

Table 52. Bond ellipticity ($\lambda_1/\lambda_2 - 1$) for different methods of computation

Bond	DFT B3LYP/ 6-311++G**	DFT BHHLYP/ 6-311++G**	DFT BLYP/ 6-311++G**	HF/ 6-311++G**
O1 – C2	0.10	0.08	0.11	0.06
O2 – C5'	0.05	0.05	0.06	0.04
N1 – C2	0.11	0.07	0.14	0.02
N1 – C6	0.07	0.03	0.10	0.05
N3 – C2	0.18	0.15	0.20	0.08
N3 – C4	0.04	0.04	0.04	0.05
C4 – C4'	0.03	0.03	0.03	0.03
C4 – C5	0.06	0.07	0.06	0.07
C5 – C6	0.35	0.40	0.32	0.50
C6 – C6'	0.04	0.04	0.04	0.04
C5 – C5'	0.15	0.14	0.15	0.13
C5' – C5''	0.04	0.04	0.04	0.04
N1 – H1	0.05	0.06	0.05	0.06
N3 – H3	0.06	0.06	0.05	0.06
C4 – H4	0.03	0.03	0.02	0.03
C4' – H41	0.01	0.01	0.01	0.01
C4' – H42	0.01	0.01	0.01	0.01
C4' – H43	0.01	0.01	0.01	0.01
C6' – H61	0.01	0.01	0.01	0.01
C6' – H62	0.01	0.01	0.01	0.01
C6' – H63	0.01	0.01	0.01	0.01
C5'' – H51''	0.01	0.01	0.01	0.01
C5'' – H52''	0.01	0.01	0.01	0.01
C5'' – H53''	0.01	0.01	0.01	0.01