

SECOND ORDER PERTURBATION THEORY ANALYSIS OF FOCK MATRIX IN NBO BASIS

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

Donor NBO (i)	Acceptor NBO (j)	E(2) kcal/mol	E(j)-E(i) a.u.	F(i,j) a.u.
within unit 1				
1. BD (1) H 1- N 3	20. RY*(2) C 4	2.54	1.89	0.062
1. BD (1) H 1- N 3	32. BD*(2) C 4- O 5	4.41	1.74	0.078
2. BD (1) H 2- N 3	19. RY*(1) C 4	2.10	1.76	0.054
2. BD (1) H 2- N 3	21. RY*(3) C 4	0.59	2.32	0.033
2. BD (1) H 2- N 3	32. BD*(2) C 4- O 5	1.28	1.72	0.042
2. BD (1) H 2- N 3	33. BD*(1) C 4- H 6	2.45	1.53	0.055
3. BD (1) N 3- C 4	28. BD*(1) H 1- N 3	0.64	1.76	0.030
3. BD (1) N 3- C 4	29. BD*(1) H 2- N 3	0.71	1.76	0.032
4. BD (1) C 4- O 5	16. RY*(2) N 3	0.89	1.90	0.037
4. BD (1) C 4- O 5	31. BD*(1) C 4- O 5	0.95	0.67	0.024
5. BD (2) C 4- O 5	19. RY*(1) C 4	1.83	2.29	0.058
5. BD (2) C 4- O 5	28. BD*(1) H 1- N 3	1.59	2.06	0.051
6. BD (1) C 4- H 6	15. RY*(1) N 3	0.65	2.81	0.038
6. BD (1) C 4- H 6	23. RY*(1) O 5	1.61	2.79	0.060
6. BD (1) C 4- H 6	29. BD*(1) H 2- N 3	5.24	1.42	0.077
7. CR (1) N 3	13. RY*(1) H 1	0.93	16.24	0.109
7. CR (1) N 3	14. RY*(1) H 2	0.92	16.27	0.109
7. CR (1) N 3	19. RY*(1) C 4	1.83	16.20	0.154
7. CR (1) N 3	20. RY*(2) C 4	3.78	16.32	0.222
8. CR (1) C 4	27. RY*(1) H 6	1.66	12.06	0.126
8. CR (1) C 4	28. BD*(1) H 1- N 3	0.77	11.83	0.085
8. CR (1) C 4	29. BD*(1) H 2- N 3	0.78	11.83	0.086
9. CR (1) O 5	19. RY*(1) C 4	8.82	20.97	0.385
9. CR (1) O 5	20. RY*(2) C 4	0.59	21.09	0.100
9. CR (1) O 5	25. RY*(3) O 5	1.12	22.05	0.140
10. LP (1) N 3	22. RY*(4) C 4	1.34	1.34	0.040
10. LP (1) N 3	31. BD*(1) C 4- O 5	93.00	0.56	0.203
11. LP (1) O 5	19. RY*(1) C 4	19.88	1.82	0.170
11. LP (1) O 5	20. RY*(2) C 4	1.68	1.94	0.051
11. LP (1) O 5	29. BD*(1) H 2- N 3	0.55	1.59	0.026
11. LP (1) O 5	30. BD*(1) N 3- C 4	0.62	1.64	0.029
11. LP (1) O 5	33. BD*(1) C 4- H 6	1.43	1.59	0.043
12. LP (2) O 5	20. RY*(2) C 4	1.23	1.41	0.038
12. LP (2) O 5	30. BD*(1) N 3- C 4	37.16	1.11	0.184
12. LP (2) O 5	33. BD*(1) C 4- H 6	27.37	1.06	0.155