

Table 17. Electron densities at the bond critical points (a.u.) for conformers of **II**

Bond	Conformer						Mean value
	1R, 1S	2R, 2S	3R, 3S	4R, 4S	5R, 5S	6R, 6S	
S – C2	0.21	0.21	0.21	0.21	0.21	0.21	0.21
O – C5'	0.40	0.40	0.40	0.40	0.40	0.40	0.40
N1 – C2	0.31	0.31	0.31	0.31	0.30	0.31	0.31
N1 – C6	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30
N3 – C2	0.34	0.33	0.33	0.33	0.34	0.34	0.33
N3 – C4	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
C4 – C4'	0.24	0.24	0.24	0.24	0.24	0.24	0.24
C4' – C4''	0.24	0.24	0.24	0.24	0.24	0.24	0.24
C4 – C5	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
C5 – C6	0.32	0.32	0.32	0.32	0.32	0.32	0.32
C6 – C6'	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
C5 – C5'	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27
C5' – C5''	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
N1 – H1	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34
N3 – H3	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34
C4 – H4	0.29	0.28	0.28	0.28	0.29	0.29	0.29
C4' – H41	0.28	0.27	0.28	0.27	0.27	0.27	0.27
C4' – H42	0.27	0.28	0.27	0.27	0.27	0.28	0.28
C4'' – H43	0.27	0.27	0.27	0.27	0.28	0.27	0.27
C4'' – H44	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27
C4'' – H45	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27
C6' – H61	0.27	0.27	0.28	0.28	0.27	0.27	0.27
C6' – H62	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27
C6' – H63	0.28	0.28	0.28	0.28	0.28	0.28	0.28
C5'' – H51''	0.28	0.28	0.28	0.28	0.27	0.27	0.28
C5'' – H52''	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27	0.28	0.27
C5'' – H53''	0.27	0.27	0.27	0.27	0.28	0.27	0.27