

Table 53. Kinetic energy density 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	0.602	0.671	0.546	0.746
O2 – C5'	0.613	0.700	0.543	0.799
N1 – C2	0.150	0.184	0.133	0.247
N1 – C6	0.195	0.232	0.172	0.282
N3 – C2	0.187	0.219	0.169	0.270
N3 – C4	0.127	0.160	0.110	0.227
C4 – C4'	0.055	0.055	0.054	0.051
C4 – C5	0.057	0.057	0.056	0.052
C5 – C6	0.128	0.139	0.120	0.155
C6 – C6'	0.060	0.060	0.059	0.057
C5 – C5'	0.071	0.068	0.072	0.060
C5' – C5''	0.057	0.057	0.056	0.053
N1 – H1	0.052	0.052	0.052	0.051
N3 – H3	0.054	0.054	0.054	0.053
C4 – H4	0.037	0.037	0.036	0.037
C4' – H41	0.043	0.045	0.042	0.045
C4' – H42	0.041	0.042	0.041	0.042
C4' – H43	0.043	0.044	0.042	0.044
C6' – H61	0.043	0.044	0.042	0.043
C6' – H62	0.042	0.043	0.041	0.042
C6' – H63	0.042	0.043	0.041	0.042
C5'' – H51''	0.040	0.041	0.040	0.040
C5'' – H52''	0.043	0.044	0.043	0.044
C5'' – H53''	0.044	0.045	0.043	0.045