

Table 47. Electron densities at the bond critical points (a.u.) for different methods of computation

Bond	DFT B3LYP/ 6-311++G**	DFT BHLYP/ 6-311++G**	DFT BLYP/ 6-311++G**	HF/ 6-311++G**
O1 – C2	0.42	0.43	0.40	0.44
O2 – C5'	0.40	0.41	0.39	0.43
N1 – C2	0.29	0.31	0.28	0.31
N1 – C6	0.30	0.31	0.29	0.30
N3 – C2	0.33	0.34	0.32	0.34
N3 – C4	0.25	0.26	0.24	0.26
C4 – C4'	0.24	0.25	0.23	0.26
C4 – C5	0.25	0.26	0.24	0.26
C5 – C6	0.32	0.34	0.31	0.35
C6 – C6'	0.25	0.26	0.24	0.26
C5 – C5'	0.27	0.28	0.26	0.28
C5' – C5''	0.25	0.26	0.24	0.26
N1 – H1	0.34	0.35	0.33	0.36
N3 – H3	0.34	0.35	0.33	0.36
C4 – H4	0.29	0.29	0.28	0.30
C4' – H41	0.27	0.28	0.27	0.28
C4' – H42	0.28	0.28	0.27	0.29
C4' – H43	0.27	0.28	0.27	0.28
C6' – H61	0.27	0.28	0.27	0.28
C6' – H62	0.28	0.29	0.28	0.29
C6' – H63	0.27	0.28	0.27	0.28
C5'' – H51''	0.28	0.28	0.27	0.29
C5'' – H52''	0.27	0.28	0.27	0.29
C5'' – H53''	0.27	0.28	0.26	0.28