

Table 38. Kinetic energy density at the bond critical points (a.u.) for conformers of **III**

Bond	Conformer		Mean value
	1R, 1S	2R, 2S	
O1 – C2	0.602	0.605	0.604
O2 – C5'	0.613	0.609	0.611
N1 – C2	0.150	0.151	0.151
N1 – C6	0.195	0.203	0.199
N3 – C2	0.187	0.182	0.185
N3 – C4	0.127	0.122	0.124
C4 – C4'	0.055	0.054	0.055
C4 – C5	0.057	0.057	0.057
C5 – C6	0.128	0.126	0.127
C6 – C6'	0.060	0.062	0.061
C5 – C5'	0.071	0.072	0.072
C5' – C5''	0.057	0.057	0.057
N1 – H1	0.052	0.051	0.052
N3 – H3	0.054	0.054	0.054
C4 – H4	0.037	0.039	0.038
C4' – H41	0.043	0.043	0.043
C4' – H42	0.041	0.043	0.042
C4' – H43	0.043	0.042	0.043
C6' – H61	0.043	0.040	0.042
C6' – H62	0.042	0.043	0.043
C6' – H63	0.042	0.040	0.041
C5'' – H51''	0.040	0.040	0.040
C5'' – H52''	0.043	0.044	0.044
C5'' – H53''	0.044	0.044	0.044