

NBBP: NBO bond-bond polarizability matrix

	NBO	1	2	3	4	5	6	7	8
1.	H 1- N 3	0.2693	-0.0008	0.0001	0.0000	0.0049	0.0006	-0.0001	-0.0001
2.	H 2- N 3	-0.0008	0.2850	0.0004	0.0000	0.0017	0.0058	0.0000	-0.0001
3.	N 3- C 4	0.0001	0.0004	0.1529	0.0000	-0.0004	-0.0008	0.0002	-0.0001
4.	C 4- O 5	0.0000	0.0000	0.0000	0.6668	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
5.	C 4- O 5	0.0049	0.0017	-0.0004	0.0000	0.1092	0.0001	0.0000	0.0001
6.	C 4- H 6	0.0006	0.0058	-0.0008	0.0000	0.0001	0.0953	0.0000	0.0001
7.	N 3(cr)	-0.0001	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0000
8.	C 4(cr)	-0.0001	-0.0001	-0.0001	0.0000	0.0001	0.0001	0.0000	0.0002
9.	O 5(cr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
10.	N 3(lp)	0.0000	0.0000	0.0000	0.5484	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
11.	O 5(lp)	0.0006	0.0009	0.0012	0.0000	0.0028	0.0018	0.0000	0.0001
12.	O 5(lp)	0.0076	0.0042	0.1007	0.0000	0.0000	0.0799	0.0000	0.0000

	NBO	9	10	11	12
1.	H 1- N 3	0.0000	0.0000	0.0006	0.0076
2.	H 2- N 3	0.0000	0.0000	0.0009	0.0042
3.	N 3- C 4	0.0000	0.0000	0.0012	0.1007
4.	C 4- O 5	0.0000	0.5484	0.0000	0.0000
5.	C 4- O 5	0.0000	0.0000	0.0028	0.0000
6.	C 4- H 6	0.0000	0.0000	0.0018	0.0799
7.	N 3(cr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
8.	C 4(cr)	0.0000	0.0000	0.0001	0.0000
9.	O 5(cr)	0.0001	0.0000	-0.0004	0.0000
10.	N 3(lp)	0.0000	1.0371	0.0000	0.0000
11.	O 5(lp)	-0.0004	0.0000	0.0473	0.0000
12.	O 5(lp)	0.0000	0.0000	0.0000	0.4491