Table 6. Electron density curvature λ_3 for conformers of **I** (a.u.)

Bond	Conformer						Mean value
	1R, 1S	2R, 2S	3R, 3S	4R, 4S	5R, 5S	6R, 6S	
C2 - S	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35
O1 - C5'	1.78	1.78	1.78	1.77	1.77	1.79	1.78
O2 - C5'	0.75	0.71	0.70	0.73	0.73	0.72	0.72
N1 - C2	0.36	0.36	0.36	0.36	0.36	0.36	0.36
C2 - N3	0.41	0.41	0.41	0.41	0.41	0.41	0.41
N3 - C4	0.29	0.30	0.30	0.29	0.29	0.30	0.29
C4 - C5	0.36	0.36	0.36	0.36	0.36	0.36	0.36
C5 - C6	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30
C6 - N1	0.35	0.36	0.36	0.35	0.36	0.36	0.36
C4 - C4'	0.36	0.37	0.37	0.36	0.36	0.37	0.36
C5 - C5'	0.36	0.36	0.36	0.36	0.36	0.36	0.36
C6 - C6'	0.35	0.34	0.34	0.35	0.35	0.34	0.35
O2 - C7	0.44	0.44	0.44	0.43	0.43	0.44	0.44
C7 - C8	0.36	0.36	0.36	0.36	0.36	0.36	0.36
N1 - H1	0.87	0.87	0.87	0.87	0.87	0.87	0.87
N3 - H3	0.88	0.88	0.88	0.88	0.88	0.88	0.88
C4 - H4	0.56	0.55	0.56	0.56	0.56	0.56	0.56
C4' - H41'	0.51	0.51	0.51	0.51	0.51	0.51	0.51
C4' - H42'	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
C4' - H43'	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50
C6' - H61'	0.51	0.50	0.50	0.54	0.54	0.50	0.52
C6' - H62'	0.50	0.50	0.50	0.51	0.51	0.50	0.50
C6' - H63'	0.54	0.55	0.56	0.50	0.50	0.56	0.53
C7 - H71	0.55	0.56	0.54	0.54	0.56	0.55	0.55
C7 - H72	0.55	0.54	0.56	0.56	0.54	0.55	0.55
C8 - H81	0.50	0.51	0.50	0.50	0.51	0.50	0.51
C8 - H82	0.50	0.50	0.51	0.51	0.50	0.50	0.51
C8 - H83	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50