b44 [#16:1]-[#6:2] 2.00 1.75 1.50 1.25 Count 1.00 0.75 0.50 Sage 2.1.0 (regroup) 0.25 Sage 2.2.1 Sage 2.2.1-sdata 0.00 0.00 0.02 0.04 0.06 0.08 0.10

Bond length error (A)