

Table 23. Kinetic energy density 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	0.239	0.241	0.241	0.240	0.239	0.238	0.239
O – C5'	0.615	0.614	0.615	0.614	0.616	0.614	0.615
N1 – C2	0.177	0.178	0.176	0.180	0.174	0.179	0.177
N1 – C6	0.192	0.200	0.199	0.203	0.192	0.196	0.197
N3 – C2	0.223	0.217	0.216	0.220	0.223	0.226	0.221
N3 – C4	0.129	0.124	0.123	0.124	0.129	0.129	0.126
C4 – C4'	0.055	0.054	0.054	0.054	0.054	0.054	0.054
C4' – C4''	0.055	0.055	0.055	0.055	0.055	0.055	0.055
C4 – C5	0.057	0.058	0.058	0.058	0.057	0.057	0.057
C5 – C6	0.128	0.126	0.126	0.126	0.128	0.128	0.127
C6 – C6'	0.060	0.063	0.063	0.062	0.060	0.060	0.061
C5 – C5'	0.070	0.072	0.071	0.071	0.070	0.070	0.071
C5' – C5''	0.057	0.057	0.057	0.057	0.057	0.057	0.057
N1 – H1	0.050	0.050	0.050	0.050	0.050	0.050	0.050
N3 – H3	0.052	0.052	0.052	0.052	0.051	0.052	0.052
C4 – H4	0.037	0.039	0.039	0.039	0.036	0.037	0.038
C4' – H41	0.042	0.043	0.042	0.043	0.043	0.044	0.043
C4' – H42	0.043	0.042	0.043	0.043	0.043	0.041	0.043
C4'' – H43	0.043	0.044	0.044	0.043	0.042	0.043	0.043
C4'' – H44	0.043	0.043	0.043	0.043	0.044	0.044	0.043
C4'' – H45	0.044	0.043	0.043	0.043	0.044	0.044	0.043
C6' – H61	0.042	0.040	0.040	0.040	0.042	0.042	0.041
C6' – H62	0.043	0.043	0.043	0.043	0.043	0.043	0.043
C6' – H63	0.042	0.040	0.040	0.040	0.042	0.042	0.041
C5'' – H51''	0.040	0.040	0.040	0.040	0.043	0.044	0.041
C5'' – H52''	0.043	0.044	0.044	0.044	0.044	0.040	0.043
C5'' – H53''	0.044	0.044	0.043	0.044	0.040	0.043	0.043