Table 2. Electron densities at the bond critical points (a.u.) for conformers of **I**

Bond	Conformer						Mean value
	1R, 1S	2R, 2S	3R, 3S	4R, 4S	5R, 5S	6R, 6S	
C2 - S	0.21	0.21	0.21	0.21	0.21	0.21	0.21
O1 - C5'	0.41	0.41	0.41	0.41	0.41	0.41	0.41
O2 - C5'	0.30	0.29	0.29	0.30	0.30	0.29	0.29
N1 - C2	0.31	0.31	0.31	0.31	0.31	0.31	0.31
C2 - N3	0.33	0.33	0.33	0.33	0.33	0.33	0.33
N3 - C4	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
C4 - C5	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
C5 - C6	0.33	0.33	0.33	0.33	0.33	0.33	0.33
C6 - N1	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30
C4 - C4'	0.24	0.24	0.24	0.24	0.24	0.24	0.24
C5 - C5'	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27
C6 - C6'	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
O2 - C7	0.23	0.23	0.23	0.23	0.23	0.23	0.23
C7 - C8	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	0.29	0.29	0.29	0.29	0.29	0.29
C4' - H41'	0.28	0.28	0.28	0.28	0.28	0.28	0.28
C4' - H42'	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27
C4' - H43'	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27
C6' - H61'	0.27	0.27	0.27	0.28	0.28	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	0.27	0.27	0.28	0.28
C7 - H71	0.28	0.29	0.29	0.29	0.29	0.28	0.29
C7 - H72	0.28	0.29	0.29	0.29	0.29	0.28	0.29
C8 - H81	0.27	0.28	0.27	0.27	0.28	0.27	0.28
C8 - H82	0.27	0.27	0.28	0.28	0.27	0.27	0.27
C8 - H83	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27	0.27