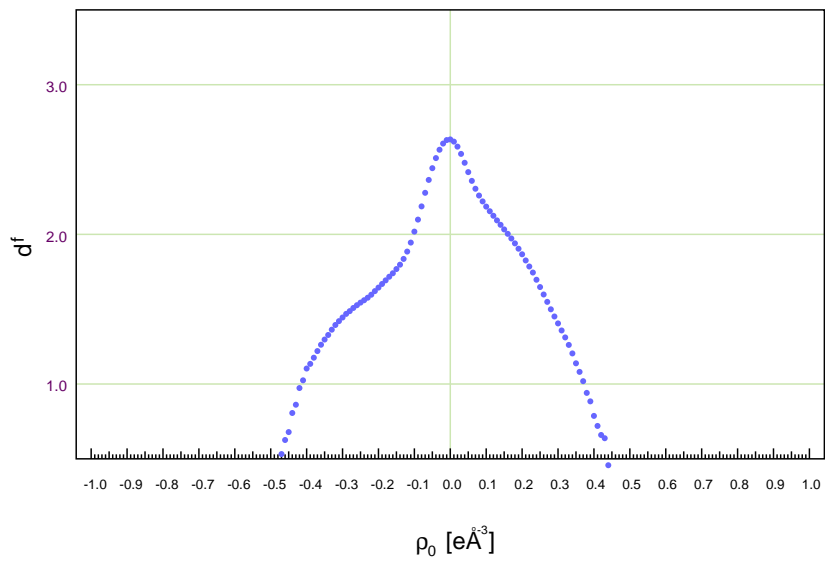
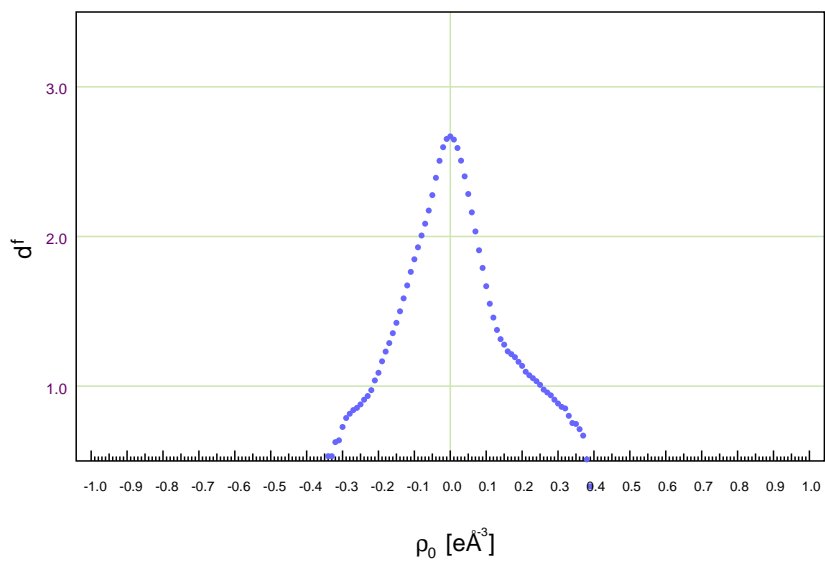


Figure 1: Left: deformation density of lactone function (O14, C1, O21), contours are of  $0.1 e\text{\AA}^{-3}$ . Right: residual density, contours are of  $0.05 e\text{\AA}^{-3}$

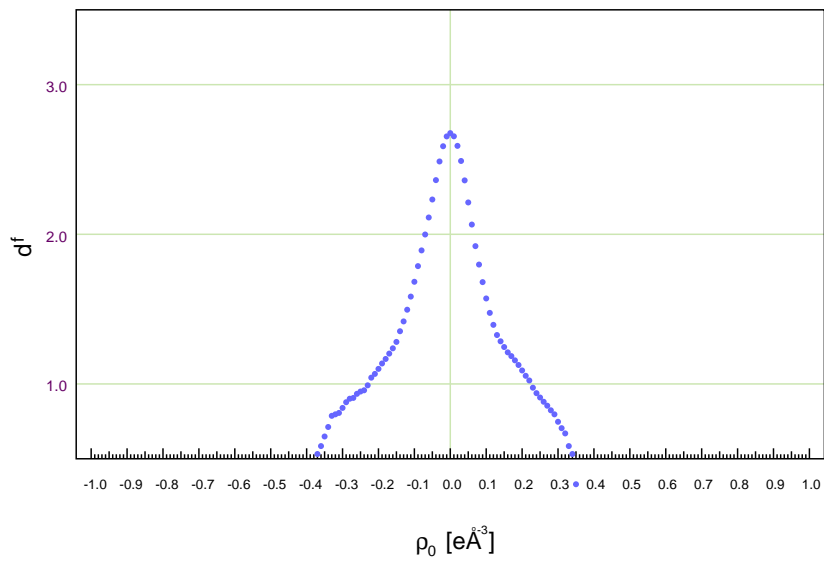
## Residual density analysis of sperical refinement



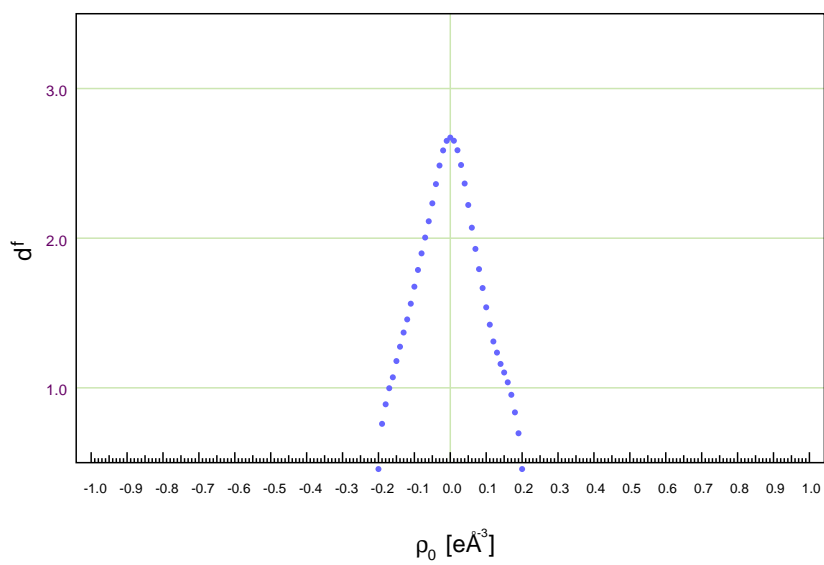
## Residual density analysis of IR (invariom refinement)



## Residual density analysis of EMR (experimental multi-pole refinement)



## Residual density analysis of MMR (mixed model refinement)



## Local atomic coordinate systems and chemical constraints used in the multipole MMR refinement of roxithromycin

ATOM	ATOM0	AX1	ATOM1	ATOM2	AX2	R/L	TP	TBL	KAP	LMX	SITESYM	CHEMCON
O(14)	DUM1	Z	O(14)	C(1)	Y	R	2	1	1	4	MM2	
O(21)	DUM2	X	O(21)	C(1)	Z	R	2	1	2	4	MM2	
O(22)	C(6)	X	O(22)	H(22)	Y	R	2	1	3	4	M	
O(23)	C(11)	X	O(23)	H(23)	Y	R	2	1	3	4	M	
O(24)	C(12)	X	O(24)	H(24)	Y	R	2	1	3	4	M	
O(25)	C(68)	X	O(25)	N(1)	Y	R	2	1	4	4	M	
O(26)	DUM3	Z	O(26)	C(68)	Y	R	2	1	1	4	MM2	
O(27)	DUM4	Z	O(27)	C(70)	Y	R	2	1	1	4	MM2	
O(5)	DUM5	Z	O(5)	C(5)	Y	R	2	1	1	4	MM2	O(14)
O(58)	DUM6	Z	O(58)	C(50)	Y	R	2	1	1	4	MM2	O(14)
O(59)	C(51)	X	O(59)	H(59)	Y	R	2	1	3	4	M	
O(3)	DUM7	Z	O(3)	C(3)	Y	R	2	1	1	4	MM2	O(14)
O(38)	DUM8	Z	O(38)	C(30)	Y	R	2	1	1	4	MM2	O(14)
O(39)	C(33)	X	O(39)	H(39)	Y	R	2	1	3	4	M	
O(40)	DUM9	Z	O(40)	C(32)	Y	R	2	1	1	4	MM2	O(14)
O(80)	DUM10	Z	O(80)	H(80A)	Y	R	2	1	5	4	MM2	
N(2)	DUM11	Z	N(2)	C(52)	Y	R	2	2	6	4	3	
N(1)	C(9)	X	N(1)	O(25)	Y	R	2	2	7	4	M	
C(1)	O(21)	X	C(1)	O(14)	Y	R	2	3	8	4	M	
C(2)	H(2)	Z	C(2)	C(1)	X	R	2	3	9	4	3M	
C(3)	O(3)	X	C(3)	C(2)	Y	R	2	3	10	4	M	
C(4)	H(4)	Z	C(4)	C(3)	X	R	2	3	9	4	3M	C(2)
C(5)	O(5)	X	C(5)	C(4)	Y	R	2	3	10	4	M	C(3)
C(6)	O(22)	Z	C(6)	C(5)	X	R	2	3	11	4	3M	
C(7)	DUM12	Z	C(7)	C(6)	Y	R	2	3	12	4	MM2	
C(8)	H(8)	Z	C(8)	C(7)	X	R	2	3	9	4	3M	C(2)
C(9)	N(1)	Z	C(9)	C(8)	Y	R	2	3	13	4	2	
C(10)	H(10)	Z	C(10)	C(9)	X	R	2	3	9	4	3M	C(2)
C(11)	O(23)	X	C(11)	C(10)	Y	R	2	3	10	4	M	C(3)
C(12)	O(24)	Z	C(12)	C(11)	X	R	2	3	11	4	3M	C(6)
C(13)	O(14)	X	C(13)	C(12)	Y	R	2	3	10	4	M	C(3)
C(50)	C(51)	X	C(50)	H(50)	Y	R	2	3	14	4	M	
C(51)	O(59)	X	C(51)	C(50)	Y	R	2	3	10	4	M	C(3)
C(52)	H(52)	X	C(52)	N(2)	Y	R	2	3	15	4	M	
C(53)	DUM13	Z	C(53)	C(52)	Y	R	2	3	12	4	MM2	C(7)
C(54)	O(58)	X	C(54)	C(53)	Y	R	2	3	10	4	M	C(3)
C(55)	C(54)	Z	C(55)	H(55A)	Y	R	2	3	16	4	3	
C(56)	N(2)	Z	C(56)	H(56A)	Y	R	2	3	17	4	3	
C(57)	N(2)	Z	C(57)	H(57A)	Y	R	2	3	17	4	3	C(56)
C(30)	C(31)	X	C(30)	H(30)	Y	R	2	3	14	4	M	C(50)
C(31)	DUM14	Z	C(31)	C(30)	Y	R	2	3	12	4	MM2	C(7)
C(32)	O(40)	Z	C(32)	C(31)	X	R	2	3	11	4	3M	C(6)
C(33)	O(39)	X	C(33)	C(32)	Y	R	2	3	10	4	M	C(3)
C(34)	O(38)	X	C(34)	C(33)	Y	R	2	3	10	4	M	C(3)
C(35)	C(34)	Z	C(35)	H(35A)	Y	R	2	3	16	4	3	C(55)
C(36)	C(32)	Z	C(36)	H(36A)	Y	R	2	3	16	4	3	C(55)
C(37)	O(40)	Z	C(37)	H(37A)	X	R	2	3	18	4	3M	
C(60)	C(2)	Z	C(60)	H(60A)	Y	R	2	3	16	4	3	C(55)

ATOM	ATOM0	AX1	ATOM1	ATOM2	AX2	R/L	TP	TBL	KAP	LMX	SITESYM	CHEMCON
C(61)	C(4)	Z	C(61)	H(61A)	Y	R	2	3	16	4	3	C(55)
C(62)	C(6)	Z	C(62)	H(62A)	Y	R	2	3	16	4	3	C(55)
C(63)	C(8)	Z	C(63)	H(63A)	Y	R	2	3	16	4	3	C(55)
C(64)	C(10)	Z	C(64)	H(64A)	Y	R	2	3	16	4	3	C(55)
C(65)	C(12)	Z	C(65)	H(65A)	Y	R	2	3	16	4	3	C(55)
C(66)	DUM15	Z	C(66)	C(13)	Y	R	2	3	12	4	MM2	C(7)
C(67)	C(66)	Z	C(67)	H(67A)	Y	R	2	3	16	4	3	C(55)
C(68)	DUM16	Z	C(68)	O(25)	Y	R	2	3	19	4	MM2	
C(69)	O(26)	X	C(69)	C(70)	Y	R	2	3	20	4	M	
C(70)	O(27)	X	C(70)	C(69)	Y	R	2	3	20	4	M	
C(71)	O(27)	Z	C(71)	H(71A)	X	R	2	3	18	4	3M	
H(22)	O(22)	Z	H(22)	C(6)	Y	R	2	4	21	2	6	
H(23)	O(23)	Z	H(23)	C(11)	Y	R	2	4	21	2	6	
H(24)	O(24)	Z	H(24)	C(12)	Y	R	2	4	21	2	6	
H(59)	O(59)	Z	H(59)	C(51)	Y	R	2	4	21	2	6	
H(39)	O(39)	Z	H(39)	C(33)	Y	R	2	4	21	2	6	
H(2)	C(2)	Z	H(2)	C(1)	Y	R	2	4	22	2	6	
H(3)	C(3)	Z	H(3)	O(3)	Y	R	2	4	23	2	6	
H(4)	C(4)	Z	H(4)	C(3)	Y	R	2	4	22	2	6	H(2)
H(5)	C(5)	Z	H(5)	O(5)	Y	R	2	4	23	2	6	H(3)
H(7A)	C(7)	Z	H(7A)	C(6)	Y	R	2	4	24	2	6	
H(7B)	C(7)	Z	H(7B)	C(6)	Y	R	2	4	24	2	6	H(7A)
H(8)	C(8)	Z	H(8)	C(7)	Y	R	2	4	22	2	6	H(2)
H(10)	C(10)	Z	H(10)	C(9)	Y	R	2	4	22	2	6	H(2)
H(11)	C(11)	Z	H(11)	O(23)	Y	R	2	4	23	2	6	H(3)
H(13)	C(13)	Z	H(13)	O(14)	Y	R	2	4	23	2	6	H(3)
H(50)	C(50)	Z	H(50)	O(5)	Y	R	2	4	25	2	6	
H(51)	C(51)	Z	H(51)	O(59)	Y	R	2	4	23	2	6	H(3)
H(52)	C(52)	Z	H(52)	N(2)	Y	R	2	4	26	2	6	
H(53A)	C(53)	Z	H(53A)	C(52)	Y	R	2	4	24	2	6	H(7A)
H(53B)	C(53)	Z	H(53B)	C(52)	Y	R	2	4	24	2	6	H(7A)
H(54)	C(54)	Z	H(54)	O(58)	Y	R	2	4	23	2	6	H(3)
H(55A)	C(55)	Z	H(55A)	C(54)	Y	R	2	4	27	2	6	
H(55B)	C(55)	Z	H(55B)	C(54)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(55C)	C(55)	Z	H(55C)	C(54)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(56A)	C(56)	Z	H(56A)	N(2)	Y	R	2	4	28	2	6	
H(56B)	C(56)	Z	H(56B)	N(2)	Y	R	2	4	28	2	6	H(56A)
H(56C)	C(56)	Z	H(56C)	N(2)	Y	R	2	4	28	2	6	H(56A)
H(57A)	C(57)	Z	H(57A)	N(2)	Y	R	2	4	28	2	6	H(56A)
H(57B)	C(57)	Z	H(57B)	N(2)	Y	R	2	4	28	2	6	H(56A)
H(57C)	C(57)	Z	H(57C)	N(2)	Y	R	2	4	28	2	6	H(56A)
H(30)	C(30)	Z	H(30)	O(3)	Y	R	2	4	25	2	6	H(50)
H(31A)	C(31)	Z	H(31A)	C(30)	Y	R	2	4	24	2	6	H(7A)
H(31B)	C(31)	Z	H(31B)	C(30)	Y	R	2	4	24	2	6	H(7A)
H(33)	C(33)	Z	H(33)	O(39)	Y	R	2	4	23	2	6	H(3)
H(34)	C(34)	Z	H(34)	O(38)	Y	R	2	4	23	2	6	H(3)
H(35A)	C(35)	Z	H(35A)	C(34)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(35B)	C(35)	Z	H(35B)	C(34)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(35C)	C(35)	Z	H(35C)	C(34)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(36A)	C(36)	Z	H(36A)	C(32)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(36B)	C(36)	Z	H(36B)	C(32)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)

ATOM	ATOM0	AX1	ATOM1	ATOM2	AX2	R/L	TP	TBL	KAP	LMX	SITESYM	CHEMCON
H(36C)	C(36)	Z	H(36C)	C(32)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(37A)	C(37)	Z	H(37A)	O(40)	Y	R	2	4	29	2	6	
H(37B)	C(37)	Z	H(37B)	O(40)	Y	R	2	4	29	2	6	H(37A)
H(37C)	C(37)	Z	H(37C)	O(40)	Y	R	2	4	29	2	6	H(37A)
H(60A)	C(60)	Z	H(60A)	C(2)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(60B)	C(60)	Z	H(60B)	C(2)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(60C)	C(60)	Z	H(60C)	C(2)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(61A)	C(61)	Z	H(61A)	C(4)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(61B)	C(61)	Z	H(61B)	C(4)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(61C)	C(61)	Z	H(61C)	C(4)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(62A)	C(62)	Z	H(62A)	C(6)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(62B)	C(62)	Z	H(62B)	C(6)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(62C)	C(62)	Z	H(62C)	C(6)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(63A)	C(63)	Z	H(63A)	C(8)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(63B)	C(63)	Z	H(63B)	C(8)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(63C)	C(63)	Z	H(63C)	C(8)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(64A)	C(64)	Z	H(64A)	C(10)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(64B)	C(64)	Z	H(64B)	C(10)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(64C)	C(64)	Z	H(64C)	C(10)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(65A)	C(65)	Z	H(65A)	C(12)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(65B)	C(65)	Z	H(65B)	C(12)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(65C)	C(65)	Z	H(65C)	C(12)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(66A)	C(66)	Z	H(66A)	C(13)	Y	R	2	4	24	2	6	H(7A)
H(66B)	C(66)	Z	H(66B)	C(13)	Y	R	2	4	24	2	6	H(7A)
H(67A)	C(67)	Z	H(67A)	C(66)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(67B)	C(67)	Z	H(67B)	C(66)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(67C)	C(67)	Z	H(67C)	C(66)	Y	R	2	4	27	2	6	H(55A)
H(68A)	C(68)	Z	H(68A)	O(25)	Y	R	2	4	30	2	6	
H(68B)	C(68)	Z	H(68B)	O(25)	Y	R	2	4	30	2	6	H(68A)
H(69A)	C(69)	Z	H(69A)	O(26)	Y	R	2	4	31	2	6	
H(69B)	C(69)	Z	H(69B)	O(26)	Y	R	2	4	31	2	6	
H(70A)	C(70)	Z	H(70A)	O(27)	Y	R	2	4	31	2	6	
H(70B)	C(70)	Z	H(70B)	O(27)	Y	R	2	4	31	2	6	
H(71A)	C(71)	Z	H(71A)	O(27)	Y	R	2	4	29	2	6	
H(71B)	C(71)	Z	H(71B)	O(27)	Y	R	2	4	29	2	6	
H(71C)	C(71)	Z	H(71C)	O(27)	Y	R	2	4	29	2	6	
H(80A)	O(80)	Z	H(80A)	H(80B)	Y	R	2	4	32	2	6	
H(80B)	O(80)	Z	H(80B)	H(80A)	Y	R	2	4	32	2	6	

Hirshfeld test results for the MMR (mixed multipole refinement) of roxithromycin

Atom 1	Atom 2	Bond distance	DMSDA
O(14)	C(1)	1.3395	-8
O(14)	C(13)	1.4574	1
O(21)	C(1)	1.2110	-2
O(22)	C(6)	1.4264	-2
O(23)	C(11)	1.4297	-1
O(24)	C(12)	1.4294	2
O(25)	N(1)	1.4292	-3
O(25)	C(68)	1.4084	0
O(26)	C(68)	1.4036	-1
O(26)	C(69)	1.4192	18
O(27)	C(70)	1.4093	19
O(27)	C(71)	1.4197	9
O(5)	C(5)	1.4375	3
O(5)	C(50)	1.3923	4
O(58)	C(50)	1.4183	1
O(58)	C(54)	1.4357	7
O(59)	C(51)	1.4185	2
O(3)	C(3)	1.4302	4
O(3)	C(30)	1.4190	2
O(38)	C(30)	1.4100	2
O(38)	C(34)	1.4367	0
O(39)	C(33)	1.4189	0
O(40)	C(32)	1.4300	1
O(40)	C(37)	1.4155	15
N(2)	C(52)	1.4834	-1
N(2)	C(56)	1.4677	0
N(2)	C(57)	1.4653	1
N(1)	C(9)	1.2785	1
C(1)	C(2)	1.5171	1
C(2)	C(3)	1.5502	-4
C(2)	C(60)	1.5354	1
C(3)	C(4)	1.5431	-2

Atom 1	Atom 2	Bond distance	DMSDA
C(4)	C(5)	1.5574	0
C(4)	C(61)	1.5282	-2
C(5)	C(6)	1.5572	1
C(6)	C(7)	1.5349	1
C(6)	C(62)	1.5279	3
C(7)	C(8)	1.5386	4
C(8)	C(9)	1.5145	-2
C(8)	C(63)	1.5403	5
C(9)	C(10)	1.5277	0
C(10)	C(11)	1.5449	-5
C(10)	C(64)	1.5355	-1
C(11)	C(12)	1.5541	0
C(12)	C(13)	1.5534	3
C(12)	C(65)	1.5208	2
C(13)	C(66)	1.5213	-1
C(50)	C(51)	1.5334	1
C(51)	C(52)	1.5371	0
C(52)	C(53)	1.5314	1
C(53)	C(54)	1.5212	0
C(54)	C(55)	1.5150	-2
C(30)	C(31)	1.5231	0
C(31)	C(32)	1.5369	-1
C(32)	C(33)	1.5364	5
C(32)	C(36)	1.5270	3
C(33)	C(34)	1.5295	1
C(34)	C(35)	1.5154	3
C(66)	C(67)	1.5256	-2
C(69)	C(70)	1.5079	10



Multipole population coefficients for the MMR (mixed model refinement) of roxithromycin

atom	$P_v$	$P_{00}$	$P_{11}$	$P_{1-1}$	$P_{10}$
O(14)	6.14( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.06( 0)
O(21)	6.04( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 1)
O(22)	6.03( 2)	0.00( 0)	-0.03( 1)	-0.05( 1)	0.00( 0)
O(23)	5.96( 2)	0.00( 0)	0.10( 1)	0.09( 1)	0.00( 0)
O(24)	5.95( 2)	0.00( 0)	-0.04( 1)	-0.06( 1)	0.00( 0)
O(25)	6.11( 1)	0.00( 0)	-0.03( 1)	-0.06( 1)	0.00( 0)
O(26)	6.10( 1)	0.00( 0)	0.00( 1)	0.00( 1)	-0.11( 0)
O(27)	6.07( 1)	0.00( 0)	0.00( 1)	0.00( 1)	-0.02( 0)
O(5)	6.14( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.06( 0)
O(58)	6.14( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.06( 0)
O(59)	6.07( 2)	0.00( 0)	0.01( 1)	-0.07( 1)	0.00( 0)
O(3)	6.14( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.06( 0)
O(38)	6.14( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.06( 0)
O(39)	6.02( 2)	0.00( 0)	0.02( 1)	-0.05( 1)	0.00( 0)
O(40)	6.14( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.06( 0)
O(80)	4.88( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.18( 1)
N(2)	5.15( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.07( 1)
N(1)	5.10( 2)	0.00( 0)	0.04( 1)	-0.09( 1)	0.00( 0)
C(1)	3.90( 2)	0.00( 0)	0.07( 1)	-0.02( 1)	0.00( 0)
C(2)	3.89( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 1)
C(3)	3.94( 1)	0.00( 0)	-0.05( 0)	0.01( 0)	0.00( 0)
C(4)	3.89( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 0)
C(5)	3.94( 0)	0.00( 0)	-0.05( 0)	0.01( 0)	0.00( 0)
C(6)	4.03( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.03( 1)
C(7)	3.86( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.03( 1)
C(8)	3.89( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 0)
C(9)	3.98( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 1)
C(10)	3.89( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 0)
C(11)	3.94( 0)	0.00( 0)	-0.05( 0)	0.01( 0)	0.00( 0)
C(12)	4.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.03( 0)
C(13)	3.94( 0)	0.00( 0)	-0.05( 0)	0.01( 0)	0.00( 0)
C(50)	3.98( 1)	0.00( 0)	0.02( 1)	0.08( 1)	0.00( 0)
C(51)	3.94( 0)	0.00( 0)	-0.05( 0)	0.01( 0)	0.00( 0)
C(52)	4.03( 2)	0.00( 0)	-0.01( 1)	-0.02( 1)	0.00( 0)
C(53)	3.86( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.03( 0)
C(54)	3.94( 0)	0.00( 0)	-0.05( 0)	0.01( 0)	0.00( 0)
C(55)	3.76( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)
C(56)	3.94( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.03( 1)
C(57)	3.94( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.03( 0)
C(30)	3.98( 0)	0.00( 0)	0.02( 0)	0.08( 0)	0.00( 0)
C(31)	3.86( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.03( 0)
C(32)	4.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.03( 0)
C(33)	3.94( 0)	0.00( 0)	-0.05( 0)	0.01( 0)	0.00( 0)
C(34)	3.94( 0)	0.00( 0)	-0.05( 0)	0.01( 0)	0.00( 0)

atom	$P_v$	$P_{00}$	$P_{11}$	$P_{1-1}$	$P_{10}$
C(35)	3.76( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)
C(36)	3.76( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)
C(37)	3.94( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.05( 0)
C(60)	3.76( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)
C(61)	3.76( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)
C(62)	3.76( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)
C(63)	3.76( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)
C(64)	3.76( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)
C(65)	3.76( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)
C(66)	3.86( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.03( 0)
C(67)	3.76( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)
C(68)	3.93( 3)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 1)
C(69)	3.92( 0)	0.00( 0)	-0.05( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(70)	3.92( 0)	0.00( 0)	-0.05( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(71)	3.94( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.05( 0)
H(22)	0.92( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.18( 1)
H(23)	0.95( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.24( 1)
H(24)	0.99( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.22( 1)
H(59)	1.06( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.24( 1)
H(39)	1.10( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.18( 1)
H(2)	1.06( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.18( 1)
H(3)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.15( 0)
H(4)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.18( 0)
H(5)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.15( 0)
H(7A)	1.06( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(7B)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(8)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.18( 0)
H(10)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.18( 0)
H(11)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.15( 0)
H(13)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.15( 0)
H(50)	0.92( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.14( 1)
H(51)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.15( 0)
H(52)	1.08( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.11( 1)
H(53A)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(53B)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(54)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.15( 0)
H(55A)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(55B)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(55C)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(56A)	1.04( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.12( 0)
H(56B)	1.04( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.12( 0)
H(56C)	1.04( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.12( 0)
H(57A)	1.04( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.12( 0)
H(57B)	1.04( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.12( 0)
H(57C)	1.04( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.12( 0)
H(30)	0.92( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.14( 0)
H(31A)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(31B)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(33)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.15( 0)
H(34)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.15( 0)
H(35A)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)

atom	$P_v$	$P_{00}$	$P_{11}$	$P_{1-1}$	$P_{10}$
H(35B)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(35C)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(36A)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(36B)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(36C)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(37A)	0.97( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.14( 0)
H(37B)	0.97( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.14( 0)
H(37C)	0.97( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.14( 0)
H(60A)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(60B)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(60C)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(61A)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(61B)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(61C)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(62A)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(62B)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(62C)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(63A)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(63B)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(63C)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(64A)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(64B)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(64C)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(65A)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(65B)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(65C)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(66A)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(66B)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(67A)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(67B)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(67C)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 0)
H(68A)	1.06( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.19( 1)
H(68B)	1.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.19( 0)
H(69A)	1.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.14( 0)
H(69B)	1.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.14( 0)
H(70A)	1.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.14( 0)
H(70B)	1.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.14( 0)
H(71A)	0.97( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.14( 0)
H(71B)	0.97( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.14( 0)
H(71C)	0.97( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.14( 0)
H(80A)	1.09( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.23( 1)
H(80B)	1.08( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.27( 1)

atom	$P_{20}$	$P_{21}$	$P_{2-1}$	$P_{22}$	$P_{2-2}$
O(14)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.09( 0)	0.00( 0)
O(21)	-0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.10( 1)	0.00( 0)
O(22)	0.06( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.06( 1)	0.03( 1)
O(23)	0.07( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.05( 1)	0.09( 1)
O(24)	0.07( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 1)	0.03( 1)
O(25)	0.09( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 1)	0.03( 1)
O(26)	0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.03( 1)	0.00( 1)
O(27)	0.04( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.14( 2)	0.00( 2)
O(5)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.09( 0)	0.00( 0)
O(58)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.09( 0)	0.00( 0)
O(59)	0.12( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 1)	0.04( 1)
O(3)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.09( 0)	0.00( 0)
O(38)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.09( 0)	0.00( 0)
O(39)	0.07( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 1)	0.03( 1)
O(40)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.09( 0)	0.00( 0)
O(80)	0.00( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.16( 1)	0.00( 0)
N(2)	0.13( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
N(1)	-0.10( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.11( 1)	0.08( 1)
C(1)	-0.28( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.06( 1)	0.01( 1)
C(2)	-0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(3)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.06( 0)	-0.01( 0)
C(4)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(5)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.06( 0)	-0.01( 0)
C(6)	-0.06( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(7)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 0)	0.00( 0)
C(8)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(9)	0.08( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.13( 1)	0.02( 1)
C(10)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(11)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.06( 0)	-0.01( 0)
C(12)	-0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(13)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.06( 0)	-0.01( 0)
C(50)	-0.04( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 1)	-0.03( 1)
C(51)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.06( 0)	-0.01( 0)
C(52)	0.05( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.03( 1)	0.01( 1)
C(53)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 0)	0.00( 0)
C(54)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.06( 0)	-0.01( 0)

atom	$P_{20}$	$P_{21}$	$P_{2-1}$	$P_{22}$	$P_{2-2}$
C(55)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(56)	-0.02( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(57)	-0.02( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(30)	-0.04( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 0)	-0.03( 0)
C(31)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 0)	0.00( 0)
C(32)	-0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(33)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.06( 0)	-0.01( 0)
C(34)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.06( 0)	-0.01( 0)
C(35)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(36)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(37)	-0.08( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(60)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(61)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(62)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(63)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(64)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(65)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(66)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 0)	0.00( 0)
C(67)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(68)	0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 1)	0.00( 0)
C(69)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.07( 0)	-0.01( 0)
C(70)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.07( 0)	-0.01( 0)
C(71)	-0.08( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(22)	0.08( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(23)	0.13( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(24)	0.10( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(59)	0.05( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(39)	0.15( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(2)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(3)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(4)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(5)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(7A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(7B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(8)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(10)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)

atom	$P_{20}$	$P_{21}$	$P_{2-1}$	$P_{22}$	$P_{2-2}$
H(11)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(13)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(50)	0.05( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(51)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(52)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(53A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(53B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(54)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(55A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(55B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(55C)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(56A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(56B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(56C)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(57A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(57B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(57C)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(30)	0.05( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(31A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(31B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(33)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(34)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(35A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(35B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(35C)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(36A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(36B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(36C)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(37A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(37B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(37C)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(60A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(60B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(60C)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(61A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(61B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)

atom	$P_{20}$	$P_{21}$	$P_{2-1}$	$P_{22}$	$P_{2-2}$
H(61C)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(62A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(62B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(62C)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(63A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(63B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(63C)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(64A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(64B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(64C)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(65A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(65B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(65C)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(66A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(66B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(67A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(67B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(67C)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(68A)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(68B)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(69A)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(69B)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(70A)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(70B)	0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(71A)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(71B)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(71C)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(80A)	0.20( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
H(80B)	0.14( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)

atom	$P_{30}$	$P_{31}$	$P_{3-1}$	$P_{32}$	$P_{3-2}$	$P_{33}$	$P_{3-3}$
O(14)	-0.05( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
O(21)	0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.02( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
O(22)	0.00( 0)	-0.01( 1)	-0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.07( 1)	0.04( 1)
O(23)	0.00( 0)	-0.05( 1)	-0.04( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 1)	-0.03( 1)
O(24)	0.00( 0)	0.00( 1)	-0.02( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.07( 1)	-0.02( 1)
O(25)	0.00( 0)	0.03( 1)	-0.06( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.09( 1)	-0.02( 1)
O(26)	-0.06( 0)	0.00( 1)	0.00( 1)	-0.04( 0)	0.00( 0)	0.00( 1)	0.00( 1)
O(27)	-0.09( 0)	0.00( 1)	0.00( 1)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 1)	0.00( 1)
O(5)	-0.05( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
O(58)	-0.05( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
O(59)	0.00( 0)	0.00( 1)	0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.05( 1)	-0.01( 1)
O(3)	-0.05( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
O(38)	-0.05( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
O(39)	0.00( 0)	0.00( 1)	-0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.05( 1)	-0.01( 1)
O(40)	-0.05( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.07( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
O(80)	0.04( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
N(2)	-0.10( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 1)	-0.14( 1)
N(1)	0.00( 0)	-0.02( 1)	-0.04( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.11( 1)	0.01( 1)
C(1)	0.00( 0)	0.01( 1)	-0.02( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.27( 1)	0.01( 1)
C(2)	0.22( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.19( 0)	0.00( 0)
C(3)	0.00( 0)	-0.14( 0)	-0.19( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.19( 0)	-0.05( 0)
C(4)	0.22( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.19( 0)	0.00( 0)
C(5)	0.00( 0)	-0.14( 0)	-0.19( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.19( 0)	-0.05( 0)
C(6)	0.28( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.18( 1)	0.00( 0)
C(7)	0.00( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.27( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(8)	0.22( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.19( 0)	0.00( 0)
C(9)	0.08( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.19( 1)	0.00( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(10)	0.22( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.19( 0)	0.00( 0)
C(11)	0.00( 0)	-0.14( 0)	-0.19( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.19( 0)	-0.05( 0)
C(12)	0.28( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.18( 0)	0.00( 0)
C(13)	0.00( 0)	-0.14( 0)	-0.19( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.19( 0)	-0.05( 0)
C(50)	0.00( 0)	-0.15( 1)	-0.24( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.18( 1)	-0.09( 1)
C(51)	0.00( 0)	-0.14( 0)	-0.19( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.19( 0)	-0.05( 0)
C(52)	0.00( 0)	-0.13( 1)	-0.20( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.18( 1)	-0.10( 1)
C(53)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.27( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(54)	0.00( 0)	-0.14( 0)	-0.19( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.19( 0)	-0.05( 0)
C(55)	0.22( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	-0.14( 0)
C(56)	0.25( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.03( 1)	-0.19( 1)
C(57)	0.25( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.03( 0)	-0.19( 0)
C(30)	0.00( 0)	-0.15( 0)	-0.24( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.18( 0)	-0.09( 0)
C(31)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.27( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(32)	0.28( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.18( 0)	0.00( 0)
C(33)	0.00( 0)	-0.14( 0)	-0.19( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.19( 0)	-0.05( 0)
C(34)	0.00( 0)	-0.14( 0)	-0.19( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.19( 0)	-0.05( 0)
C(35)	0.22( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	-0.14( 0)
C(36)	0.22( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	-0.14( 0)
C(37)	0.28( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.18( 0)	0.00( 0)
C(60)	0.22( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	-0.14( 0)
C(61)	0.22( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	-0.14( 0)
C(62)	0.22( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	-0.14( 0)
C(63)	0.22( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	-0.14( 0)
C(64)	0.22( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	-0.14( 0)
C(65)	0.22( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	-0.14( 0)
C(66)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.27( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(67)	0.22( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	-0.14( 0)
C(68)	-0.03( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.28( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(69)	0.00( 0)	-0.16( 0)	-0.18( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.19( 0)	-0.06( 0)
C(70)	0.00( 0)	-0.16( 0)	-0.18( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.19( 0)	-0.06( 0)
C(71)	0.28( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.18( 0)	0.00( 0)



atom	$P_{40}$	$P_{41}$	$P_{4-1}$	$P_{42}$	$P_{4-2}$	$P_{43}$	$P_{4-3}$	$P_{44}$	$P_{4-4}$
O(14)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)	0.00( 0)
O(21)	0.06( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.05( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 1)	0.00( 0)
O(22)	-0.03( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 1)	0.00( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.04( 1)	0.01( 1)
O(23)	-0.02( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 1)	-0.04( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.04( 1)	-0.03( 1)
O(24)	0.03( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 1)	-0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.03( 1)	0.05( 1)
O(25)	-0.02( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 1)	-0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 1)	-0.02( 1)
O(26)	0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 1)	0.00( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 1)	0.00( 1)
O(27)	0.04( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.02( 1)	0.00( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 1)	0.00( 2)
O(5)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)	0.00( 0)
O(58)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)	0.00( 0)
O(59)	0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 1)	0.03( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 1)	-0.02( 1)
O(3)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)	0.00( 0)
O(38)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)	0.00( 0)
O(39)	-0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 1)	0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 1)	-0.03( 1)
O(40)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)	0.00( 0)
O(80)	0.03( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 1)	0.00( 0)
N(2)	-0.04( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 1)	-0.04( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)
N(1)	-0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 1)	0.00( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.03( 1)	0.02( 1)
C(1)	-0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 1)	-0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.08( 1)	0.01( 1)
C(2)	0.06( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(3)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.02( 0)
C(4)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(5)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.02( 0)
C(6)	0.03( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.05( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(7)	-0.02( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.03( 1)	0.00( 0)
C(8)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(9)	-0.05( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.03( 1)	-0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 1)	0.00( 1)
C(10)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(11)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.02( 0)
C(12)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.05( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(13)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.02( 0)
C(50)	0.06( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.02( 1)	0.03( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.05( 1)	0.03( 1)
C(51)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.02( 0)
C(52)	-0.02( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 1)	0.07( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.03( 1)	-0.02( 1)
C(53)	-0.02( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.03( 0)	0.00( 0)
C(54)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.02( 0)
C(55)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)	0.04( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(56)	0.00( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.03( 1)	0.08( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(57)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.03( 0)	0.08( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(30)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.02( 0)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.05( 0)	0.03( 0)
C(31)	-0.02( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.03( 0)	0.00( 0)
C(32)	0.03( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.05( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(33)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.02( 0)
C(34)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 0)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.02( 0)
C(35)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)	0.04( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(36)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)	0.04( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(37)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.08( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(60)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)	0.04( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(61)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)	0.04( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(62)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)	0.04( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(63)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)	0.04( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(64)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)	0.04( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(65)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)	0.04( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(66)	-0.02( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.03( 0)	0.00( 0)
C(67)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 0)	0.04( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(68)	-0.08( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.04( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.01( 1)	0.00( 0)
C(69)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.04( 0)	0.08( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.05( 0)	0.01( 0)
C(70)	0.01( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.04( 0)	0.08( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.05( 0)	0.01( 0)
C(71)	0.06( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.08( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)

Bond critical points from MMR (mixed multipole re-  
finement of roxithromycin

Bond	$\rho(\mathbf{r}_{bcp})$	$\nabla^2\rho(\mathbf{r}_{bcp})$	$\epsilon$
O(14)–C(1)	2.269	-23.450	0.14
O(14)–C(13)	1.674	-7.024	0.04
O(21)–C(1)	2.925	-31.246	0.06
O(22)–C(6)	1.768	-7.783	0.01
O(22)–H(22)	2.229	-38.702	0.04
O(23)–C(11)	1.714	-6.502	0.06
O(23)–H(23)	2.336	-44.191	0.01
O(24)–C(12)	1.847	-12.257	0.04
O(24)–H(24)	2.484	-49.722	0.03
O(25)–N(1)	1.890	8.779	0.04
O(25)–C(68)	1.877	-9.989	0.03
O(26)–C(68)	1.895	-11.158	0.10
O(26)–C(69)	1.816	-12.388	0.03
O(27)–C(70)	1.794	-10.662	0.03
O(27)–C(71)	1.767	-10.260	0.02
O(5)–C(5)	1.731	-8.687	0.04
O(5)–C(50)	1.931	-15.134	0.02
O(58)–C(50)	1.857	-11.998	0.06
O(58)–C(54)	1.741	-8.746	0.03
O(59)–C(51)	1.783	-9.894	0.02
O(59)–H(59)	2.396	-31.448	0.00
O(3)–C(3)	1.749	-9.326	0.04
O(3)–C(30)	1.859	-12.430	0.03
O(38)–C(30)	1.880	-13.145	0.05
O(38)–C(34)	1.734	-8.606	0.04
O(39)–C(33)	1.781	-9.920	0.06
O(39)–H(39)	2.436	-35.890	0.01
O(40)–C(32)	1.828	-11.199	0.03
O(40)–C(37)	1.850	-14.835	0.03
O(80)–H(80A)	2.462	-35.193	0.02
O(80)–H(80B)	2.492	-33.180	0.03
N(2)–C(52)	1.766	-9.071	0.08
N(2)–C(56)	1.798	-9.457	0.07
N(2)–C(57)	1.812	-9.983	0.06

Bond	$\rho(\mathbf{r}_{bcp})$	$\nabla^2\rho(\mathbf{r}_{bcp})$	$\epsilon$
N(1)–C(9)	2.453	-17.044	0.48
C(1)–C(2)	1.724	-12.078	0.13
C(2)–C(3)	1.621	-10.120	0.03
C(2)–C(60)	1.594	-8.822	0.01
C(2)–H(2)	1.911	-21.474	0.00
C(3)–C(4)	1.628	-10.521	0.02
C(3)–H(3)	1.909	-21.066	0.02
C(4)–C(5)	1.603	-9.896	0.04
C(4)–C(61)	1.610	-9.285	0.00
C(4)–H(4)	1.912	-21.409	0.00
C(5)–C(6)	1.645	-11.095	0.08
C(5)–H(5)	1.910	-21.075	0.02
C(6)–C(7)	1.650	-10.576	0.05
C(6)–C(62)	1.670	-10.687	0.06
C(7)–C(8)	1.587	-9.131	0.01
C(7)–H(7A)	1.851	-18.440	0.02
C(7)–H(7B)	1.859	-18.585	0.02
C(8)–C(9)	1.649	-9.447	0.06
C(8)–C(63)	1.586	-8.699	0.01
C(8)–H(8)	1.909	-21.471	0.00
C(9)–C(10)	1.613	-8.692	0.05
C(10)–C(11)	1.634	-10.456	0.04
C(10)–C(64)	1.594	-8.956	0.00
C(10)–H(10)	1.912	-21.438	0.00
C(11)–C(12)	1.647	-11.066	0.04
C(11)–H(11)	1.912	-21.100	0.03
C(12)–C(13)	1.662	-11.146	0.08
C(12)–C(65)	1.686	-10.907	0.06
C(13)–C(66)	1.685	-11.422	0.03
C(13)–H(13)	1.911	-21.109	0.03
C(50)–C(51)	1.740	-13.319	0.02
C(50)–H(50)	1.946	-22.605	0.04
C(51)–C(52)	1.724	-12.608	0.04
C(51)–H(51)	1.905	-20.815	0.03
C(52)–C(53)	1.694	-11.441	0.01
C(52)–H(52)	1.829	-18.817	0.07

Bond	$\rho(\mathbf{r}_{bcp})$	$\nabla^2\rho(\mathbf{r}_{bcp})$	$\epsilon$
C(53)–C(54)	1.707	-11.493	0.04
C(53)–H(53A)	1.856	-18.559	0.02
C(53)–H(53B)	1.859	-18.587	0.01
C(54)–C(55)	1.703	-11.506	0.03
C(54)–H(54)	1.902	-20.761	0.02
C(55)–H(55A)	1.833	-18.262	0.02
C(55)–H(55B)	1.827	-18.131	0.01
C(55)–H(55C)	1.827	-18.152	0.03
C(56)–H(56A)	1.874	-20.163	0.01
C(56)–H(56B)	1.876	-20.371	0.01
C(56)–H(56C)	1.881	-20.484	0.02
C(57)–H(57A)	1.883	-20.297	0.02
C(57)–H(57B)	1.851	-19.394	0.02
C(57)–H(57C)	1.879	-20.517	0.02
C(30)–C(31)	1.701	-12.349	0.01
C(30)–H(30)	1.932	-22.084	0.04
C(31)–C(32)	1.651	-10.537	0.07
C(31)–H(31A)	1.856	-18.544	0.02
C(31)–H(31B)	1.858	-18.607	0.01
C(32)–C(33)	1.712	-12.004	0.04
C(32)–C(36)	1.671	-10.613	0.06
C(33)–C(34)	1.735	-12.817	0.06
C(33)–H(33)	1.910	-20.969	0.03
C(34)–C(35)	1.702	-11.403	0.02
C(34)–H(34)	1.911	-21.073	0.02
C(35)–H(35A)	1.830	-18.222	0.03
C(35)–H(35B)	1.827	-18.194	0.03
C(35)–H(35C)	1.819	-17.700	0.00
C(36)–H(36A)	1.830	-18.249	0.02
C(36)–H(36B)	1.832	-18.195	0.02
C(36)–H(36C)	1.821	-18.106	0.01
C(37)–H(37A)	1.886	-21.169	0.05
C(37)–H(37B)	1.871	-20.851	0.05
C(37)–H(37C)	1.873	-20.957	0.05
C(60)–H(60A)	1.820	-17.897	0.01
C(60)–H(60B)	1.814	-17.908	0.03

Bond	$\rho(\mathbf{r}_{bcp})$	$\nabla^2\rho(\mathbf{r}_{bcp})$	$\epsilon$
C(60)–H(60C)	1.813	-17.591	0.02
C(61)–H(61A)	1.828	-18.139	0.01
C(61)–H(61B)	1.830	-18.225	0.03
C(61)–H(61C)	1.830	-18.208	0.03
C(62)–H(62A)	1.832	-18.243	0.02
C(62)–H(62B)	1.831	-18.218	0.02
C(62)–H(62C)	1.831	-18.311	0.02
C(63)–H(63A)	1.824	-18.122	0.01
C(63)–H(63B)	1.826	-18.202	0.02
C(63)–H(63C)	1.823	-18.107	0.01
C(64)–H(64A)	1.828	-18.159	0.01
C(64)–H(64B)	1.829	-18.278	0.02
C(64)–H(64C)	1.828	-18.302	0.02
C(65)–H(65A)	1.824	-18.098	0.01
C(65)–H(65B)	1.819	-17.848	0.02
C(65)–H(65C)	1.833	-18.300	0.02
C(66)–C(67)	1.627	-9.385	0.01
C(66)–H(66A)	1.849	-18.420	0.03
C(66)–H(66B)	1.859	-18.617	0.01
C(67)–H(67A)	1.830	-18.217	0.03
C(67)–H(67B)	1.830	-18.280	0.02
C(67)–H(67C)	1.827	-18.245	0.02
C(68)–H(68A)	1.969	-22.515	0.02
C(68)–H(68B)	1.950	-21.643	0.04
C(69)–C(70)	1.822	-14.369	0.02
C(69)–H(69A)	1.885	-21.061	0.05
C(69)–H(69B)	1.889	-21.369	0.05
C(70)–H(70A)	1.887	-21.218	0.05
C(70)–H(70B)	1.896	-21.421	0.04
C(71)–H(71A)	1.873	-21.034	0.05
C(71)–H(71B)	1.887	-21.193	0.05
C(71)–H(71C)	1.847	-20.035	0.06

Atomic charges and volumes for all atoms of the four different refinements of roxithromycin

atom	charges Q			$V_{tot}$		
	IR	EMR	MMR	IR	EMR	MMR
O(14)	-0.913	-0.885	-0.899	12.8	12.9	12.9
O(21)	-1.042	-0.914	-0.919	17.1	17.2	17.3
O(22)	-0.914	-0.891	-0.888	13.9	14.4	14.5
O(23)	-0.899	-0.872	-0.885	14.4	14.9	15.0
O(24)	-0.910	-0.856	-0.856	15.1	15.4	15.4
O(25)	-0.676	-0.585	-0.592	12.9	12.9	13.0
O(26)	-0.886	-0.814	-0.876	12.7	12.7	13.0
O(27)	-0.846	-0.761	-0.761	14.1	13.8	14.2
O(5)	-0.880	-0.843	-0.850	11.5	11.6	11.6
O(58)	-0.851	-0.812	-0.820	13.1	13.3	13.2
O(59)	-0.895	-0.960	-0.982	17.4	18.7	18.7
O(3)	-0.856	-0.822	-0.829	12.5	12.4	12.4
O(38)	-0.854	-0.821	-0.829	14.1	14.6	14.5
O(39)	-0.918	-0.889	-0.891	15.6	15.2	15.2
O(40)	-0.843	-0.827	-0.851	12.8	12.7	12.8
O(80)	-1.019	-0.958	-0.889	25.4	25.7	25.1
N(2)	-0.799	-0.844	-0.867	9.7	9.5	9.6
N(1)	-0.483	-0.421	-0.423	14.6	14.6	14.6
C(1)	1.274	1.379	1.401	5.3	5.0	5.0
C(2)	-0.024	0.067	0.064	7.3	7.0	7.0
C(3)	0.293	0.330	0.336	6.2	6.1	6.1
C(4)	-0.035	0.053	0.053	6.8	6.7	6.7
C(5)	0.275	0.312	0.319	6.3	6.2	6.2
C(6)	0.275	0.347	0.349	5.6	5.5	5.5
C(7)	-0.073	-0.051	-0.033	7.7	7.8	7.8
C(8)	-0.024	0.073	0.073	7.5	7.3	7.2
C(9)	0.425	0.404	0.424	7.2	7.3	7.3
C(10)	-0.015	0.081	0.085	6.8	6.7	6.7
C(11)	0.285	0.318	0.333	6.2	6.1	6.1
C(12)	0.263	0.343	0.345	5.7	5.6	5.6
C(13)	0.273	0.311	0.318	6.2	6.0	6.0
C(50)	0.670	0.769	0.779	5.3	5.1	5.1
C(51)	0.269	0.299	0.310	6.4	6.3	6.3
C(52)	0.182	0.137	0.137	6.5	6.4	6.4

atom	charges Q			$V_{tot}$		
	IR	EMR	MMR	IR	EMR	MMR
C(53)	-0.058	-0.040	-0.022	8.3	8.5	8.4
C(54)	0.292	0.332	0.338	7.0	6.9	6.9
C(55)	-0.077	-0.059	-0.059	11.8	11.8	11.8
C(56)	0.185	0.167	0.166	9.2	9.5	9.4
C(57)	0.177	0.155	0.152	9.4	9.5	9.5
C(30)	0.642	0.743	0.751	5.9	5.8	5.8
C(31)	-0.067	-0.054	-0.034	8.4	8.6	8.5
C(32)	0.265	0.344	0.345	5.7	5.6	5.6
C(33)	0.276	0.318	0.329	6.2	6.1	6.1
C(34)	0.275	0.305	0.312	6.6	6.6	6.5
C(35)	-0.066	-0.056	-0.055	10.9	11.3	11.3
C(36)	-0.067	-0.047	-0.047	9.4	9.7	9.7
C(37)	0.261	0.114	0.281	10.3	11.7	10.6
C(60)	-0.075	-0.063	-0.064	11.3	12.1	12.1
C(61)	-0.067	-0.053	-0.054	9.7	10.0	9.9
C(62)	-0.066	-0.051	-0.053	10.0	10.4	10.3
C(63)	-0.061	-0.054	-0.055	9.9	10.2	10.2
C(64)	-0.063	-0.043	-0.043	11.7	12.0	12.0
C(65)	-0.066	-0.054	-0.054	10.4	11.0	10.9
C(66)	-0.051	-0.029	-0.012	8.8	8.8	8.8
C(67)	-0.060	-0.037	-0.037	11.4	11.6	11.6
C(68)	0.697	0.765	0.806	7.0	6.7	6.6
C(69)	0.280	0.211	0.293	8.6	9.5	8.8
C(70)	0.310	0.227	0.311	8.5	10.1	8.7
C(71)	0.250	0.007	0.259	11.8	15.5	12.6
H(23)	0.554	0.605	0.644	2.4	1.7	1.6
H(24)	0.545	0.551	0.558	2.5	2.3	2.4
H(59)	0.554	0.501	0.508	2.3	2.5	2.5
H(39)	0.547	0.480	0.466	1.8	1.9	1.9
H(2)	0.041	0.018	0.019	7.6	7.3	7.3
H(3)	0.050	0.009	0.005	6.0	6.2	6.0
H(4)	0.038	0.011	0.013	5.3	5.3	5.3
H(5)	0.047	0.009	0.005	6.0	6.0	6.0
H(7A)	0.047	0.015	0.013	6.7	6.7	6.7
H(7B)	0.053	0.016	0.014	7.0	6.9	6.9
H(8)	0.042	0.016	0.017	6.4	6.3	6.3

atom	charges Q			$V_{tot}$		
	IR	EMR	MMR	IR	EMR	MMR
H(10)	0.039	0.013	0.014	6.1	6.2	6.3
H(11)	0.057	0.012	0.009	5.3	5.4	5.4
H(13)	0.053	0.010	0.007	6.5	6.7	6.6
H(22)	0.550	0.590	0.594	2.3	2.0	2.1
H(50)	0.088	0.071	0.088	4.9	4.8	4.8
H(51)	0.053	0.013	0.009	7.5	7.6	7.6
H(52)	0.018	-0.006	-0.015	8.8	9.1	9.0
H(53A)	0.050	0.018	0.016	7.5	7.3	7.3
H(53B)	0.050	0.013	0.010	7.1	7.2	7.0
H(54)	0.055	0.020	0.017	6.1	5.9	5.9
H(55A)	0.069	0.041	0.041	9.8	9.7	9.7
H(55B)	0.072	0.044	0.044	7.2	7.2	7.2
H(55C)	0.068	0.039	0.038	10.1	9.8	9.8
H(56A)	0.046	0.010	0.006	7.3	7.4	7.4
H(56B)	0.046	0.004	0.001	9.4	9.8	10.0
H(56C)	0.047	0.004	0.001	8.0	8.2	8.4
H(57A)	0.050	0.009	0.006	8.7	9.3	9.3
H(57B)	0.050	0.024	0.020	7.5	7.4	7.4
H(57C)	0.048	0.004	0.001	11.3	11.6	11.6
H(30)	0.089	0.081	0.097	5.9	5.7	5.6
H(31A)	0.049	0.013	0.012	11.2	11.4	11.4
H(31B)	0.052	0.017	0.015	6.1	6.0	6.0
H(33)	0.053	0.011	0.008	6.7	6.8	6.7
H(34)	0.051	0.013	0.010	4.9	4.9	4.9
H(35A)	0.070	0.042	0.041	8.1	7.8	7.9
H(35B)	0.067	0.038	0.037	9.7	9.6	9.6
H(35C)	0.073	0.046	0.046	8.8	8.7	8.7
H(36A)	0.068	0.041	0.040	7.5	7.2	7.2
H(36B)	0.070	0.038	0.037	7.5	7.5	7.6
H(36C)	0.067	0.042	0.041	6.8	6.6	6.7
H(37A)	0.078	0.081	0.078	7.9	7.4	7.7
H(37B)	0.075	0.074	0.075	9.3	8.7	9.1
H(37C)	0.075	0.075	0.075	8.9	8.2	8.6
H(60A)	0.066	0.036	0.035	9.1	9.1	9.1
H(60B)	0.068	0.040	0.039	8.3	8.2	8.2
H(60C)	0.072	0.045	0.045	10.2	10.2	10.2



atom	charges Q			$V_{tot}$		
	IR	EMR	MMR	IR	EMR	MMR
H(61A)	0.062	0.038	0.037	7.9	7.7	7.7
H(61B)	0.069	0.042	0.041	6.4	6.4	6.4
H(61C)	0.071	0.041	0.040	8.7	8.4	8.4
H(62A)	0.066	0.040	0.038	9.8	9.8	9.8
H(62B)	0.067	0.039	0.038	6.4	6.3	6.3
H(62C)	0.067	0.038	0.037	8.6	8.6	8.6
H(63A)	0.066	0.034	0.034	7.0	6.9	6.9
H(63B)	0.065	0.040	0.039	6.6	6.6	6.6
H(63C)	0.065	0.035	0.035	8.0	7.9	8.0
H(64A)	0.067	0.040	0.039	10.5	10.2	10.2
H(64B)	0.069	0.040	0.039	7.2	7.1	7.2
H(64C)	0.068	0.036	0.035	10.0	9.9	10.0
H(65A)	0.066	0.040	0.040	9.8	9.5	9.6
H(65B)	0.068	0.042	0.040	7.4	7.4	7.4
H(65C)	0.066	0.038	0.037	10.0	9.8	9.8
H(66A)	0.050	0.012	0.010	7.6	7.8	7.7
H(66B)	0.054	0.013	0.011	7.0	6.8	6.8
H(67A)	0.067	0.039	0.038	9.7	9.4	9.4
H(67B)	0.067	0.037	0.036	9.0	8.8	8.9
H(67C)	0.069	0.040	0.039	6.1	6.0	6.0
H(68A)	0.098	-0.063	-0.064	8.3	8.4	8.2
H(68B)	0.100	-0.054	-0.056	5.8	6.1	6.1
H(69A)	0.058	0.097	0.060	10.3	9.7	10.4
H(69B)	0.050	0.094	0.055	9.1	8.3	8.9
H(70A)	0.061	0.116	0.067	7.3	6.4	7.0
H(70B)	0.054	0.111	0.062	7.6	6.9	7.3
H(71A)	0.072	0.226	0.073	8.3	6.1	7.9
H(71B)	0.077	0.229	0.079	7.9	6.2	7.7
H(71C)	0.088	0.225	0.091	8.2	6.2	7.8
H(80A)	0.522	0.462	0.469	2.5	2.5	2.4
H(80B)	0.518	0.517	0.494	3.1	2.4	2.5
sum	0.067	0.030	0.070	1165.2	1163.2	1165.0