

Table 57. Variation of the atomic free valence indexes for different methods of computation

Atom	DFT B3LYP/ 6-311++G**	DFT BHLYP/ 6-311++G**	DFT BLYP/ 6-311++G**	HF/ 6-311++G**
O1	0.76	0.86	0.70	1.00
O2	0.63	0.68	0.59	0.75
N1	0.28	0.39	0.20	0.57
N3	0.27	0.38	0.20	0.57
C2	0.85	1.08	0.72	1.45
C4	0.31	0.34	0.31	0.41
C4'	0.19	0.19	0.19	0.19
C5	0.48	0.47	0.49	0.48
C6	0.44	0.46	0.43	0.51
C6'	0.19	0.19	0.19	0.19
C5'	0.63	0.70	0.57	0.83
C5''	0.22	0.21	0.22	0.21
H1	0.21	0.22	0.20	0.23
H3	0.19	0.20	0.18	0.21
H4	0.11	0.11	0.11	0.10
H41	0.04	0.04	0.04	0.04
H42	0.05	0.05	0.06	0.05
H43	0.04	0.04	0.05	0.04
H61	0.06	0.05	0.06	0.05
H62	0.07	0.06	0.07	0.06
H63	0.06	0.06	0.06	0.05
H51''	0.06	0.05	0.06	0.05
H52''	0.05	0.05	0.05	0.04
H53''	0.06	0.05	0.06	0.05