

NATURAL J-COUPPLING ANALYSIS  
 Writing disk file amide\_6.njc

J[H2,H6] = 10.39 Hz: 3-J[H2-N3-C4-H6]

Threshold for printing: 0.10 Hz

	1.   H 1- N 3	2. H 2- N 3	3. N 3- C 4	5. C 4- O 5	6. C 4- H 6
Lewis	0.06	3.41	0.12	0.02	5.00
Repol.	0.00	0.02	-0.00	-0.00	-0.07
14. H 2(ry*)	-0.06 v		-0.25 v	-0.05 r	-0.34 r
15. N 3(ry*)				-0.01 v	-0.52 v
29. H 2- N 3*	0.08 g		0.17 g	0.12 v	1.80 v
30. N 3- C 4*	0.00 g	0.03 g		-0.00 g	-0.16 g
32. C 4- O 5*	-0.02 v	-0.19 v	-0.01 g		-0.08 g
33. C 4- H 6*	0.23 v	0.93 v	0.10 g	0.12 g	
Others	-0.06	-0.22	-0.08	-0.03	0.10
(Total deloc.)	(0.17)	(0.55)	(-0.07)	(0.14)	(0.79)
NLMO	0.23	3.99	0.05	0.16	5.73
	12.   O 5(lp)	Others	Total		
Lewis	0.02	-0.01	8.63		
Repol.	-0.00	-0.00	-0.05		
14. H 2(ry*)	-0.07 r	-0.02	-0.79		
15. N 3(ry*)	-0.02 r	-0.00	-0.55		
29. H 2- N 3*	0.11 r	0.03	2.31		
30. N 3- C 4*	-0.03 v	0.00	-0.16		
32. C 4- O 5*	-0.00 g	0.00	-0.31		
33. C 4- H 6*	0.26 v	0.01	1.65		
Others	-0.05	0.00	-0.34		
(Total deloc.)	(0.20)	(0.03)	(1.81)		
NLMO	0.21	0.02	10.39		