

Table 59. Variation of atomic charges 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	-1.16	-1.25	-1.09	-1.37
O2	-1.11	-1.19	-1.04	-1.31
N1	-1.12	-1.29	-1.00	-1.51
N3	-1.10	-1.26	-0.99	-1.47
C2	1.78	2.02	1.60	2.37
C4	0.38	0.45	0.34	0.57
C4'	0.02	0.05	0.02	0.14
C5	-0.03	-0.02	-0.04	0.04
C6	0.38	0.41	0.35	0.40
C6'	0.03	0.06	0.02	0.16
C5'	0.94	1.03	0.87	1.15
C5''	-0.01	0.02	-0.01	0.11
H1	0.40	0.42	0.39	0.44
H3	0.40	0.42	0.38	0.43
H4	0.05	0.04	0.05	0.01
H41	-0.01	-0.02	-0.01	-0.05
H42	0.03	0.02	0.03	-0.01
H43	-0.01	-0.02	0.00	-0.05
H61	0.01	0.01	0.01	-0.01
H62	0.03	0.03	0.03	0.00
H63	0.03	0.02	0.03	0.00
H51''	0.04	0.04	0.04	0.02
H52''	0.01	0.00	0.01	-0.03
H53''	0.01	0.01	0.01	-0.02
Σ	0.01	0.01	0.01	0.01