Table 8. Kinetic energy density at the bond critical points (a.u.) for conformers of **I**

Bond	Conformer						Mean value
	1R, 1S	2R, 2S	3R, 3S	4R, 4S	5R, 5S	6R, 6S	
C2 - S	0.238	0.239	0.239	0.238	0.238	0.239	0.239
O1 - C5'	0.623	0.623	0.623	0.621	0.621	0.625	0.623
O2 - C5'	0.294	0.282	0.281	0.290	0.290	0.286	0.287
N1 - C2	0.178	0.178	0.178	0.178	0.178	0.178	0.178
C2 - N3	0.221	0.219	0.220	0.221	0.221	0.219	0.220
N3 - C4	0.126	0.124	0.124	0.126	0.126	0.124	0.125
C4 - C5	0.057	0.057	0.057	0.057	0.057	0.057	0.057
C5 - C6	0.129	0.128	0.128	0.128	0.128	0.128	0.128
C6 - N1	0.193	0.196	0.196	0.193	0.194	0.196	0.195
C4 - C4'	0.055	0.055	0.055	0.055	0.055	0.055	0.055
C5 - C5'	0.071	0.071	0.071	0.071	0.072	0.071	0.071
C6 - C6'	0.062	0.063	0.063	0.062	0.061	0.063	0.062
O2 - C7	0.209	0.210	0.210	0.207	0.207	0.211	0.209
C7 - C8	0.057	0.057	0.057	0.057	0.057	0.057	0.057
N1 - H1	0.050	0.050	0.050	0.050	0.050	0.050	0.050
N3 - H3	0.052	0.052	0.052	0.052	0.052	0.052	0.052
C4 - H4	0.037	0.037	0.037	0.037	0.037	0.037	0.037
C4' - H41'	0.041	0.042	0.042	0.041	0.041	0.042	0.042
C4' - H42'	0.043	0.043	0.043	0.043	0.043	0.043	0.043
C4' - H43'	0.043	0.042	0.042	0.043	0.043	0.042	0.042
C6' - H61'	0.042	0.042	0.042	0.039	0.040	0.043	0.041
C6' - H62'	0.043	0.043	0.043	0.042	0.042	0.043	0.043
C6' - H63'	0.039	0.038	0.038	0.043	0.043	0.038	0.040
C7 - H71	0.036	0.036	0.037	0.036	0.036	0.036	0.036
C7 - H72	0.036	0.036	0.036	0.036	0.037	0.036	0.036
C8 - H81	0.042	0.042	0.043	0.043	0.041	0.042	0.042
C8 - H82	0.043	0.043	0.042	0.041	0.043	0.042	0.042
C8 - H83	0.043	0.043	0.043	0.043	0.043	0.043	0.043