DIPOLE MOMENT ANALYSIS:

[Print threshold: Net dipole >0.020 Debye]

Orbital	NLMO bond dipole x	y	z	Total	NBO bond dipole x	y	z	Total
1. BD (1) H 1- N 3	0.743	-0.515	0.000	0.904	0.753	-0.505	0.000	0.907
deloc 32:					-0.054	0.002	0.000	0.054
deloc 30:					0.032	0.019	0.000	0.037
deloc 20:					0.022	-0.018	0.000	0.028
2. BD (1) H 2- N 3	0.158	0.825	0.000	0.840	0.159	0.825	0.000	0.841
deloc 33:					-0.035	-0.034	0.000	0.049
deloc 30:					0.043	0.013	0.000	0.045
deloc 19:					0.024	0.031	0.000	0.039
deloc 32:					-0.021	-0.025	0.000	0.033
3. BD (1) N 3- C 4	0.825	0.386	0.000	0.910	0.839	0.445	0.000	0.950
deloc 33:					0.003	-0.035	0.000	0.036
deloc 28:					-0.023	0.022	0.000	0.032
deloc 29:					0.001	-0.030	0.000	0.030
4. BD (1) C 4- O 5	-2.142	1.202	0.000	2.457	-2.135	1.221	0.000	2.460
5. BD (2) C 4- O 5	-0.685	0.470	0.000	0.831	-0.698	0.472	0.000	0.843
6. BD (1) C 4- H 6	0.083	-1.893	0.000	1.895	-0.049	-1.951	0.000	1.951
deloc 29:					0.056	0.056	0.000	0.079
deloc 30:					0.070	0.018	0.000	0.072
deloc 32:					0.021	-0.004	0.000	0.022
7. CR (1) N 3	-0.002	-0.001	0.000	0.003	-0.006	-0.003	0.000	0.006
8. CR (1) C 4	0.003	0.004	0.000	0.005	0.003	0.008	0.000	0.008
9. CR (1) O 5	0.007	-0.004	0.000	0.008	0.001	0.000	0.000	0.001
10. LP (1) N 3	-1.257	-0.297	0.000	1.291	0.213	0.092	0.000	0.232
deloc 31:					-1.468	-0.388	0.000	1.519
11. LP (1) O 5	-2.364	1.481	0.000	2.789	-2.448	1.535	0.000	2.890
deloc 19:					0.061	-0.006	0.000	0.061
deloc 33:					-0.004	-0.022	0.000	0.023
deloc 20:					0.000	-0.021	0.000	0.021
12. LP (2) O 5	0.725	-0.507	0.000	0.885	-0.178	0.051	0.000	0.185
deloc 30:					0.396	-0.153	0.000	0.424
deloc 33:					0.293	-0.285	0.000	0.409
deloc 20:					0.114	0.002	0.000	0.114
deloc 19:					-0.034	-0.104	0.000	0.109
deloc 28:					0.059	-0.016	0.000	0.061
deloc 27:					0.035	-0.024	0.000	0.043
Net dipole moment	-3.907	1.151	0.000	4.073	-3.545	2.189	-0.001	4.167
Delocalization correction					-0.361	-1.038	0.001	1.100
Total dipole moment	-3.907	1.151	0.000	4.073	-3.907	1.151	0.000	4.073