

## Supporting Information

### **Electrospray Mass Spectrometric and DFT Study of Substituent Effects in Ag<sup>+</sup> Complexation to Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs)**

Kenneth K. Laali\*, Scott Hupertz<sup>a</sup>, and Alice G. Temu<sup>a</sup>

Department of Chemistry, Kent State University, Kent, OH 44242

Sergio E. Galembeck

Departamento de Química, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto,  
Universidade de São Paulo, Av. Bandeirantes, 3900, Ribeirão Preto, SP, Brazil

#### Table

Electronic energy, (E), zero-point correction and their sum (Hartree), total and relative binding energy, $E_B$ and $\Delta E_B$ , and basis set superposition error (kcal/mol).	S1
Root mean square of the differences between structures optimized with different models	S2
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>2</b> -C <sub>1</sub> O)	S3
Vibrational frequencies for ( <b>2</b> -C <sub>1</sub> O)	S4
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>3</b> -OO)	S5
Vibrational frequencies for ( <b>3</b> -OO)	S6
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>5</b> -C <sub>9</sub> )	S7
Vibrational frequencies for ( <b>5</b> -C <sub>9</sub> )	S8

Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>5</b> -C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> )	S9
Vibrational frequencies for ( <b>5</b> -C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> )	S10
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>6</b> -C <sub>9</sub> C <sub>10</sub> )	S11
Vibrational frequencies for ( <b>6</b> -C <sub>9</sub> C <sub>10</sub> )	S12
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>6</b> -C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> )	S13
Vibrational frequencies for ( <b>6</b> -C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> )	S14
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>6</b> -C <sub>3</sub> C <sub>4</sub> )	S15
Vibrational frequencies for ( <b>6</b> -C <sub>3</sub> C <sub>4</sub> )	S16
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>7</b> -C <sub>1</sub> O)	S17
Vibrational frequencies for ( <b>7</b> -C <sub>1</sub> O)	S18
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>11</b> -C <sub>10</sub> O)	S19
Vibrational frequencies for ( <b>11</b> -C <sub>10</sub> O)	S20
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>12</b> -C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> )	S21
Vibrational frequencies for ( <b>12</b> -C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> )	S22
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>12</b> -OO)	S23
Vibrational frequencies for ( <b>12</b> -OO)	S24
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>12</b> -C <sub>10</sub> O)	S25
Vibrational frequencies for ( <b>12</b> -C <sub>10</sub> O)	S26
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>12</b> -C <sub>6</sub> )	S27
Vibrational frequencies for ( <b>12</b> -C <sub>6</sub> )	S28
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>13</b> -C <sub>10</sub> O)	S29
Vibrational frequencies for ( <b>13</b> -C <sub>10</sub> O)	S30
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>14</b> -C <sub>6</sub> )	S31
Vibrational frequencies for ( <b>14</b> -C <sub>6</sub> )	S32

Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>14-C<sub>3</sub></b> )	S33
Vibrational frequencies for ( <b>14-C<sub>3</sub></b> )	S34
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>14-C<sub>4</sub>C<sub>5</sub></b> )	S35
Vibrational frequencies for ( <b>14-C<sub>4</sub>C<sub>5</sub></b> )	S36
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>15-C<sub>4</sub></b> )	S37
Vibrational frequencies for ( <b>15-C<sub>4</sub></b> )	S38
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>11/Ag<sup>+</sup>/10</b> )	S39
Vibrational frequencies for ( <b>11/Ag<sup>+</sup>/10</b> )	S40
Cartesian coordinates of optimized structure for ( <b>10/Ag<sup>+</sup>/10</b> )	S41
Vibrational frequencies for ( <b>10/Ag<sup>+</sup>/10</b> )	S42

**Table S1.** Electronic energy, (E), zero-point correction and their sum (Hartree), total binding energy,  $E_B$ , and basis set superposition error, (kcal/mol), for monomer complexation.

	E	ZPE	E+ZPE	$\Delta E_B$	BSSE
(12-OO)	-965.71608	0.212079	-965.504001	-59.21	2.29
(3-OO)	-889.47753	0.198817	-889.278713	-57.99	2.18
(11-C <sub>10</sub> O)	-913.864306	0.247966	-913.61634	-56.26	2.23
(7-C <sub>1</sub> O)	-837.640863	0.234955	-837.405908	-56.01	2.18
(2-C <sub>1</sub> O)	-837.624621	0.234681	-837.389941	-55.90	2.23
(13-C <sub>10</sub> O)	-915.049694	0.270815	-914.778879	-48.65	1.15
(5-C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> )	-763.607246	0.253367	-763.353879	-46.69	1.20
(15-C <sub>4</sub> )	-764.83188	0.279692	-764.552188	-46.48	1.46
(12-C <sub>10</sub> O)	-965.694814	0.211817	-965.482997	-45.89	2.27
(14-C <sub>6</sub> )	-836.435264	0.213876	-836.221388	-44.77	1.16
(5-C <sub>9</sub> )	-763.604089	0.253136	-763.350953	-44.64	1.26
(14-C <sub>3</sub> )	-836.433967	0.213761	-836.220206	-43.67	1.44
(14-C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> )	-836.433516	0.213783	-836.219733	-43.58	1.25
(6-C <sub>9</sub> C <sub>10</sub> )	-684.99909	0.197231	-684.801859	-42.85	1.26
(6-C <sub>3</sub> C <sub>4</sub> )	-684.99758	0.197215	-684.800365	-42.03	1.13
(6-C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> )	-684.997353	0.197202	-684.800151	-41.88	1.15
(12-C <sub>6</sub> )	-965.675378	0.21147	-965.463908	-34.84	1.12
(12-C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> )	-965.672438	0.211301	-965.461137	-32.93	1.19

**Table S2.** Root mean square of the differences between atoms in structures optimized with different models, (Å)

	LANL2DZ/SDD <sup>a</sup>	LANL2DZ/MIXB <sup>a,b</sup>	SDD/MIXB <sup>a,b</sup>
12-OO	0.007	0.024	0.024
12-C10O	0.018	0.044	0.044
C6	0.015	0.068	0.070
12-C4C5	0.000	0.068	0.068
mean	0.010	0.051	0.052
$\sigma$	0.008	0.021	0.022

a. Indicates that superposed structures were optimized by these models.

b. MIXB: LANL2DZ for Ag and 6-31+G(d,p) for main group atoms.

**Table S3.** Cartesian coordinates of optimized structure for (2-C<sub>1</sub>O)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	47	0	2.443020	-0.688638	-0.799326
2	6	0	1.530137	0.613227	1.082876
3	6	0	2.354776	1.745851	1.094835
4	6	0	1.874829	3.011992	0.636929
5	6	0	0.553920	3.130736	0.244320
6	1	0	2.531591	3.875647	0.650798
7	6	0	-0.330524	1.996370	0.216082
8	1	0	0.156196	4.100684	-0.044363
9	6	0	0.160628	0.684072	0.587547
10	6	0	-1.681515	2.149628	-0.152713
11	6	0	-0.717262	-0.445243	0.509157
12	6	0	-2.084872	-0.277316	0.112706
13	6	0	-0.153400	-1.805457	0.767538
14	1	0	1.856511	-0.265274	1.637991
15	1	0	3.350461	1.676205	1.526531
16	6	0	-2.569007	1.060346	-0.195670
17	1	0	-2.047681	3.139694	-0.416708
18	6	0	-3.939640	1.256361	-0.585141
19	6	0	-3.006830	-1.366162	-0.069597
20	8	0	0.969441	-2.138593	0.261830
21	6	0	-0.827174	-2.806899	1.680957
22	6	0	-4.801906	0.185125	-0.699552
23	1	0	-4.280341	2.266430	-0.797738
24	6	0	-4.318480	-1.140527	-0.452120
25	1	0	-2.681178	-2.388981	0.071955
26	1	0	-1.072570	-3.725224	1.131867
27	1	0	-1.721978	-2.411567	2.163051
28	1	0	-0.100236	-3.097000	2.450893
29	1	0	-4.993654	-1.982627	-0.577217
30	1	0	-5.836672	0.334105	-0.992335

**Table S4. Vibrational Frequencies for (2-C<sub>1</sub>O)**

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	38.3850			67.2461			85.0191		
Red. masses	--	8.4799			6.1503			4.9975		
Frc consts	--	0.0074			0.0164			0.0213		
IR Inten	--	0.1017			0.5347			0.3670		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.13	0.01	0.20	0.02	-0.03	0.07	0.01	-0.02	0.01
2	6	-0.13	0.02	0.16	0.09	-0.02	-0.13	-0.03	-0.04	0.22
3	6	-0.10	0.01	0.13	-0.03	-0.02	0.18	0.04	0.00	-0.17
4	6	-0.08	0.01	0.02	0.00	0.01	0.11	0.04	0.01	-0.15
5	6	-0.08	0.01	-0.01	0.06	0.02	-0.05	0.03	0.00	-0.01
6	6	-0.06	0.00	-0.04	-0.02	0.04	0.13	0.04	0.02	-0.18
7	1	-0.10	0.01	0.15	-0.08	-0.03	0.31	0.06	0.00	-0.30
8	6	-0.11	0.01	0.06	0.12	0.01	-0.18	-0.02	-0.02	0.19
9	1	-0.11	0.01	0.04	0.18	0.02	-0.32	-0.05	-0.03	0.36
10	6	-0.06	0.01	-0.10	0.07	0.04	-0.06	0.04	0.02	-0.05
11	1	-0.15	0.02	0.22	0.13	-0.03	-0.23	-0.07	-0.05	0.39
12	6	-0.05	0.00	-0.08	0.00	0.06	0.06	0.02	0.03	-0.06
13	1	-0.07	0.00	-0.03	-0.05	0.04	0.18	0.05	0.02	-0.26
14	1	-0.15	0.02	0.29	-0.01	-0.06	0.12	0.00	-0.03	0.01
15	6	-0.06	0.00	-0.09	0.03	0.06	0.03	0.02	0.03	-0.02
16	6	-0.04	0.00	-0.17	0.13	0.05	-0.14	0.09	0.02	-0.15
17	6	-0.05	0.00	-0.12	0.00	0.06	-0.05	0.03	0.03	0.03
18	6	-0.06	-0.01	-0.09	0.02	0.08	0.06	0.01	0.04	0.01
19	6	-0.03	0.00	-0.20	0.13	0.07	-0.13	0.10	0.04	-0.17
20	1	-0.04	0.01	-0.20	0.16	0.03	-0.22	0.13	0.01	-0.23
21	8	-0.04	-0.01	-0.06	-0.03	0.03	-0.10	0.04	0.03	0.06
22	6	-0.07	0.03	-0.22	0.02	0.09	-0.13	0.02	0.01	0.11
23	6	-0.05	-0.01	-0.14	0.08	0.08	-0.01	0.06	0.05	-0.06
24	1	-0.09	-0.02	-0.04	-0.02	0.09	0.11	-0.02	0.04	0.06
25	1	-0.02	0.00	-0.26	0.17	0.07	-0.19	0.15	0.04	-0.26
26	1	-0.08	0.05	-0.26	0.03	0.10	-0.22	0.01	-0.01	0.19
27	1	-0.08	-0.04	-0.26	-0.03	0.02	-0.15	0.08	0.06	0.12
28	1	-0.07	0.08	-0.23	0.07	0.15	-0.11	-0.03	-0.04	0.07
29	1	-0.06	-0.02	-0.13	0.06	0.09	0.02	0.05	0.05	-0.04
30	47	0.15	-0.01	0.09	-0.08	-0.08	0.05	-0.07	-0.03	0.04
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	93.8083			110.0670			117.5481		
Red. masses	--	1.8956			1.5513			4.5385		
Frc consts	--	0.0098			0.0111			0.0369		
IR Inten	--	6.4560			3.8178			2.7909		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.05	-0.02	0.23
2	6	0.01	0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.06
3	6	0.03	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.12
4	6	0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.01	0.03	-0.01	-0.09
5	6	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.05	-0.01	-0.17
6	6	0.02	-0.02	0.02	-0.03	0.01	0.02	0.05	-0.01	-0.13
7	1	0.04	0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	-0.03	-0.02	0.21
8	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.15
9	1	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01	0.06	0.00	-0.27
10	6	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.04	-0.01	-0.16
11	1	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.02	-0.02	-0.03	-0.01	0.10
12	6	0.02	-0.02	0.03	-0.03	0.02	0.01	0.05	-0.01	-0.14
13	1	0.03	-0.02	0.01	-0.03	0.02	0.02	0.04	-0.01	-0.10

14	1	0.03	0.03	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.09	-0.02	0.43
15	6	0.01	-0.03	0.02	-0.01	0.02	0.00	0.04	-0.02	-0.12
16	6	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.03
17	6	0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.04	-0.01	-0.04
18	6	0.01	-0.05	0.02	0.00	0.03	-0.01	-0.02	-0.01	0.01
19	6	-0.01	-0.04	-0.03	0.01	0.03	0.00	-0.06	-0.01	0.16
20	1	-0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.04
21	8	0.04	-0.03	0.11	-0.05	0.02	-0.10	0.06	0.02	0.00
22	6	-0.02	0.03	-0.17	0.02	-0.01	0.11	0.04	-0.04	0.07
23	6	0.00	-0.05	-0.01	0.01	0.04	-0.01	-0.08	-0.01	0.17
24	1	0.02	-0.06	0.02	-0.01	0.04	-0.01	-0.04	0.01	0.02
25	1	-0.01	-0.04	-0.05	0.02	0.03	0.01	-0.11	-0.01	0.28
26	1	-0.09	-0.05	0.24	-0.03	-0.19	0.63	0.01	-0.10	0.28
27	1	0.47	-0.01	-0.43	0.56	0.15	-0.04	0.21	0.06	0.05
28	1	-0.39	0.19	-0.51	-0.37	0.01	-0.22	-0.10	-0.09	-0.03
29	1	0.00	-0.06	-0.02	0.02	0.04	-0.01	-0.13	0.01	0.29
30	47	-0.02	0.03	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.02	0.02	0.01

		7	8	9
		A	A	A
Frequencies	--	133.5288	179.9640	206.8942
Red. masses	--	11.5873	4.7921	4.3127
Frc consts	--	0.1217	0.0914	0.1088
IR Inten	--	5.1069	10.3690	2.4537

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.10	-0.09	0.06	-0.02	-0.03	-0.03	0.05	0.12	0.00
2	6	-0.02	-0.08	-0.01	-0.02	-0.03	0.03	-0.02	0.11	0.06
3	6	-0.13	-0.04	0.03	-0.02	-0.01	-0.04	0.09	0.06	-0.03
4	6	-0.08	0.03	-0.03	-0.02	0.00	-0.01	0.05	-0.02	-0.02
5	6	-0.02	0.04	-0.05	-0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.02	-0.04
6	6	-0.10	0.08	-0.03	-0.03	0.01	0.03	0.02	-0.04	0.06
7	1	-0.20	-0.05	0.06	-0.03	-0.01	-0.06	0.16	0.07	-0.04
8	6	0.02	-0.01	-0.06	-0.02	-0.01	0.03	-0.03	0.04	0.02
9	1	0.09	-0.01	-0.11	-0.02	-0.01	0.09	-0.10	0.03	0.06
10	6	-0.01	0.09	-0.03	-0.01	0.00	-0.02	0.04	-0.03	-0.06
11	1	0.01	-0.12	-0.01	-0.03	-0.04	0.08	-0.06	0.14	0.13
12	6	-0.09	0.11	-0.01	-0.05	0.00	0.10	0.00	-0.04	0.08
13	1	-0.14	0.07	-0.02	-0.01	0.02	0.00	0.01	-0.04	0.10
14	1	-0.13	-0.14	0.12	-0.02	-0.03	-0.05	0.06	0.16	0.00
15	6	-0.05	0.12	-0.02	-0.06	0.00	0.13	0.02	-0.04	0.02
16	6	0.03	0.10	0.02	0.06	0.00	-0.20	0.07	-0.03	-0.11
17	6	-0.04	0.05	0.19	0.01	-0.08	0.01	-0.08	0.03	0.04
18	6	-0.03	0.17	-0.01	-0.11	0.02	0.24	0.01	-0.02	0.08
19	6	0.03	0.14	0.07	0.02	0.02	-0.04	0.03	-0.02	0.05
20	1	0.05	0.07	0.03	0.15	-0.01	-0.44	0.12	-0.04	-0.25
21	8	0.04	-0.09	0.55	-0.04	-0.17	-0.06	-0.08	0.13	-0.03
22	6	-0.06	0.09	0.01	0.19	-0.04	-0.04	-0.31	0.02	0.01
23	6	0.00	0.18	0.05	-0.09	0.03	0.22	-0.02	-0.02	0.16
24	1	-0.03	0.20	-0.06	-0.12	0.04	0.23	-0.01	0.01	0.07
25	1	0.05	0.15	0.12	0.07	0.02	-0.15	0.03	-0.02	0.06
26	1	-0.08	0.13	0.01	0.26	-0.14	-0.14	-0.39	0.18	0.04
27	1	-0.05	-0.01	-0.06	0.18	-0.04	-0.03	-0.35	-0.06	-0.02
28	1	-0.10	0.18	-0.03	0.27	0.07	0.01	-0.36	-0.08	-0.02
29	1	0.01	0.22	0.08	-0.15	0.03	0.34	-0.06	-0.01	0.26
30	47	0.07	-0.10	-0.10	0.02	0.04	-0.04	0.02	-0.04	-0.03

		10	11	12
		A	A	A
Frequencies	--	244.0653	261.8021	279.5287
Red. masses	--	4.7508	4.8445	4.1856
Frc consts	--	0.1667	0.1956	0.1927
IR Inten	--	1.5389	2.8744	5.0003

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.15	0.03	0.04	0.01	-0.19	-0.01	0.05	-0.01
2	6	-0.08	0.15	-0.09	-0.01	0.00	-0.06	-0.07	0.03	0.13



3	6	0.02	0.05	0.07	-0.03	-0.02	0.10	0.05	0.01	-0.13
4	6	-0.01	-0.05	0.01	-0.05	-0.03	0.19	0.02	-0.03	-0.07
5	6	-0.06	-0.07	0.03	-0.05	-0.03	0.11	0.02	-0.03	-0.15
6	6	0.00	-0.06	-0.11	-0.03	-0.01	0.12	-0.06	-0.01	0.21
7	1	0.12	0.06	0.13	-0.03	-0.02	0.13	0.11	0.02	-0.19
8	6	-0.12	0.03	-0.06	-0.08	-0.02	0.19	-0.04	0.00	-0.05
9	1	-0.19	0.02	-0.12	-0.11	-0.03	0.31	-0.07	0.00	-0.05
10	6	-0.04	-0.09	0.06	0.02	-0.02	-0.13	0.03	-0.04	-0.13
11	1	-0.10	0.21	-0.18	0.01	0.01	-0.15	-0.14	0.05	0.33
12	6	-0.03	-0.07	-0.10	0.03	0.01	-0.15	-0.05	-0.01	0.13
13	1	0.01	-0.06	-0.20	-0.08	-0.01	0.24	-0.12	-0.01	0.43
14	1	-0.01	0.22	0.06	0.10	0.04	-0.43	0.00	0.07	0.02
15	6	-0.06	-0.04	0.01	0.04	0.00	-0.24	0.01	-0.02	-0.11
16	6	0.11	-0.07	0.08	0.06	-0.01	-0.14	0.04	-0.03	0.04
17	6	-0.01	-0.11	-0.05	0.04	0.01	-0.06	-0.04	-0.02	0.08
18	6	-0.02	0.10	0.04	0.01	0.03	-0.13	0.04	0.03	-0.15
19	6	0.22	0.06	-0.01	0.00	0.01	0.06	0.04	0.01	0.12
20	1	0.16	-0.16	0.14	0.09	-0.03	-0.20	0.03	-0.07	0.16
21	8	0.02	-0.11	0.04	0.09	0.02	0.05	-0.10	-0.09	-0.01
22	6	-0.02	-0.14	0.00	0.04	-0.01	0.01	0.11	0.03	-0.04
23	6	0.16	0.14	-0.01	-0.05	0.04	0.13	0.08	0.05	-0.06
24	1	-0.09	0.19	0.02	-0.04	0.08	-0.12	0.00	0.07	-0.15
25	1	0.33	0.07	-0.05	-0.01	0.02	0.17	0.02	0.02	0.30
26	1	-0.04	-0.14	0.04	0.04	-0.04	0.07	0.18	-0.06	-0.16
27	1	-0.02	-0.10	0.02	0.07	0.04	0.03	0.12	-0.03	-0.08
28	1	-0.05	-0.19	-0.01	0.02	-0.05	0.00	0.18	0.21	-0.01
29	1	0.20	0.21	-0.03	-0.12	0.09	0.31	0.11	0.10	-0.06
30	47	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.02

		13			14			15		
		A			A			A		
Frequencies	--	338.0517			387.1741			410.3202		
Red. masses	--	5.1842			5.0582			6.3788		
Frc consts	--	0.3491			0.4467			0.6328		
IR Inten	--	2.5112			2.6944			4.6494		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	0.04	0.01	0.01	-0.05	0.00	0.28	0.02	0.06
2	6	-0.14	0.03	-0.06	-0.08	-0.07	0.09	0.16	0.01	0.01
3	6	0.03	-0.06	0.02	0.04	-0.04	-0.11	0.26	-0.03	0.11
4	6	0.00	-0.13	-0.02	0.02	-0.02	0.06	0.16	-0.11	0.01
5	6	-0.09	-0.15	-0.01	-0.05	-0.02	-0.05	0.05	-0.11	0.01
6	6	0.00	-0.08	-0.04	0.03	-0.01	0.21	0.01	0.02	-0.04
7	1	0.10	-0.05	0.06	0.04	-0.04	-0.26	0.33	-0.03	0.17
8	6	-0.17	-0.07	-0.05	-0.03	-0.05	-0.12	0.07	-0.11	0.06
9	1	-0.25	-0.08	-0.07	0.03	-0.04	-0.23	0.01	-0.11	0.09
10	6	-0.04	-0.07	0.03	-0.09	0.00	0.01	-0.04	-0.07	-0.03
11	1	-0.18	0.10	-0.11	-0.13	-0.06	0.23	0.10	0.12	-0.03
12	6	0.04	0.05	0.04	0.09	-0.01	0.01	-0.05	0.05	-0.03
13	1	-0.07	-0.09	-0.11	-0.04	-0.02	0.36	-0.11	-0.01	-0.07
14	1	-0.02	0.13	0.05	0.02	-0.02	-0.01	0.30	0.07	0.06
15	6	-0.03	-0.01	0.06	-0.07	0.00	-0.01	-0.15	0.05	-0.07
16	6	0.02	-0.07	0.00	-0.08	0.02	0.05	-0.12	-0.07	0.03
17	6	0.05	0.18	0.05	0.18	-0.05	-0.03	-0.07	0.03	0.02
18	6	-0.03	-0.04	0.04	-0.12	0.09	0.09	-0.22	0.12	-0.01
19	6	0.04	-0.07	0.00	-0.01	0.09	-0.09	-0.08	0.02	-0.06
20	1	0.03	-0.07	-0.04	-0.08	-0.01	0.15	-0.15	-0.06	0.12
21	8	0.05	0.23	0.01	0.26	0.12	-0.03	-0.11	-0.05	0.02
22	6	0.19	0.26	0.02	-0.06	-0.11	-0.01	0.01	0.05	0.01
23	6	0.00	-0.04	0.02	-0.05	0.11	-0.02	-0.17	0.14	-0.09
24	1	-0.03	-0.03	0.03	-0.18	0.13	0.11	-0.24	0.13	0.01
25	1	0.07	-0.07	-0.05	0.06	0.10	-0.16	0.04	0.04	-0.04
26	1	0.27	0.13	-0.06	-0.17	0.09	0.07	0.04	-0.01	-0.01
27	1	0.22	0.26	0.01	-0.11	-0.18	-0.03	0.03	0.07	0.01
28	1	0.25	0.40	0.05	-0.15	-0.28	-0.06	0.03	0.11	0.02

29	1	0.02	-0.02	0.01	-0.05	0.11	-0.02	-0.15	0.20	-0.07
30	47	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
			16			17			18	
			A			A			A	
Frequencies	--	438.6776			460.7009			477.2970		
Red. masses	--	3.9248			3.5462			5.2244		
Frc consts	--	0.4450			0.4435			0.7012		
IR Inten	--	1.0408			4.3648			2.9753		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.03	-0.03	-0.01	0.01	-0.12	-0.03	-0.05	0.04
2	6	-0.03	-0.03	-0.11	0.00	0.01	0.01	0.08	-0.03	-0.03
3	6	-0.02	-0.04	0.14	-0.08	0.01	0.13	-0.08	0.06	-0.03
4	6	0.05	-0.01	-0.11	-0.01	0.03	-0.07	0.01	0.18	-0.04
5	6	-0.02	-0.01	-0.10	0.06	0.04	-0.19	0.02	0.12	0.04
6	6	0.08	-0.02	-0.07	-0.01	0.02	0.04	0.02	0.17	-0.01
7	1	-0.11	-0.06	0.40	-0.15	-0.01	0.38	-0.20	0.05	-0.03
8	6	-0.09	-0.04	0.12	-0.01	0.03	0.11	0.09	0.10	0.05
9	1	-0.15	-0.06	0.40	-0.07	0.01	0.36	0.20	0.11	0.11
10	6	-0.02	0.04	-0.08	0.05	-0.02	-0.13	-0.09	-0.18	0.00
11	1	-0.03	-0.01	-0.16	-0.01	-0.03	0.12	0.15	-0.10	-0.09
12	6	0.03	-0.02	0.20	0.00	0.00	-0.05	-0.05	-0.02	0.05
13	1	0.10	-0.03	-0.17	-0.02	0.03	0.20	0.12	0.19	0.01
14	1	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.20	-0.08	-0.14	0.10
15	6	-0.04	0.01	0.10	0.03	-0.02	-0.05	-0.18	-0.09	-0.04
16	6	-0.02	0.06	-0.08	-0.03	-0.03	0.16	0.05	-0.25	-0.01
17	6	0.10	-0.06	0.13	-0.01	0.02	-0.02	0.03	-0.03	0.09
18	6	0.02	0.05	-0.07	-0.08	-0.03	0.23	-0.16	-0.01	-0.10
19	6	-0.07	0.09	0.11	0.05	-0.04	-0.07	0.11	-0.14	0.06
20	1	0.02	0.04	-0.17	-0.11	-0.03	0.43	0.14	-0.34	-0.05
21	8	0.06	0.02	-0.07	-0.01	0.01	0.01	0.06	0.14	-0.02
22	6	-0.02	-0.07	-0.02	0.00	0.03	0.01	0.02	0.00	-0.02
23	6	0.02	0.07	-0.09	0.05	-0.04	-0.04	0.00	0.02	0.01
24	1	0.05	0.06	-0.11	-0.14	-0.04	0.33	-0.21	0.07	-0.13
25	1	-0.13	0.09	0.26	0.06	-0.04	-0.13	0.23	-0.12	0.12
26	1	-0.09	0.10	-0.07	0.01	0.00	0.01	0.04	0.02	-0.10
27	1	-0.06	-0.26	-0.13	0.00	0.06	0.03	0.04	-0.11	-0.10
28	1	-0.08	-0.02	-0.08	0.01	0.02	0.02	0.04	0.14	-0.03
29	1	0.07	0.04	-0.20	0.07	-0.06	-0.10	0.05	0.19	0.06
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
			19			20			21	
			A			A			A	
Frequencies	--	517.3501			547.6380			564.7057		
Red. masses	--	3.4929			3.1956			4.3762		
Frc consts	--	0.5508			0.5647			0.8222		
IR Inten	--	4.1853			4.9927			16.4118		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.02	-0.12	0.00	-0.01	-0.02	0.04	0.03	-0.04
2	6	-0.01	0.01	0.15	-0.01	-0.02	0.06	0.11	0.02	0.06
3	6	-0.01	0.00	0.05	-0.02	0.02	-0.01	-0.04	0.09	0.04
4	6	-0.05	-0.01	0.17	-0.05	0.01	0.16	-0.06	0.00	-0.06
5	6	0.03	-0.01	-0.05	-0.04	0.03	0.11	0.02	0.02	-0.09
6	6	-0.03	0.04	-0.06	0.08	-0.06	-0.12	-0.04	-0.14	0.03
7	1	0.03	0.01	-0.03	0.02	0.03	-0.25	-0.05	0.08	0.17
8	6	0.04	0.01	-0.08	0.02	0.01	-0.04	0.08	-0.03	0.00
9	1	0.05	0.01	-0.18	0.13	0.03	-0.34	0.03	-0.03	0.14
10	6	0.03	-0.03	-0.07	0.02	0.00	-0.17	-0.07	-0.01	0.10
11	1	-0.05	0.00	0.32	0.02	-0.02	-0.02	0.07	0.02	0.20
12	6	-0.04	0.05	-0.01	0.02	-0.09	0.04	-0.04	-0.18	-0.08
13	1	-0.02	0.02	-0.33	0.20	-0.06	-0.36	0.05	-0.12	0.18
14	1	0.09	0.03	-0.35	0.04	-0.02	-0.21	0.00	-0.08	-0.04
15	6	-0.08	0.03	0.18	0.05	-0.06	-0.10	-0.01	-0.10	0.09
16	6	0.04	-0.05	-0.09	-0.05	0.02	0.01	-0.08	0.02	-0.04
17	6	0.00	0.03	-0.12	-0.02	-0.05	0.18	-0.15	-0.07	-0.05

18	6	-0.04	0.00	0.04	-0.01	0.02	0.09	0.09	0.04	-0.02
19	6	-0.04	-0.05	0.16	-0.01	0.08	-0.02	-0.05	0.12	-0.01
20	1	0.06	-0.04	-0.18	-0.11	-0.01	0.31	0.02	-0.03	-0.22
21	8	0.05	0.00	0.03	-0.06	0.06	-0.03	-0.01	0.22	0.07
22	6	0.00	0.00	0.01	0.03	0.00	0.00	0.09	-0.08	-0.04
23	6	0.04	-0.01	-0.14	0.03	0.03	-0.02	0.00	0.05	0.02
24	1	0.04	-0.04	-0.03	-0.11	0.05	0.19	0.10	0.10	-0.11
25	1	-0.08	-0.05	0.34	-0.05	0.08	0.10	0.00	0.13	-0.10
26	1	0.00	-0.04	0.10	0.06	0.01	-0.17	0.28	-0.45	-0.15
27	1	-0.01	0.16	0.12	0.07	-0.23	-0.17	0.21	0.08	0.01
28	1	0.00	-0.16	0.03	0.04	0.29	-0.05	0.24	0.15	0.05
29	1	0.16	0.02	-0.34	-0.01	-0.02	0.02	-0.01	-0.05	-0.04
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00

		22			23			24		
		A			A			A		
Frequencies	--	595.2461			613.6506			634.9893		
Red. masses	--	3.5132			5.0904			6.5900		
Frc consts	--	0.7334			1.1294			1.5655		
IR Inten	--	3.7336			6.2253			5.6028		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.07	0.02	0.16	0.11	-0.11	0.04	0.19	0.02	0.07
2	6	0.08	0.04	-0.13	-0.12	-0.13	-0.05	0.13	-0.03	0.02
3	6	0.01	0.02	-0.14	0.08	0.00	0.00	0.00	0.25	0.00
4	6	-0.03	-0.03	-0.03	0.10	0.14	0.03	-0.12	0.04	-0.02
5	6	0.01	-0.02	0.11	-0.13	0.11	-0.02	-0.17	-0.03	-0.03
6	6	-0.06	-0.04	0.07	0.20	0.03	0.06	-0.09	0.00	-0.01
7	1	0.09	0.03	-0.28	-0.10	-0.02	-0.06	-0.03	0.24	-0.04
8	6	0.00	0.00	0.12	-0.09	0.00	-0.01	-0.01	-0.28	0.00
9	1	-0.03	0.00	0.07	0.09	0.01	0.05	0.01	-0.27	-0.02
10	6	0.07	-0.01	-0.14	-0.16	-0.01	-0.04	-0.10	0.15	-0.06
11	1	0.17	0.04	-0.43	-0.16	-0.07	-0.08	-0.03	0.20	-0.05
12	6	-0.02	-0.01	0.01	0.11	-0.11	-0.03	-0.05	0.05	-0.01
13	1	-0.08	-0.04	0.12	0.36	0.05	0.12	-0.13	-0.01	-0.01
14	1	-0.13	-0.03	0.33	0.14	-0.02	0.09	0.12	-0.15	0.05
15	6	0.03	0.00	0.00	-0.04	-0.14	0.00	-0.10	0.04	-0.05
16	6	-0.01	-0.01	-0.07	-0.03	0.02	-0.05	0.17	0.21	0.05
17	6	-0.03	0.00	-0.11	-0.08	0.07	-0.15	0.03	-0.02	0.04
18	6	-0.04	0.02	0.16	-0.01	-0.05	0.04	-0.16	-0.18	-0.01
19	6	-0.06	0.01	0.09	0.01	0.12	0.05	0.08	-0.05	0.05
20	1	-0.05	0.00	0.04	0.10	-0.11	-0.09	0.19	0.19	0.06
21	8	0.04	0.04	0.03	-0.08	-0.08	0.06	0.03	0.04	-0.02
22	6	0.01	-0.03	-0.01	-0.04	0.14	0.01	0.01	-0.05	0.00
23	6	0.04	0.01	-0.13	0.13	-0.01	0.00	0.14	-0.16	0.03
24	1	-0.06	0.00	0.21	-0.07	0.08	-0.04	-0.20	-0.13	-0.01
25	1	-0.11	0.02	0.30	-0.04	0.12	0.04	-0.19	-0.09	-0.03
26	1	0.05	-0.14	0.04	0.04	-0.07	0.12	-0.01	0.02	-0.04
27	1	0.03	0.15	0.10	-0.01	0.47	0.21	0.01	-0.16	-0.07
28	1	0.06	-0.12	0.04	0.05	-0.03	0.12	-0.02	0.01	-0.04
29	1	0.08	-0.03	-0.27	0.16	-0.06	-0.09	0.20	-0.02	0.05
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		25			26			27		
		A			A			A		
Frequencies	--	657.4456			670.9555			722.3440		
Red. masses	--	5.0533			3.0634			5.4608		
Frc consts	--	1.2869			0.8125			1.6788		
IR Inten	--	9.2663			14.9151			2.5521		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.02	0.05
2	6	-0.17	-0.05	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.07	-0.02
3	6	0.15	-0.19	0.02	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.16	0.00
4	6	0.14	0.01	0.05	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.11	0.01
5	6	0.03	0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.08	-0.04	-0.03
6	6	-0.02	0.20	0.00	0.01	0.00	-0.04	-0.08	0.23	-0.01

7	1	0.13	-0.20	-0.03	-0.01	0.01	0.01	-0.11	0.15	-0.07
8	6	-0.08	0.10	-0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.11	-0.20	-0.02
9	1	-0.02	0.11	0.00	0.02	-0.01	-0.07	-0.09	-0.20	-0.07
10	6	0.04	0.07	0.00	0.03	0.00	-0.11	0.03	-0.10	-0.04
11	1	-0.15	-0.06	-0.08	0.01	0.01	-0.05	-0.20	0.14	-0.11
12	6	-0.08	0.05	-0.07	-0.04	0.01	0.28	-0.08	0.09	-0.04
13	1	-0.06	0.19	0.01	0.09	-0.01	-0.38	-0.10	0.23	0.00
14	1	-0.14	0.20	0.05	0.01	-0.01	-0.04	0.14	-0.05	0.01
15	6	-0.01	0.07	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.11	0.02	0.06
16	6	0.08	0.10	0.02	-0.01	0.01	0.07	-0.12	-0.20	-0.03
17	6	-0.14	-0.10	0.02	-0.05	0.01	-0.18	0.01	-0.01	0.02
18	6	-0.03	-0.05	0.02	0.02	0.00	-0.11	0.30	0.09	0.08
19	6	0.01	-0.05	0.02	0.05	-0.01	-0.11	-0.04	-0.01	-0.05
20	1	0.03	0.17	0.00	-0.11	0.01	0.40	-0.15	-0.23	0.11
21	8	-0.06	0.18	0.05	0.04	0.03	0.05	0.01	0.02	-0.01
22	6	0.04	-0.23	-0.05	0.00	-0.05	-0.04	0.01	-0.06	0.00
23	6	0.03	-0.07	0.00	-0.04	0.00	0.09	-0.01	0.02	0.02
24	1	0.00	-0.09	0.03	-0.06	0.00	-0.01	0.34	-0.01	0.17
25	1	-0.11	-0.07	-0.02	0.02	-0.01	-0.03	0.12	0.01	0.08
26	1	0.18	-0.46	-0.20	0.06	-0.25	0.10	-0.02	0.01	-0.03
27	1	0.15	-0.22	-0.10	0.02	0.34	0.21	-0.01	-0.15	-0.06
28	1	0.14	0.06	-0.02	0.08	-0.30	0.07	-0.02	-0.03	-0.04
29	1	0.05	-0.04	-0.01	-0.16	0.03	0.34	-0.12	-0.21	0.04
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			28			29			30	
			A			A			A	
Frequencies	--	768.8319			783.0008			801.5626		
Red. masses	--	4.3747			4.5107			1.3491		
Frc consts	--	1.5236			1.6294			0.5107		
IR Inten	--	9.2660			7.9957			41.2519		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.00	0.10	0.03	0.02	-0.09	0.01	0.00	-0.02
2	6	0.06	0.04	-0.06	0.04	0.05	0.07	0.02	0.00	-0.08
3	6	0.06	-0.09	-0.05	0.04	-0.11	0.05	0.02	0.01	-0.07
4	6	-0.03	-0.06	0.16	0.04	-0.06	-0.16	-0.03	0.00	0.11
5	6	0.05	0.02	-0.17	-0.03	-0.01	0.17	0.00	0.00	-0.01
6	6	-0.10	0.04	-0.01	-0.15	0.10	-0.03	0.00	0.00	0.00
7	1	0.22	-0.07	-0.42	0.04	-0.12	0.46	-0.06	-0.01	0.22
8	6	0.02	0.08	0.10	0.06	0.06	-0.06	0.01	0.00	-0.05
9	1	0.00	0.08	0.21	0.08	0.07	-0.19	-0.13	-0.03	0.49
10	6	-0.05	-0.03	-0.14	-0.11	-0.05	0.03	0.00	0.00	0.00
11	1	0.15	0.00	-0.24	0.04	-0.01	0.25	-0.13	-0.03	0.50
12	6	-0.08	0.00	-0.10	-0.13	0.05	0.08	0.00	0.01	0.02
13	1	-0.17	0.02	-0.13	-0.29	0.08	-0.02	0.05	-0.01	-0.28
14	1	0.04	0.05	-0.06	0.00	0.05	0.10	-0.13	-0.03	0.52
15	6	-0.12	-0.07	0.17	-0.01	-0.09	-0.14	0.02	0.00	-0.04
16	6	-0.09	0.02	0.06	-0.09	0.00	-0.09	-0.01	-0.01	0.02
17	6	0.05	0.00	0.04	0.04	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
18	6	0.07	-0.07	-0.09	0.04	-0.08	0.07	0.00	0.00	0.01
19	6	0.01	0.13	-0.07	-0.04	0.18	0.01	0.00	0.00	0.01
20	1	-0.01	-0.09	0.12	-0.01	-0.13	0.04	0.02	-0.01	-0.08
21	8	0.04	-0.02	-0.03	0.07	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
22	6	0.01	0.06	0.03	0.01	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00
23	6	0.09	-0.06	0.13	0.19	-0.08	0.03	0.00	0.00	0.00
24	1	0.09	0.03	-0.24	-0.12	0.04	0.15	-0.01	0.00	0.02
25	1	-0.03	0.12	-0.23	-0.19	0.16	0.11	0.03	0.00	-0.08
26	1	-0.06	0.22	0.01	-0.05	0.13	0.06	0.00	0.01	-0.01
27	1	-0.04	-0.10	-0.06	-0.05	0.03	0.03	0.00	-0.03	-0.01
28	1	-0.07	0.08	-0.03	-0.03	-0.10	-0.01	-0.01	0.01	-0.01
29	1	0.08	-0.16	0.07	0.08	-0.25	0.11	0.02	-0.01	-0.05
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			31			32			33	
			A			A			A	

Frequencies	--	812.3718			859.6421			883.8541		
Red. masses	--	1.4530			1.9638			5.1875		
Frc consts	--	0.5650			0.8551			2.3876		
IR Inten	--	105.1002			5.8699			0.4197		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.06	-0.26	0.10	-0.06
2	6	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.02	0.13	0.11	0.03
3	6	0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.04	-0.08	-0.05	-0.02
4	6	0.01	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	0.06	0.10	0.02	0.05
5	6	-0.01	0.01	0.03	0.04	0.00	-0.13	0.05	-0.17	0.01
6	6	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.01	-0.02	0.18	0.25	0.03
7	1	-0.05	-0.01	0.19	0.12	0.02	-0.43	0.02	-0.03	-0.02
8	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.26	-0.01
9	1	0.01	0.01	0.03	-0.09	-0.02	0.31	-0.29	-0.29	-0.03
10	6	0.00	0.01	-0.01	-0.05	0.00	0.16	0.01	-0.04	0.00
11	1	-0.04	-0.02	0.14	0.02	0.01	-0.07	0.12	0.08	0.10
12	6	0.01	-0.03	-0.08	-0.01	0.01	0.06	0.11	0.03	-0.03
13	1	0.00	-0.02	0.11	0.02	0.01	-0.16	0.27	0.27	0.13
14	1	-0.03	-0.01	0.19	0.07	0.02	-0.29	-0.33	-0.05	-0.05
15	6	-0.04	0.00	0.11	0.03	-0.01	-0.11	-0.04	-0.02	0.03
16	6	0.04	0.01	-0.05	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	0.03	-0.02
17	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.01
18	6	0.01	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.02	-0.05	-0.06	-0.02
19	6	0.03	-0.01	-0.07	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.12	-0.03
20	1	-0.12	0.02	0.46	0.02	-0.02	-0.07	-0.03	0.01	0.11
21	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.01	0.02
22	6	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	-0.02
23	6	0.00	0.00	-0.04	0.05	0.00	-0.08	0.04	-0.02	0.02
24	1	-0.07	-0.05	0.14	-0.19	-0.03	0.34	-0.02	0.02	-0.16
25	1	-0.20	-0.01	0.55	-0.13	0.01	0.33	-0.13	0.11	0.06
26	1	0.00	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.05	-0.20	-0.05
27	1	0.00	-0.03	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.05	0.07	0.02
28	1	-0.01	0.06	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.06	0.05	0.04
29	1	-0.23	0.03	0.44	-0.19	0.00	0.42	0.02	-0.07	0.04
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			34			35			36	
			A			A			A	
Frequencies	--	921.9290			940.1399			950.1244		
Red. masses	--	1.4936			2.0648			2.3663		
Frc consts	--	0.7480			1.0753			1.2586		
IR Inten	--	2.1348			12.5087			5.9709		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01
2	6	0.01	0.00	-0.05	-0.01	0.01	0.00	0.03	0.00	0.01
3	6	-0.02	0.00	0.09	0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00
4	6	0.01	0.00	-0.05	0.01	0.02	0.00	0.01	-0.02	-0.01
5	6	-0.03	0.00	0.09	0.01	-0.02	0.04	-0.05	0.02	0.03
6	6	0.00	0.00	-0.06	-0.02	0.07	-0.02	0.05	-0.07	-0.02
7	1	0.12	0.02	-0.50	0.00	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00
8	6	0.03	0.01	-0.10	0.00	-0.03	-0.01	0.01	0.02	0.00
9	1	-0.13	-0.02	0.50	-0.04	-0.04	-0.05	0.04	0.03	-0.01
10	6	0.02	0.00	-0.05	0.05	0.01	-0.05	-0.04	0.01	-0.09
11	1	-0.09	-0.02	0.34	-0.03	0.03	0.00	0.05	-0.04	0.04
12	6	-0.01	-0.01	0.01	-0.07	-0.11	-0.01	0.09	0.11	-0.01
13	1	-0.09	0.01	0.44	0.06	0.09	0.13	-0.12	-0.08	0.24
14	1	0.07	0.01	-0.22	0.00	0.03	0.05	-0.04	-0.04	0.03
15	6	-0.01	0.00	0.03	-0.02	-0.05	0.03	-0.04	0.07	0.06
16	6	0.01	0.01	0.00	0.02	0.06	0.10	-0.08	-0.07	0.06
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.01	0.11	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.05	0.02	-0.04	0.03	-0.01	-0.04
19	6	0.01	0.00	-0.01	-0.03	-0.03	0.04	-0.01	0.00	0.04
20	1	-0.02	0.01	0.10	0.14	0.13	-0.46	0.11	-0.13	-0.41
21	8	0.01	0.00	0.00	0.06	-0.02	-0.02	-0.09	0.02	0.03

22	6	0.00	0.01	-0.01	-0.04	0.11	0.02	0.05	-0.12	-0.03
23	6	-0.02	0.00	0.02	-0.01	0.02	-0.08	0.09	-0.02	-0.04
24	1	0.06	0.01	-0.09	-0.25	-0.05	0.47	-0.21	-0.06	0.36
25	1	0.00	0.00	0.01	0.05	-0.03	-0.31	0.11	0.00	-0.24
26	1	0.00	-0.02	0.02	0.02	-0.03	0.01	-0.03	0.02	0.01
27	1	0.00	0.05	0.03	0.02	0.20	0.05	-0.03	-0.19	-0.03
28	1	0.01	-0.03	0.01	0.04	0.18	0.08	-0.04	-0.25	-0.09
29	1	0.05	-0.01	-0.12	-0.20	0.05	0.33	-0.14	0.01	0.47
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			37				38			39
			A				A			A
Frequencies	--		985.3982				1007.9567			1021.6207
Red. masses	--		1.6900				3.3255			1.4514
Frc consts	--		0.9668				1.9906			0.8925
IR Inten	--		13.9487				1.0148			4.7698

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.00	-0.05	0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.05
2	6	0.00	0.00	-0.02	-0.14	-0.11	-0.03	-0.01	0.01	0.09
3	6	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.16	0.00	0.03	-0.01	-0.10
4	6	-0.03	0.00	0.10	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.05
5	6	0.02	0.00	-0.06	0.15	-0.06	0.05	-0.02	0.00	0.01
6	6	0.02	0.00	-0.17	-0.03	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.06
7	1	0.01	0.00	-0.04	-0.04	0.16	0.01	-0.13	-0.04	0.52
8	6	-0.02	0.00	0.07	0.00	0.02	-0.01	0.02	0.01	-0.09
9	1	0.08	0.02	-0.32	0.03	0.01	0.01	-0.12	-0.02	0.43
10	6	-0.01	0.00	0.04	0.17	-0.06	0.02	-0.01	0.00	-0.01
11	1	-0.02	0.00	0.07	-0.14	-0.10	-0.07	0.12	0.05	-0.46
12	6	-0.02	0.00	0.06	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.02
13	1	-0.16	0.03	0.76	-0.06	-0.01	0.03	-0.06	0.01	0.27
14	1	-0.09	-0.02	0.40	0.03	0.04	0.03	0.07	0.01	-0.28
15	6	0.01	0.00	-0.02	0.04	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01
16	6	0.01	0.00	-0.02	-0.05	-0.03	0.06	0.00	0.00	0.03
17	6	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
18	6	0.00	0.00	0.01	-0.16	-0.13	0.00	0.01	0.01	0.02
19	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.18	-0.03	0.01	-0.01	-0.03
20	1	-0.02	0.01	0.05	0.09	-0.04	-0.32	0.05	0.00	-0.12
21	8	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	6	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02
23	6	0.00	0.00	0.01	0.04	0.00	-0.06	-0.01	0.00	0.00
24	1	0.02	0.00	-0.03	0.17	-0.08	-0.54	0.07	0.01	-0.08
25	1	-0.02	0.00	0.05	-0.04	0.19	0.12	-0.06	-0.01	0.18
26	1	0.00	-0.04	0.06	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.04
27	1	-0.02	0.13	0.06	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.06	0.03
28	1	0.03	-0.12	0.02	0.00	0.03	0.01	0.01	-0.07	0.01
29	1	0.03	-0.01	-0.06	-0.19	0.03	0.42	0.00	-0.01	-0.03
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			40				41			42
			A				A			A
Frequencies	--		1030.2947				1039.4447			1050.1820
Red. masses	--		1.6139				1.7588			1.4239
Frc consts	--		1.0094				1.1196			0.9252
IR Inten	--		3.0324				26.8316			13.4117

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.02	-0.03
2	6	-0.06	-0.05	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.04	0.02
3	6	0.00	0.07	-0.03	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.04	0.02
4	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.00
5	6	0.07	-0.03	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01
6	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.03	0.02	0.00	-0.02	0.01
7	1	-0.02	0.07	0.15	0.03	-0.01	-0.10	0.08	0.05	-0.09
8	6	0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
9	1	0.00	-0.01	0.13	0.02	-0.01	-0.07	0.07	0.01	0.04
10	6	0.05	-0.03	0.04	0.01	-0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.00

11	1	-0.03	-0.06	-0.09	-0.02	0.03	0.02	0.04	-0.08	-0.12
12	6	-0.01	-0.01	-0.01	-0.05	-0.07	-0.01	0.03	0.05	0.00
13	1	0.00	0.01	0.07	0.08	0.04	-0.06	-0.06	-0.03	-0.03
14	1	0.03	0.04	-0.12	-0.02	0.02	0.09	-0.05	0.01	0.16
15	6	-0.01	-0.01	0.02	0.00	-0.08	0.00	-0.02	0.04	0.00
16	6	0.04	0.01	-0.08	0.05	0.05	0.08	-0.03	-0.02	0.04
17	6	0.01	0.02	0.00	0.01	0.05	-0.01	0.00	-0.01	0.00
18	6	-0.01	-0.03	-0.08	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.05
19	6	-0.03	0.07	0.07	0.03	0.03	-0.06	0.03	0.03	-0.07
20	1	-0.11	0.00	0.46	0.19	0.02	-0.29	0.10	-0.07	-0.25
21	8	-0.03	0.01	0.01	-0.06	0.03	0.03	0.02	-0.02	-0.01
22	6	0.04	-0.01	-0.01	0.12	-0.01	-0.02	-0.06	-0.01	0.02
23	6	-0.02	-0.01	0.03	-0.09	0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.08
24	1	-0.36	-0.09	0.48	-0.01	-0.06	0.09	-0.27	-0.06	0.42
25	1	0.12	0.07	-0.38	-0.10	0.04	0.37	-0.12	0.04	0.42
26	1	-0.05	0.13	0.06	-0.14	0.44	0.17	0.08	-0.23	-0.10
27	1	-0.06	-0.06	0.00	-0.17	-0.18	0.00	0.09	0.06	-0.02
28	1	-0.04	-0.16	-0.05	-0.12	-0.45	-0.16	0.06	0.25	0.07
29	1	0.07	-0.05	-0.21	-0.03	-0.07	-0.23	0.19	-0.09	-0.41
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

43

44

45

		A	A	A
Frequencies	--	1055.2519	1065.7379	1067.8136
Red. masses	--	1.3879	2.3864	1.8371
Frc consts	--	0.9106	1.5969	1.2342
IR Inten	--	0.4490	0.7643	1.5672

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.00	0.11	-0.13	0.13	-0.02	0.00	0.00	-0.01
2	6	0.02	0.00	-0.11	-0.07	-0.14	-0.02	-0.02	-0.02	0.00
3	6	0.02	0.01	-0.06	0.06	0.06	0.02	-0.01	0.03	0.01
4	6	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01
5	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.01	0.03	-0.01	0.01
6	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.04
7	1	-0.06	-0.01	0.33	0.41	0.11	0.12	0.03	0.03	-0.06
8	6	-0.01	0.00	0.06	0.08	-0.09	0.01	0.00	0.01	0.00
9	1	0.10	0.02	-0.29	0.36	-0.07	0.11	-0.02	0.00	0.01
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.01	0.02	0.01	0.00
11	1	-0.14	-0.06	0.56	0.05	-0.33	-0.02	0.01	-0.04	-0.03
12	6	0.00	0.01	0.00	-0.04	-0.03	0.02	0.00	-0.01	-0.06
13	1	-0.02	0.00	0.04	-0.01	-0.01	0.06	0.03	-0.01	-0.20
14	1	0.14	0.05	-0.57	-0.06	0.35	0.00	-0.01	0.00	0.05
15	6	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.02	-0.02	0.02	0.00
16	6	-0.01	0.00	0.02	-0.04	0.01	-0.01	-0.04	0.00	-0.01
17	6	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.05	0.04	-0.03	0.16
18	6	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.08	0.03	0.00	0.04	0.00
19	6	0.01	0.01	-0.02	-0.03	-0.11	-0.02	-0.02	-0.05	-0.02
20	1	0.04	-0.01	-0.13	-0.08	0.08	-0.05	-0.11	0.09	-0.06
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.02	-0.02
22	6	-0.01	0.00	-0.01	0.03	0.01	0.04	0.00	0.02	-0.15
23	6	-0.01	0.00	0.02	0.08	0.00	0.02	0.07	-0.01	0.03
24	1	-0.04	-0.01	0.07	-0.01	0.27	-0.17	-0.07	0.15	-0.04
25	1	-0.04	0.01	0.14	-0.20	-0.15	-0.03	-0.14	-0.07	0.01
26	1	0.01	-0.05	0.01	-0.04	0.19	-0.02	-0.01	-0.17	0.25
27	1	0.01	0.06	0.02	-0.03	-0.20	-0.07	-0.09	0.56	0.27
28	1	0.02	-0.01	0.02	-0.08	0.05	-0.06	0.14	-0.52	0.06
29	1	0.04	-0.02	-0.09	0.10	0.07	0.08	0.11	0.05	0.02
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

46

47

48

		A	A	A
Frequencies	--	1069.8992	1126.4390	1177.5175
Red. masses	--	1.9213	2.6404	1.5135
Frc consts	--	1.2958	1.9739	1.2365
IR Inten	--	3.3849	1.0874	6.2297

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	0.07	-0.02	-0.01	-0.06	0.00	0.03	0.03	0.01
2	6	-0.01	-0.05	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.04	0.03	-0.01
3	6	0.04	-0.01	0.01	-0.01	0.14	0.00	-0.04	-0.07	-0.01
4	6	0.00	-0.01	0.00	0.04	-0.07	0.01	-0.04	0.04	-0.01
5	6	-0.06	0.05	-0.02	0.00	-0.12	-0.01	0.04	0.04	0.01
6	6	-0.02	0.00	0.01	0.03	0.03	0.00	-0.01	-0.04	0.00
7	1	0.26	0.02	0.04	0.07	0.16	0.03	-0.35	-0.11	-0.09
8	6	0.05	-0.04	0.01	-0.02	0.13	0.00	0.05	-0.06	0.01
9	1	0.33	-0.01	0.09	-0.06	0.13	-0.02	0.24	-0.05	0.06
10	6	-0.08	0.00	-0.02	-0.06	-0.11	-0.02	0.03	-0.05	0.01
11	1	0.06	-0.15	-0.01	0.16	-0.24	0.03	-0.25	0.31	-0.04
12	6	0.01	0.03	-0.02	0.03	0.05	0.01	0.02	0.02	0.00
13	1	-0.09	-0.02	-0.08	-0.11	0.01	-0.03	-0.01	-0.04	-0.01
14	1	-0.03	0.20	0.03	-0.14	-0.40	-0.06	0.18	0.40	0.07
15	6	0.02	0.01	0.00	-0.09	-0.05	-0.03	-0.03	-0.02	0.00
16	6	0.08	-0.01	0.01	0.12	0.09	0.04	0.06	0.00	0.02
17	6	0.02	-0.01	0.06	0.01	0.04	0.00	0.02	0.05	0.01
18	6	0.03	-0.07	0.03	0.08	0.10	0.05	0.00	0.06	0.00
19	6	0.03	0.08	0.04	-0.04	-0.01	0.00	-0.03	0.01	-0.01
20	1	0.27	-0.27	0.14	0.16	0.06	0.05	0.16	-0.12	0.05
21	8	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
22	6	-0.03	0.00	-0.05	-0.02	-0.03	0.00	-0.02	-0.03	0.00
23	6	-0.12	0.01	-0.07	-0.04	-0.05	-0.04	0.00	-0.04	-0.01
24	1	0.28	-0.33	0.01	0.07	0.25	-0.12	-0.16	0.30	-0.09
25	1	0.27	0.12	-0.05	-0.34	-0.05	-0.17	-0.26	-0.02	-0.10
26	1	0.03	-0.19	0.04	0.03	-0.12	-0.05	0.03	-0.12	-0.04
27	1	0.01	0.24	0.09	0.05	0.00	-0.01	0.04	0.02	0.00
28	1	0.08	-0.08	0.06	0.03	0.07	0.02	0.03	0.03	0.02
29	1	-0.25	-0.13	0.03	-0.23	-0.42	0.02	-0.13	-0.33	-0.02
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

49

50

51

	A	A	A
Frequencies	-- 1205.5450	1220.2760	1222.4001
Red. masses	-- 2.8914	1.1234	1.1058
Frc consts	-- 2.4759	0.9856	0.9735
IR Inten	-- 44.7585	0.1839	1.1279

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.03	0.01
2	6	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	0.01
3	6	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
4	6	0.08	0.04	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
5	6	0.04	-0.03	0.01	-0.02	0.03	0.00	0.00	-0.03	0.00
6	6	0.04	-0.08	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
7	1	-0.25	-0.02	-0.06	0.20	0.01	0.05	-0.35	-0.03	-0.09
8	6	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00
9	1	-0.12	-0.01	-0.04	-0.04	-0.01	-0.01	-0.32	-0.01	-0.08
10	6	-0.03	0.03	-0.01	0.04	0.04	0.01	-0.02	0.00	-0.01
11	1	0.09	-0.10	0.02	-0.02	0.03	0.00	0.35	-0.46	0.06
12	6	-0.06	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
13	1	0.32	-0.05	0.06	0.07	0.01	0.02	-0.06	0.00	-0.02
14	1	0.01	0.05	0.01	-0.05	-0.12	-0.02	0.22	0.52	0.08
15	6	-0.09	0.26	-0.05	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00
16	6	0.02	-0.08	0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.00
17	6	-0.06	-0.18	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.00
18	6	0.01	0.04	0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.01
19	6	-0.02	0.04	0.00	0.04	0.00	0.02	0.02	0.00	0.01
20	1	0.22	-0.33	0.06	-0.17	0.19	-0.06	-0.11	0.16	-0.03
21	8	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	6	0.06	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
23	6	0.04	-0.07	0.02	0.00	-0.05	-0.01	-0.01	0.01	0.00
24	1	0.20	-0.15	0.01	-0.22	0.31	-0.12	0.00	0.00	-0.01
25	1	-0.13	0.03	-0.04	0.55	0.07	0.18	0.18	0.02	0.06



26	1	-0.08	0.30	0.13	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.04	-0.02		
27	1	-0.13	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00		
28	1	-0.07	-0.07	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00		
29	1	-0.11	-0.47	-0.02	-0.21	-0.56	-0.03	-0.03	-0.05	-0.01		
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
				52					53			
				A					A			
Frequencies	--	1264.7105			1287.1507			1297.3655				
Red. masses	--	1.5566			1.6802			2.5858				
Frc consts	--	1.4669			1.6401			2.5643				
IR Inten	--	62.2685			97.5208			21.8437				
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z		
1	6	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.03	-0.02	0.01		
2	6	0.02	0.01	0.00	0.04	0.00	0.01	-0.02	0.04	0.00		
3	6	0.04	-0.04	0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.01		
4	6	-0.14	0.03	-0.03	0.03	0.01	0.01	-0.11	-0.11	-0.03		
5	6	-0.05	-0.01	-0.01	-0.07	0.06	-0.02	-0.13	-0.15	-0.04		
6	6	0.01	0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.06	0.09	0.01		
7	1	0.44	0.00	0.11	0.00	-0.01	0.00	-0.21	-0.01	-0.05		
8	6	-0.01	0.02	0.00	-0.06	-0.01	-0.02	0.07	0.08	0.02		
9	1	-0.17	0.00	-0.05	-0.12	-0.01	-0.03	0.71	0.15	0.19		
10	6	0.05	-0.03	0.02	0.05	0.03	0.01	0.01	-0.05	0.01		
11	1	0.20	-0.24	0.04	0.21	-0.22	0.04	0.00	0.02	0.00		
12	6	-0.05	-0.01	-0.01	0.05	0.02	0.00	0.08	0.06	0.00		
13	1	0.65	0.12	0.13	-0.44	-0.05	-0.07	0.18	0.12	0.05		
14	1	0.08	0.11	0.03	-0.03	-0.07	-0.01	0.15	0.28	0.05		
15	6	0.04	0.04	0.01	0.13	-0.03	0.06	0.06	0.02	0.02		
16	6	0.02	-0.03	0.01	0.02	-0.04	0.01	-0.05	0.04	-0.01		
17	6	0.03	0.06	0.01	-0.05	-0.09	0.00	-0.05	-0.14	-0.02		
18	6	-0.03	0.02	-0.02	-0.05	0.00	-0.03	-0.02	0.02	-0.01		
19	6	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.00	0.01		
20	1	0.11	-0.15	0.03	0.26	-0.35	0.08	-0.09	0.10	-0.04		
21	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.02	0.01		
22	6	-0.02	-0.03	0.00	0.02	0.03	0.00	0.03	0.05	0.01		
23	6	0.00	-0.02	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.00		
24	1	-0.05	0.04	-0.01	-0.38	0.41	-0.12	-0.05	0.04	0.01		
25	1	-0.29	-0.01	-0.10	-0.26	-0.02	-0.09	0.10	0.01	0.04		
26	1	0.00	-0.05	-0.04	-0.02	0.08	0.06	-0.05	0.17	0.09		
27	1	0.06	0.01	-0.01	-0.07	-0.01	0.02	-0.08	-0.02	0.01		
28	1	0.03	0.02	0.03	-0.03	-0.03	-0.02	-0.03	-0.02	-0.02		
29	1	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.03	0.08	0.03		
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
				55					56			
				A					A			
Frequencies	--	1335.9939			1351.9279			1391.0478				
Red. masses	--	2.6087			2.3416			4.9983				
Frc consts	--	2.7434			2.5216			5.6985				
IR Inten	--	28.2022			53.4969			29.1965				
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z		
1	6	0.04	0.01	0.01	0.04	-0.03	0.01	0.01	0.01	0.00		
2	6	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.06	0.00		
3	6	-0.06	0.03	-0.01	-0.07	-0.02	-0.02	0.04	-0.02	0.01		
4	6	-0.02	-0.12	-0.01	-0.14	-0.02	-0.03	-0.04	-0.03	-0.01		
5	6	0.12	-0.10	0.03	0.09	0.06	0.03	-0.15	0.00	-0.04		
6	6	-0.02	0.09	0.00	0.02	0.04	0.00	0.06	0.02	0.01		
7	1	-0.07	0.03	-0.02	0.58	0.04	0.14	-0.15	-0.04	-0.04		
8	6	-0.01	0.05	0.00	0.03	0.00	0.01	-0.05	0.00	-0.02		
9	1	0.04	0.05	0.01	-0.47	-0.04	-0.12	0.46	0.05	0.13		
10	6	-0.09	0.23	-0.03	-0.03	0.02	-0.01	0.25	0.18	0.07		
11	1	-0.08	0.06	-0.02	-0.16	0.18	-0.03	0.26	-0.28	0.05		
12	6	0.02	-0.09	0.00	0.17	0.07	0.02	0.01	-0.02	0.00		
13	1	0.25	0.14	0.04	-0.22	0.01	-0.04	-0.20	-0.02	-0.05		
14	1	0.05	0.02	0.02	0.17	0.26	0.06	-0.05	-0.14	-0.02		

15	6	0.01	-0.01	0.00	-0.09	-0.04	-0.03	-0.23	-0.07	-0.08
16	6	-0.02	-0.03	0.00	0.04	-0.02	0.01	0.12	-0.19	0.04
17	6	0.03	0.07	0.00	-0.04	-0.13	-0.03	0.01	0.03	-0.01
18	6	0.04	-0.05	0.02	0.03	-0.01	0.01	0.07	-0.14	0.03
19	6	-0.04	-0.06	-0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.17	0.02	-0.06
20	1	0.40	-0.58	0.13	-0.03	0.05	0.00	-0.14	0.15	0.00
21	8	-0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00
22	6	-0.01	-0.02	0.00	0.02	0.04	0.01	0.00	0.00	0.00
23	6	-0.01	0.03	-0.01	0.00	0.04	0.00	0.07	0.20	0.04
24	1	-0.20	0.30	-0.11	0.11	-0.10	0.04	0.06	-0.11	0.00
25	1	0.27	-0.02	0.10	-0.09	-0.02	-0.03	-0.14	0.03	-0.04
26	1	0.01	-0.03	-0.05	-0.02	0.08	0.08	0.03	-0.06	-0.02
27	1	0.05	-0.01	-0.02	-0.08	-0.04	0.01	0.01	-0.03	-0.02
28	1	0.01	-0.01	0.01	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01	-0.04	0.00
29	1	0.01	0.06	-0.02	-0.04	-0.07	-0.02	-0.07	-0.25	-0.09
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

58

59

60

		A			A			A		
Frequencies	--	1410.7184			1427.7890			1437.0057		
Red. masses	--	4.4041			1.8253			1.5489		
Frc consts	--	5.1640			2.1923			1.8844		
IR Inten	--	70.5013			8.9403			36.3276		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.10	-0.15	-0.03	0.02	0.06	0.01	0.01	0.04	0.01
2	6	-0.13	0.12	-0.03	0.04	-0.04	0.01	0.02	-0.03	0.00
3	6	0.19	0.04	0.05	-0.05	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01
4	6	-0.04	0.21	0.00	0.04	-0.07	0.01	0.03	-0.04	0.00
5	6	0.00	-0.15	-0.01	0.02	0.08	0.01	0.01	0.05	0.01
6	6	-0.01	-0.12	-0.01	0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.03	0.00
7	1	-0.14	0.01	-0.02	-0.08	-0.02	-0.02	-0.06	-0.01	-0.02
8	6	0.20	-0.02	0.05	-0.06	-0.01	-0.02	-0.04	-0.01	-0.01
9	1	-0.34	-0.08	-0.10	0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
10	6	-0.02	0.05	-0.01	0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.03	0.00
11	1	0.01	-0.09	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.02	0.17	-0.01	-0.04	0.13	-0.01	-0.04	0.11	-0.01
13	1	0.09	-0.11	0.03	0.42	0.03	0.10	0.36	0.02	0.08
14	1	-0.03	0.03	-0.01	-0.02	-0.06	-0.01	-0.02	-0.05	-0.01
15	6	-0.05	-0.07	-0.01	-0.02	-0.05	0.00	-0.02	-0.03	0.00
16	6	0.02	0.02	0.01	0.03	0.00	0.01	0.02	0.01	0.01
17	6	-0.06	-0.06	0.02	-0.03	-0.04	0.01	-0.02	-0.03	0.00
18	6	0.10	-0.08	0.04	0.05	-0.05	0.02	0.04	-0.04	0.02
19	6	-0.08	-0.01	-0.03	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.01	-0.01
20	1	0.18	-0.19	0.07	-0.02	0.08	0.00	0.01	0.04	0.00
21	8	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
22	6	0.02	0.00	-0.01	0.02	-0.09	-0.02	-0.02	0.12	0.01
23	6	-0.03	0.00	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01
24	1	-0.19	0.31	-0.08	-0.11	0.16	-0.04	-0.09	0.15	-0.04
25	1	0.29	0.05	0.11	0.05	0.03	0.02	0.08	0.03	0.03
26	1	-0.04	0.07	0.08	-0.22	0.42	0.02	0.18	-0.40	0.11
27	1	-0.10	0.05	0.07	-0.02	0.39	0.29	-0.03	-0.44	-0.32
28	1	-0.02	0.07	-0.04	0.00	0.42	-0.10	0.06	-0.45	0.15
29	1	0.11	0.39	0.03	0.04	0.18	0.01	0.05	0.19	0.02
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

61

62

63

		A			A			A		
Frequencies	--	1467.8499			1478.0896			1481.4674		
Red. masses	--	2.2495			2.2101			2.6224		
Frc consts	--	2.8556			2.8449			3.3910		
IR Inten	--	10.3906			70.2298			27.9321		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.03	0.00	-0.03	-0.02	-0.01	-0.09	-0.13	-0.03
2	6	0.07	-0.02	0.02	0.03	-0.05	0.01	0.09	-0.06	0.02
3	6	-0.09	-0.02	-0.02	-0.01	0.02	0.00	-0.04	0.09	0.00

4	6	0.04	0.11	0.01	0.06	0.03	0.02	0.09	-0.11	0.02
5	6	-0.02	-0.06	-0.01	-0.01	-0.08	-0.01	-0.13	0.03	-0.03
6	6	-0.03	-0.01	0.00	-0.07	-0.01	-0.01	0.13	0.00	0.02
7	1	0.43	0.04	0.10	0.04	0.03	0.01	0.07	0.13	0.02
8	6	-0.07	0.03	-0.02	0.03	0.04	0.01	0.05	0.05	0.02
9	1	0.23	0.07	0.07	-0.02	0.05	0.00	-0.34	0.03	-0.09
10	6	0.01	-0.09	0.00	-0.11	0.04	-0.03	0.09	0.04	0.03
11	1	-0.02	0.12	0.00	-0.16	0.22	-0.03	-0.26	0.43	-0.04
12	6	0.03	-0.09	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.15	0.01	-0.02
13	1	-0.20	-0.04	-0.06	0.23	0.04	0.04	-0.12	-0.05	-0.01
14	1	0.11	0.22	0.04	0.02	0.14	0.01	0.18	0.56	0.08
15	6	-0.03	0.14	-0.01	0.09	0.03	0.03	-0.01	-0.04	-0.01
16	6	0.06	0.01	0.02	0.05	-0.10	0.02	-0.02	-0.01	-0.01
17	6	0.01	0.03	0.00	-0.07	0.03	0.03	-0.01	0.04	0.02
18	6	0.07	-0.07	0.03	0.00	-0.11	-0.01	-0.01	0.03	0.00
19	6	-0.10	0.04	-0.04	0.05	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00
20	1	-0.02	0.14	0.00	-0.32	0.36	-0.10	0.11	-0.18	0.04
21	8	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.02	-0.02	0.03	-0.01	-0.01
22	6	0.01	0.00	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	6	-0.02	-0.06	-0.01	0.00	0.14	0.00	-0.01	-0.04	0.00
24	1	-0.21	0.35	-0.11	-0.19	0.11	-0.05	0.05	-0.05	0.02
25	1	0.29	0.11	0.11	-0.43	-0.07	-0.15	0.01	0.01	0.00
26	1	0.03	-0.02	-0.07	0.06	-0.14	0.06	0.04	-0.07	-0.06
27	1	-0.02	0.04	0.04	-0.23	-0.06	0.07	-0.04	0.02	0.03
28	1	-0.08	0.01	-0.06	-0.13	0.02	-0.13	-0.07	-0.02	-0.06
29	1	0.15	0.39	0.05	-0.17	-0.28	-0.09	0.03	0.06	0.02
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

64

65

66

		A			A			A		
Frequencies		--	1486.8992		1504.1318		1524.9519			
Red. masses		--	1.2168		1.0765		2.5753			
Frc consts		--	1.5851		1.4350		3.5285			
IR Inten		--	35.2605		23.2329		17.6823			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.09	0.00
2	6	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.07	-0.01
3	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.10	0.00	0.02
4	6	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.00	-0.09	-0.10	-0.02
5	6	0.02	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.05	0.07	-0.01
6	6	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.06	0.01
7	1	0.02	-0.01	0.00	0.04	0.01	0.01	-0.39	-0.07	-0.10
8	6	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.12	0.02	0.03
9	1	0.06	-0.01	0.01	0.02	0.01	0.01	-0.38	-0.03	-0.10
10	6	0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
11	1	0.06	-0.09	0.01	0.00	0.02	0.00	-0.15	0.07	-0.03
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.09	0.01
13	1	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.02	-0.08	0.04	-0.02
14	1	-0.01	-0.07	-0.01	0.02	0.04	0.01	-0.15	-0.23	-0.05
15	6	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.11	-0.02
16	6	-0.02	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.08	0.01
17	6	-0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	-0.02	0.09	-0.01	-0.03
18	6	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.06	-0.04	0.03
19	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.04	0.08	0.02
20	1	0.08	-0.09	0.02	0.02	-0.02	0.00	-0.18	0.20	-0.05
21	8	0.04	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.05	0.01	0.02
22	6	0.06	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.06	0.00	0.01	0.00
23	6	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.07	-0.09	-0.03
24	1	0.07	-0.08	0.04	0.01	-0.02	0.00	-0.14	0.30	-0.10
25	1	0.09	0.00	0.03	0.02	0.00	0.01	-0.15	0.07	-0.05
26	1	0.19	-0.37	0.06	-0.17	-0.06	0.69	0.06	-0.15	0.06
27	1	-0.59	-0.05	0.26	-0.26	-0.25	-0.06	-0.18	-0.02	0.07
28	1	-0.39	0.18	-0.38	0.40	0.37	0.23	-0.08	0.15	-0.08
29	1	0.02	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.06	0.31	0.03

30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			67			68			69	
			A			A			A	
Frequencies	--	1562.6740			1566.3408			1610.9225		
Red. masses	--	3.3701			4.4450			7.0096		
Frc consts	--	4.8488			6.4254			10.7176		
IR Inten	--	91.3273			159.7190			59.2446		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.13	0.00	-0.05	0.01	-0.01	0.03	-0.16	0.00
2	6	-0.05	0.16	0.00	0.07	-0.08	0.01	-0.17	0.22	-0.03
3	6	-0.08	0.03	-0.02	0.05	0.01	0.01	-0.05	0.07	-0.01
4	6	0.04	-0.01	0.01	0.04	0.05	0.01	-0.01	-0.23	-0.01
5	6	0.10	0.01	0.03	-0.04	-0.02	-0.01	0.04	0.23	0.02
6	6	0.07	-0.03	0.01	-0.11	-0.03	-0.02	0.13	0.05	0.03
7	1	0.25	0.08	0.06	-0.11	0.00	-0.03	0.01	0.09	0.01
8	6	-0.06	-0.07	-0.02	-0.02	0.04	0.00	0.11	-0.12	0.02
9	1	0.38	-0.04	0.10	-0.08	0.04	-0.02	-0.09	-0.17	-0.04
10	6	-0.03	0.08	-0.01	0.01	-0.05	0.00	-0.17	-0.19	-0.05
11	1	0.25	-0.24	0.05	-0.13	0.20	-0.02	0.24	-0.33	0.04
12	6	-0.10	0.04	-0.01	-0.01	0.05	0.01	-0.11	-0.05	-0.02
13	1	-0.10	-0.07	0.00	0.22	0.02	0.06	-0.13	0.00	-0.01
14	1	0.15	0.16	0.05	-0.04	0.07	-0.01	0.13	0.07	0.04
15	6	-0.03	-0.02	-0.01	0.08	-0.04	0.03	0.17	0.16	0.05
16	6	-0.06	-0.05	-0.02	0.02	0.06	0.01	0.15	0.01	0.05
17	6	0.17	-0.06	-0.05	0.34	-0.14	-0.10	-0.01	0.01	0.00
18	6	0.05	-0.04	0.03	-0.06	-0.02	-0.02	-0.04	-0.09	-0.03
19	6	0.18	0.04	0.07	-0.12	-0.07	-0.04	-0.24	-0.06	-0.09
20	1	-0.20	0.12	-0.07	0.18	-0.13	0.05	0.03	0.20	0.00
21	8	-0.09	0.03	0.03	-0.19	0.07	0.07	0.02	0.00	0.00
22	6	-0.01	0.02	0.01	-0.01	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
23	6	-0.09	-0.04	-0.04	0.08	0.12	0.04	0.11	0.16	0.05
24	1	-0.09	0.20	-0.08	0.02	-0.12	-0.01	-0.14	0.01	-0.02
25	1	-0.36	-0.04	-0.13	0.21	-0.03	0.07	0.30	0.02	0.11
26	1	0.08	-0.16	-0.04	0.18	-0.32	-0.09	0.00	-0.01	0.01
27	1	-0.12	0.03	0.07	-0.27	0.06	0.15	0.01	0.00	-0.01
28	1	-0.11	0.12	-0.08	-0.25	0.22	-0.20	0.02	0.00	0.01
29	1	-0.06	0.12	-0.01	-0.04	-0.24	-0.03	0.00	-0.20	-0.03
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			70			71			72	
			A			A			A	
Frequencies	--	1626.9113			1637.4424			1658.2091		
Red. masses	--	4.9311			5.8942			5.7240		
Frc consts	--	7.6899			9.3113			9.2732		
IR Inten	--	35.6724			17.3615			37.1828		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.09	0.17	0.03	-0.05	-0.11	-0.02	-0.18	-0.12	-0.05
2	6	-0.01	-0.09	-0.01	-0.01	0.07	0.00	0.19	-0.06	0.04
3	6	-0.07	-0.10	-0.02	0.05	0.07	0.01	0.31	0.07	0.08
4	6	-0.10	0.09	-0.02	0.08	-0.10	0.02	-0.24	-0.01	-0.06
5	6	-0.01	-0.10	-0.01	-0.07	0.14	-0.01	0.21	0.05	0.06
6	6	0.26	-0.03	0.05	-0.22	0.04	-0.04	0.11	0.02	0.02
7	1	0.12	-0.10	0.02	-0.10	0.06	-0.02	-0.42	0.00	-0.10
8	6	0.04	0.05	0.01	0.01	-0.05	0.00	-0.29	0.00	-0.07
9	1	-0.12	0.03	-0.03	-0.10	-0.06	-0.03	0.40	0.06	0.11
10	6	0.02	-0.10	0.01	0.15	-0.16	0.04	-0.06	-0.04	-0.02
11	1	-0.08	-0.02	-0.02	0.05	-0.02	0.01	-0.02	0.27	0.01
12	6	-0.20	0.04	-0.03	0.20	-0.10	0.03	-0.03	0.00	-0.01
13	1	-0.46	-0.16	-0.07	0.34	0.14	0.04	-0.21	-0.03	-0.03
14	1	-0.07	-0.25	-0.03	0.04	0.14	0.02	-0.06	0.27	0.00
15	6	0.00	0.08	-0.01	-0.16	0.12	-0.05	0.00	0.05	0.00
16	6	-0.13	0.15	-0.04	-0.20	0.20	-0.06	0.00	0.03	0.00
17	6	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.01	-0.04	0.01	0.01
18	6	0.06	-0.18	0.03	0.10	-0.17	0.05	0.02	-0.04	0.01

19	6	0.09	-0.09	0.03	0.16	-0.08	0.06	0.01	-0.02	0.00
20	1	0.19	-0.27	0.05	0.25	-0.38	0.07	-0.01	0.04	-0.01
21	8	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.01	-0.01
22	6	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	6	0.00	0.19	0.00	-0.03	0.14	-0.02	0.00	0.04	0.00
24	1	-0.18	0.15	-0.08	-0.14	0.19	-0.07	-0.05	0.05	-0.01
25	1	-0.11	-0.15	-0.04	-0.15	-0.15	-0.06	0.00	-0.02	0.00
26	1	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.01	-0.02	0.03	0.01
27	1	0.03	0.02	-0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.03	0.00	-0.01
28	1	0.03	0.00	0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.02
29	1	-0.15	-0.22	-0.08	-0.14	-0.14	-0.06	-0.02	-0.03	-0.02
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

73				74				75			
A				A				A			
Frequencies	--	3055.4219		3143.8327		3180.7295					
Red. masses	--	1.0412		1.0920		1.0889					
Frc consts	--	5.7270		6.3590		6.4909					
IR Inten	--	2.5459		3.9919		0.4317					
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
7	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
9	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
11	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
13	1	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	
14	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.05	-0.04	
19	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
20	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
22	6	-0.02	0.05	-0.01	0.02	0.00	0.09	0.00	0.00	0.00	
23	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.01	
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.62	0.58	0.45	
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	
26	1	-0.36	-0.15	-0.10	-0.40	-0.19	-0.08	0.00	0.00	0.00	
27	1	0.29	-0.39	0.63	-0.22	0.30	-0.46	0.00	0.00	0.00	
28	1	0.29	-0.04	-0.36	0.44	-0.08	-0.50	0.00	0.00	0.00	
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.22	0.09	-0.11	
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	

76				77				78			
A				A				A			
Frequencies	--	3189.0389		3206.6712		3215.5836					
Red. masses	--	1.1025		1.0896		1.0911					
Frc consts	--	6.6061		6.6013		6.6472					
IR Inten	--	4.5107		1.9364		0.7362					
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	
2	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	
3	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.08	0.00	0.00	0.01	0.00	
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	
7	1	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.88	0.02	0.01	-0.07	0.00	

8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
9	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.09	0.00	-0.01	0.12	0.00	
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
11	1	0.00	0.00	0.00	-0.14	-0.11	-0.04	-0.11	-0.08	-0.03	
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
13	1	0.00	0.04	0.00	0.02	-0.11	0.01	-0.01	0.03	0.00	
14	1	0.00	0.00	0.00	0.35	-0.15	0.08	0.03	-0.01	0.01	
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	
19	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	0.00	
20	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	-0.12	-0.10	-0.04	
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
22	6	-0.09	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
23	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.03	-0.03	
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.15	0.15	0.11	
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.06	0.47	-0.02	
26	1	0.71	0.32	0.19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
27	1	0.00	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
28	1	0.36	-0.07	-0.45	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.67	-0.30	0.33	
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
			79			80			81		
			A			A			A		
Frequencies	--	3218.3124			3220.1623			3230.7603			
Red. masses	--	1.0903			1.0913			1.0933			
Frc consts	--	6.6535			6.6672			6.7234			
IR Inten	--	0.6630			3.9835			6.3327			
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.01	
2	6	-0.05	-0.04	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	
3	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
6	6	0.00	0.03	0.00	0.01	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	
7	1	-0.03	0.26	0.01	-0.03	0.19	0.00	-0.02	0.15	0.00	
8	6	0.00	0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.00	
9	1	0.04	-0.41	-0.01	0.01	-0.15	-0.01	-0.04	0.40	0.01	
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
11	1	0.56	0.43	0.16	0.18	0.14	0.05	0.19	0.14	0.06	
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
13	1	0.05	-0.32	0.02	-0.14	0.92	-0.06	0.00	0.03	0.00	
14	1	-0.23	0.09	-0.05	-0.01	0.00	0.00	-0.32	0.14	-0.07	
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
16	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	0.01	
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	
19	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	
20	1	0.09	0.08	0.03	0.04	0.04	0.01	-0.40	-0.34	-0.12	
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
23	6	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.01	
24	1	0.04	0.03	0.03	0.01	0.01	0.01	-0.04	-0.04	-0.03	
25	1	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.45	-0.02	
26	1	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	
27	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	
28	1	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	
29	1	0.18	-0.08	0.09	0.04	-0.02	0.02	-0.29	0.13	-0.14	
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
			82			83			84		
			A			A			A		
Frequencies	--	3237.8893			3246.4306			3257.0636			



**Table S5.** Cartesian coordinates of optimized structure for (3-OO)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	-0.729852	-2.580802	0.000298
2	6	0	-1.520438	-3.736861	0.000163
3	6	0	-2.937564	-3.679982	-0.000100
4	6	0	-3.546576	-2.435727	-0.000145
5	6	0	-2.765300	-1.234756	-0.000016
6	6	0	-1.314724	-1.279918	0.000182
7	6	0	-3.437177	0.000184	-0.000082
8	6	0	-2.765112	1.235015	-0.000079
9	6	0	-1.314536	1.279930	-0.000190
10	6	0	-0.595454	-0.000055	-0.000015
11	6	0	-3.546193	2.436123	0.000071
12	6	0	-2.936978	3.680281	0.000160
13	6	0	-1.519844	3.736923	0.000012
14	6	0	-0.729451	2.580729	-0.000170
15	7	0	0.800201	-0.000076	-0.000016
16	8	0	1.524220	-1.116503	-0.000153
17	8	0	1.524248	1.116334	0.000120
18	1	0	0.340557	-2.689315	0.000350
19	1	0	-1.025477	-4.704354	0.000188
20	1	0	-3.525584	-4.591931	-0.000280
21	1	0	-4.630096	-2.348908	-0.000343
22	1	0	-4.525859	0.000270	-0.000116
23	1	0	-4.629728	2.349486	0.000202
24	1	0	-3.524846	4.592330	0.000369
25	1	0	-1.024720	4.704336	0.000120
26	1	0	0.340977	2.689071	-0.000135
27	47	0	3.620655	-0.000119	-0.000011



**Table S6. Vibrational Frequencies for (3-OO)**

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	24.8056			44.8006			53.1219		
Red. masses	--	4.5138			10.6721			14.0038		
Frc const	--	0.0016			0.0126			0.0233		
IR Inten	--	0.2287			1.1274			0.0000		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.21	0.14	0.13	0.00	0.00	0.00	0.01
2	6	0.00	0.00	0.18	0.21	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.09
3	6	0.00	0.00	-0.01	0.20	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.11
4	6	0.00	0.00	-0.15	0.14	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.07
5	6	0.00	0.00	-0.10	0.07	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01
6	6	0.00	0.00	0.07	0.07	0.10	0.00	0.00	0.00	0.04
7	6	0.00	0.00	-0.20	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	-0.10	-0.07	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01
9	6	0.00	0.00	0.07	-0.07	0.10	0.00	0.00	0.00	-0.04
10	6	0.00	0.00	0.08	0.00	0.14	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	-0.15	-0.14	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.07
12	6	0.00	0.00	-0.01	-0.20	0.01	0.00	0.00	0.00	0.11
13	6	0.00	0.00	0.18	-0.21	0.09	0.00	0.00	0.00	0.09
14	6	0.00	0.00	0.21	-0.14	0.13	0.00	0.00	0.00	-0.01
15	7	0.00	0.00	0.07	0.00	0.23	0.00	0.00	0.00	0.00
16	8	0.00	0.00	0.05	0.02	0.22	0.00	0.00	0.00	0.64
17	8	0.00	0.00	0.05	-0.02	0.22	0.00	0.00	0.00	-0.64
18	1	0.00	0.00	0.35	0.15	0.19	0.00	0.00	0.00	0.08
19	1	0.00	0.00	0.31	0.26	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.13
20	1	0.00	0.00	-0.05	0.25	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.16
21	1	0.00	0.00	-0.28	0.13	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.09
22	1	0.00	0.00	-0.34	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	-0.28	-0.13	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.09
24	1	0.00	0.00	-0.05	-0.25	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.17
25	1	0.00	0.00	0.31	-0.26	0.11	0.00	0.00	0.00	0.13
26	1	0.00	0.00	0.35	-0.15	0.19	0.00	0.00	0.00	-0.08
27	47	0.00	0.00	-0.06	0.00	-0.18	0.00	0.00	0.00	0.00
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	79.3080			100.7076			141.6336		
Red. masses	--	8.1548			3.8273			6.4316		
Frc const	--	0.0302			0.0229			0.0760		
IR Inten	--	10.1379			0.0000			1.7719		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	0.16
2	6	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	0.14	0.00	0.00	-0.05
3	6	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	-0.22
4	6	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	-0.06
5	6	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.14
6	6	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.17
7	6	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.16
8	6	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	0.14
9	6	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.17
10	6	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.14
11	6	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.21	0.00	0.00	-0.06
12	6	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	-0.22
13	6	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	-0.14	0.00	0.00	-0.05
14	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	0.16
15	7	0.00	0.00	0.27	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11
16	8	0.00	0.00	0.30	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.24

17	8	0.00	0.00	0.29	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.24
18	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.36	0.00	0.00	0.24
19	1	0.00	0.00	-0.34	0.00	0.00	0.27	0.00	0.00	-0.10
20	1	0.00	0.00	-0.34	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	-0.43
21	1	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.34	0.00	0.00	-0.12
22	1	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.13
23	1	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.34	0.00	0.00	-0.12
24	1	0.00	0.00	-0.34	0.00	0.00	0.22	0.00	0.00	-0.43
25	1	0.00	0.00	-0.34	0.00	0.00	-0.27	0.00	0.00	-0.10
26	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.36	0.00	0.00	0.24
27	47	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03

			7			8			9	
			A			A			A	
Frequencies	--		143.4134			245.5451			272.8285	
Red. masses	--		17.3560			4.6561			4.9298	
Frc consts	--		0.2103			0.1654			0.2162	
IR Inten	--		13.6435			0.0000			14.2735	

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.19	0.01	0.00	0.00	0.00	0.17	0.02	0.10	0.00
2	6	0.22	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.18	0.02	0.00
3	6	0.22	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.18	-0.09	0.00
4	6	0.19	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.15	0.03	-0.15	0.00
5	6	0.16	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.20	-0.13	-0.02	0.00
6	6	0.15	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.18	-0.12	0.03	0.00
7	6	0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00
8	6	0.16	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.20	-0.13	0.02	0.00
9	6	0.15	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.12	-0.03	0.00
10	6	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00
11	6	0.19	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.03	0.15	0.00
12	6	0.22	0.02	0.00	0.00	0.00	0.16	0.18	0.09	0.00
13	6	0.22	0.01	0.00	0.00	0.00	0.12	0.18	-0.02	0.00
14	6	0.19	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.02	-0.10	0.00
15	7	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00
16	8	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.09	0.02	0.00
17	8	0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.09	-0.02	0.00
18	1	0.19	0.03	0.00	0.00	0.00	0.23	0.03	0.23	0.00
19	1	0.24	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.30	0.28	0.07	0.00
20	1	0.24	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.39	0.26	-0.14	0.00
21	1	0.19	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.22	0.01	-0.30	0.00
22	1	0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00
23	1	0.19	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.22	0.01	0.30	0.00
24	1	0.24	0.03	0.00	0.00	0.00	0.39	0.26	0.14	0.00
25	1	0.24	0.00	0.00	0.00	0.00	0.30	0.28	-0.07	0.00
26	1	0.19	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.23	0.03	-0.23	0.00
27	47	-0.32	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00

			10			11			12	
			A			A			A	
Frequencies	--		304.8152			311.0561			380.4924	
Red. masses	--		9.2934			3.9701			7.5464	
Frc consts	--		0.5087			0.2263			0.6437	
IR Inten	--		4.8258			0.6108			10.2589	

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.24	0.00
2	6	-0.17	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.14	0.02	0.26	0.00
3	6	-0.18	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.02	0.19	0.00
4	6	-0.09	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.06	0.14	0.00
5	6	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.07	0.10	0.00
6	6	0.02	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.05	0.15	0.00
7	6	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.29	-0.16	0.00	0.00
8	6	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.07	-0.10	0.00
9	6	-0.02	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.05	-0.15	0.00
10	6	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.22	0.08	0.00	0.00
11	6	0.09	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.06	-0.14	0.00

12	6	0.18	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.02	-0.19	0.00
13	6	0.17	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.14	0.02	-0.26	0.00
14	6	0.06	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.24	0.00
15	7	0.00	0.26	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.12	0.00	0.00
16	8	0.15	0.36	0.00	0.00	0.00	0.07	0.18	0.01	0.00
17	8	-0.15	0.36	0.00	0.00	0.00	0.07	0.18	-0.01	0.00
18	1	-0.05	-0.19	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.01	0.29	0.00
19	1	-0.24	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.36	0.03	0.27	0.00
20	1	-0.23	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.09	0.15	0.00
21	1	-0.08	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.06	0.11	0.00
22	1	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.61	-0.16	0.00	0.00
23	1	0.08	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.06	-0.11	0.00
24	1	0.23	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.09	-0.15	0.00
25	1	0.24	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.36	0.03	-0.27	0.00
26	1	0.05	-0.19	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.01	-0.29	0.00
27	47	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00

		13	14	15
		A	A	A
Frequencies	--	385.4446	401.9139	421.0733
Red. masses	--	9.0537	3.5795	6.9928
Frc consts	--	0.7925	0.3407	0.7305
IR Inten	--	1.8662	0.4690	11.3783

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	0.13	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.14	-0.14	0.00
2	6	0.06	0.09	0.00	0.00	0.00	0.08	0.03	-0.06	0.00
3	6	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.09	0.04	0.17	0.00
4	6	-0.11	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.14	0.20	0.00
5	6	-0.17	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.16	0.12	0.00
6	6	-0.17	0.03	0.00	0.00	0.00	0.06	0.14	-0.11	0.00
7	6	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00	0.12	0.00	0.06	0.00
8	6	0.17	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.16	0.12	0.00
9	6	0.17	0.03	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.14	-0.11	0.00
10	6	0.00	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.20	0.00	-0.12	0.00
11	6	0.11	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.14	0.20	0.00
12	6	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.04	0.17	0.00
13	6	-0.06	0.09	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.03	-0.06	0.00
14	6	0.04	0.13	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.14	-0.14	0.00
15	7	0.00	-0.19	0.00	0.00	0.00	0.08	0.00	-0.11	0.00
16	8	0.41	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.19	-0.05	0.00
17	8	-0.41	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.19	-0.05	0.00
18	1	-0.02	0.27	0.00	0.00	0.00	-0.38	0.14	-0.16	0.00
19	1	0.11	0.12	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.12	-0.14	0.00
20	1	0.14	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.16	-0.09	0.25	0.00
21	1	-0.12	-0.18	0.00	0.00	0.00	-0.43	0.14	0.25	0.00
22	1	0.00	0.25	0.00	0.00	0.00	0.14	0.00	-0.15	0.00
23	1	0.12	-0.18	0.00	0.00	0.00	-0.43	-0.14	0.25	0.00
24	1	-0.14	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.16	0.09	0.25	0.00
25	1	-0.11	0.12	0.00	0.00	0.00	0.15	0.12	-0.14	0.00
26	1	0.02	0.27	0.00	0.00	0.00	-0.38	-0.14	-0.16	0.00
27	47	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		16	17	18
		A	A	A
Frequencies	--	442.7376	481.2335	516.5390
Red. masses	--	9.6591	3.2150	3.2463
Frc consts	--	1.1155	0.4387	0.5103
IR Inten	--	48.3813	0.0000	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.11	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	0.05
2	6	-0.04	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	-0.12
3	6	-0.04	-0.22	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.16
4	6	-0.05	-0.19	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.13
5	6	-0.13	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.21	0.00	0.00	-0.03
6	6	-0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	0.20

7	6	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.13	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	0.03
9	6	-0.06	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.20
10	6	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.05	0.19	0.00	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	0.13
12	6	-0.04	0.22	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.16
13	6	-0.04	0.15	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.12
14	6	-0.11	0.06	0.00	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	-0.05
15	7	0.24	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	8	0.36	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
17	8	0.36	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
18	1	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.43	0.00	0.00	-0.11
19	1	0.05	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	-0.44
20	1	-0.03	-0.23	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	0.30
21	1	-0.06	-0.26	0.00	0.00	0.00	-0.38	0.00	0.00	-0.32
22	1	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.06	0.26	0.00	0.00	0.00	0.38	0.00	0.00	0.32
24	1	-0.03	0.23	0.00	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	-0.30
25	1	0.05	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	0.44
26	1	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.43	0.00	0.00	0.11
27	47	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies	--	523.2622			591.2901			594.6925		
Red. masses	--	3.5640			3.4360			6.4510		
Frc consts	--	0.5749			0.7078			1.3442		
IR Inten	--	35.6333			2.0849			6.0437		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.12	-0.10	-0.09	0.00
2	6	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.14	0.11	-0.23	0.00
3	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.15	0.14	-0.01	0.00
4	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.13	0.07	0.02	0.00
5	6	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	0.04	-0.15	0.16	0.00
6	6	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	-0.06	-0.15	-0.07	0.00
7	6	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.30	0.00
8	6	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	0.04	0.15	0.16	0.00
9	6	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	-0.06	0.15	-0.07	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	0.10	0.00	-0.10	0.00
11	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.13	-0.07	0.02	0.00
12	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.15	-0.14	-0.01	0.00
13	6	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.14	-0.11	-0.23	0.00
14	6	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.12	0.10	-0.09	0.00
15	7	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	0.17	0.00	0.05	0.00
16	8	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.05	-0.08	0.06	0.00
17	8	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.05	0.08	0.06	0.00
18	1	0.00	0.00	-0.31	0.00	0.00	-0.12	-0.08	0.11	0.00
19	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.41	0.13	-0.22	0.00
20	1	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.00	-0.32	0.01	0.07	0.00
21	1	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	0.25	0.05	-0.19	0.00
22	1	0.00	0.00	-0.65	0.00	0.00	-0.31	0.00	0.50	0.00
23	1	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	0.25	-0.05	-0.19	0.00
24	1	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.00	-0.32	-0.01	0.07	0.00
25	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.41	-0.13	-0.22	0.00
26	1	0.00	0.00	-0.31	0.00	0.00	-0.12	0.08	0.11	0.00
27	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		22			23			24		
		A			A			A		
Frequencies	--	644.7872			659.2526			678.8090		
Red. masses	--	6.9500			6.6517			6.4898		
Frc consts	--	1.7024			1.7033			1.7619		
IR Inten	--	6.7311			0.0085			0.3332		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.24	-0.06	0.00	-0.22	0.02	0.00	-0.11	0.19	0.00

2	6	0.08	0.10	0.00	-0.02	-0.14	0.00	-0.09	0.18	0.00
3	6	0.06	0.19	0.00	0.04	-0.03	0.00	-0.10	-0.22	0.00
4	6	-0.27	0.02	0.00	0.29	0.09	0.00	0.02	-0.14	0.00
5	6	-0.13	-0.08	0.00	0.04	0.17	0.00	0.11	-0.08	0.00
6	6	-0.02	-0.17	0.00	-0.01	0.12	0.00	0.05	0.13	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	0.23	0.00	0.00
8	6	0.13	-0.08	0.00	0.04	-0.17	0.00	0.11	0.08	0.00
9	6	0.02	-0.17	0.00	-0.01	-0.12	0.00	0.05	-0.13	0.00
10	6	0.00	-0.15	0.00	0.11	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00
11	6	0.27	0.02	0.00	0.29	-0.09	0.00	0.02	0.14	0.00
12	6	-0.06	0.19	0.00	0.04	0.03	0.00	-0.10	0.22	0.00
13	6	-0.08	0.10	0.00	-0.02	0.14	0.00	-0.09	-0.18	0.00
14	6	-0.24	-0.06	0.00	-0.22	-0.02	0.00	-0.11	-0.19	0.00
15	7	0.00	0.04	0.00	0.05	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00
16	8	-0.10	0.03	0.00	-0.07	-0.09	0.00	-0.07	-0.08	0.00
17	8	0.10	0.03	0.00	-0.07	0.09	0.00	-0.07	0.08	0.00
18	1	0.24	-0.01	0.00	-0.22	0.05	0.00	-0.13	0.05	0.00
19	1	-0.14	-0.01	0.00	0.11	-0.08	0.00	0.15	0.31	0.00
20	1	0.24	0.08	0.00	-0.21	0.13	0.00	0.03	-0.30	0.00
21	1	-0.28	-0.10	0.00	0.29	0.09	0.00	0.03	0.01	0.00
22	1	0.00	0.14	0.00	-0.21	0.00	0.00	0.23	0.00	0.00
23	1	0.28	-0.10	0.00	0.29	-0.10	0.00	0.03	-0.01	0.00
24	1	-0.24	0.08	0.00	-0.21	-0.13	0.00	0.03	0.30	0.00
25	1	0.14	-0.01	0.00	0.11	0.08	0.00	0.15	-0.31	0.00
26	1	-0.24	-0.01	0.00	-0.22	-0.05	0.00	-0.13	-0.05	0.00
27	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

				25				26				27
				A				A				A
Frequencies	--	689.7817				760.7073				778.3016		
Red. masses	--	6.4061				9.9935				3.1440		
Frc consts	--	1.7958				3.4072				1.1221		
IR Inten	--	5.1931				1.5124				0.0000		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z		
1	6	0.00	0.00	0.07	-0.14	0.06	0.00	0.00	0.00	0.08		
2	6	0.00	0.00	-0.04	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.06		
3	6	0.00	0.00	0.08	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.10		
4	6	0.00	0.00	-0.04	0.16	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.04		
5	6	0.00	0.00	0.12	0.10	0.01	0.00	0.00	0.00	0.17		
6	6	0.00	0.00	-0.02	-0.09	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.22		
7	6	0.00	0.00	-0.02	0.21	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
8	6	0.00	0.00	0.12	0.10	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.17		
9	6	0.00	0.00	-0.02	-0.09	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.22		
10	6	0.00	0.00	-0.39	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
11	6	0.00	0.00	-0.04	0.16	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.04		
12	6	0.00	0.00	0.08	-0.03	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.10		
13	6	0.00	0.00	-0.04	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.06		
14	6	0.00	0.00	0.07	-0.14	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.08		
15	7	0.00	0.00	0.45	-0.24	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
16	8	0.00	0.00	-0.12	0.15	0.40	0.00	0.00	0.00	0.00		
17	8	0.00	0.00	-0.12	0.15	-0.40	0.00	0.00	0.00	0.00		
18	1	0.00	0.00	-0.07	-0.12	0.20	0.00	0.00	0.00	0.22		
19	1	0.00	0.00	-0.33	0.09	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.27		
20	1	0.00	0.00	-0.09	-0.15	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.15		
21	1	0.00	0.00	-0.35	0.17	0.15	0.00	0.00	0.00	-0.51		
22	1	0.00	0.00	-0.26	0.22	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
23	1	0.00	0.00	-0.35	0.17	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.51		
24	1	0.00	0.00	-0.09	-0.15	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.15		
25	1	0.00	0.00	-0.33	0.09	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.27		
26	1	0.00	0.00	-0.07	-0.12	-0.20	0.00	0.00	0.00	-0.22		
27	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
				28				29				30
				A				A				A
Frequencies	--	805.9644				813.3174				832.8880		

Red. masses	--	1.2581		1.3663		3.1713				
Frc consts	--	0.4815		0.5325		1.2962				
IR Inten	--	145.1527		0.0000		9.3635				
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z			
1	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.03
2	6	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.05
3	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.07
4	6	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.15
6	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.22
7	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02
8	6	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.15
9	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.22
10	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18
11	6	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.07
13	6	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.05
14	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.03
15	7	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
17	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
18	1	0.00	0.00	0.27	0.00	0.00	0.33	0.00	0.00	-0.34
19	1	0.00	0.00	0.35	0.00	0.00	0.38	0.00	0.00	0.06
20	1	0.00	0.00	0.43	0.00	0.00	0.45	0.00	0.00	0.15
21	1	0.00	0.00	0.27	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	0.40
22	1	0.00	0.00	-0.30	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.45
23	1	0.00	0.00	0.27	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	0.40
24	1	0.00	0.00	0.43	0.00	0.00	-0.45	0.00	0.00	0.15
25	1	0.00	0.00	0.35	0.00	0.00	-0.38	0.00	0.00	0.06
26	1	0.00	0.00	0.27	0.00	0.00	-0.33	0.00	0.00	-0.34
27	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			31			32			33	
			A			A			A	
Frequencies	--	866.0086		885.9403		929.2021				
Red. masses	--	6.6910		5.3762		1.3833				
Frc consts	--	2.9565		2.4862		0.7037				
IR Inten	--	22.8868		0.8405		11.7325				
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.19	0.03	0.00	0.20	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.07
2	6	0.09	-0.11	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.05
3	6	0.11	0.13	0.00	-0.09	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.02
4	6	-0.07	0.05	0.00	-0.09	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.06
5	6	0.01	-0.07	0.00	-0.06	0.12	0.00	0.00	0.00	-0.02
6	6	-0.18	-0.04	0.00	0.15	0.09	0.00	0.00	0.00	0.06
7	6	0.38	0.00	0.00	0.00	0.25	0.00	0.00	0.00	-0.05
8	6	0.01	0.07	0.00	0.06	0.12	0.00	0.00	0.00	-0.02
9	6	-0.18	0.04	0.00	-0.15	0.09	0.00	0.00	0.00	0.06
10	6	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	0.00	-0.04
11	6	-0.07	-0.05	0.00	0.09	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.06
12	6	0.11	-0.13	0.00	0.09	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.02
13	6	0.09	0.11	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.05
14	6	-0.19	-0.03	0.00	-0.20	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.06
15	7	0.03	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
16	8	0.06	-0.18	0.00	0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00
17	8	0.06	0.18	0.00	-0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.18	0.30	0.00	0.20	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.38
19	1	0.11	-0.09	0.00	-0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.32
20	1	0.06	0.16	0.00	-0.01	-0.23	0.00	0.00	0.00	-0.12
21	1	-0.08	-0.04	0.00	-0.10	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.39
22	1	0.39	0.00	0.00	0.00	0.50	0.00	0.00	0.00	0.38
23	1	-0.08	0.04	0.00	0.10	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.39
24	1	0.06	-0.16	0.00	0.01	-0.23	0.00	0.00	0.00	-0.12
25	1	0.11	0.09	0.00	0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.32

26	1	-0.18	-0.30	0.00	-0.20	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.38
27	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			34			35			36	
			A			A			A	
Frequencies	--	935.1798			948.8361			993.2093		
Red. masses	--	1.4339			6.6444			8.6100		
Frc consts	--	0.7388			3.5244			5.0042		
IR Inten	--	0.0000			1.3576			98.4463		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.07	-0.06	-0.05	0.00	-0.16	0.01	0.00
2	6	0.00	0.00	0.04	0.10	-0.25	0.00	0.09	-0.14	0.00
3	6	0.00	0.00	-0.03	0.06	0.16	0.00	0.09	0.08	0.00
4	6	0.00	0.00	-0.08	-0.17	0.04	0.00	-0.23	-0.01	0.00
5	6	0.00	0.00	0.05	-0.01	-0.09	0.00	-0.01	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	-0.05	0.03	0.17	0.00	0.12	0.13	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.06	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	-0.05	0.01	-0.09	0.00	-0.01	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.05	-0.03	0.17	0.00	0.12	-0.13	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.34	0.00	0.39	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.08	0.17	0.04	0.00	-0.23	0.01	0.00
12	6	0.00	0.00	0.03	-0.06	0.16	0.00	0.09	-0.08	0.00
13	6	0.00	0.00	-0.04	-0.10	-0.25	0.00	0.09	0.14	0.00
14	6	0.00	0.00	-0.07	0.06	-0.05	0.00	-0.16	-0.01	0.00
15	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.15	0.00	0.00
16	8	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.06	0.00	-0.14	0.23	0.00
17	8	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.06	0.00	-0.14	-0.23	0.00
18	1	0.00	0.00	-0.41	-0.04	0.06	0.00	-0.16	0.01	0.00
19	1	0.00	0.00	-0.28	-0.05	-0.34	0.00	0.14	-0.12	0.00
20	1	0.00	0.00	0.23	-0.07	0.24	0.00	0.17	0.02	0.00
21	1	0.00	0.00	0.41	-0.18	-0.06	0.00	-0.25	-0.17	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.06	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	-0.42	0.18	-0.06	0.00	-0.25	0.17	0.00
24	1	0.00	0.00	-0.23	0.07	0.24	0.00	0.17	-0.02	0.00
25	1	0.00	0.00	0.29	0.05	-0.34	0.00	0.14	0.12	0.00
26	1	0.00	0.00	0.42	0.04	0.06	0.00	-0.16	-0.01	0.00
27	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			37			38			39	
			A			A			A	
Frequencies	--	1010.0150			1030.5688			1049.7367		
Red. masses	--	1.4969			1.3713			1.5724		
Frc consts	--	0.8997			0.8581			1.0209		
IR Inten	--	3.7008			0.0000			22.8883		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.05
2	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.04
3	6	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	-0.04
4	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.08
5	6	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.07
6	6	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.13
8	6	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.07
9	6	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	0.08
12	6	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.04
13	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.04
14	6	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.05
15	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.30	0.00	0.00	0.34	0.00	0.00	-0.29
19	1	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.00	0.23
20	1	0.00	0.00	-0.42	0.00	0.00	-0.40	0.00	0.00	0.17





16	8	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.09	-0.22	0.00
17	8	0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.09	-0.22	0.00
18	1	0.10	0.37	0.00	0.14	0.09	0.00	0.02	0.47	0.00
19	1	0.28	0.01	0.00	-0.33	-0.15	0.00	-0.09	0.00	0.00
20	1	-0.29	0.03	0.00	-0.38	0.26	0.00	0.15	-0.10	0.00
21	1	-0.02	0.36	0.00	0.14	-0.15	0.00	0.03	0.11	0.00
22	1	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	0.11	0.00
23	1	0.02	0.36	0.00	-0.14	-0.15	0.00	-0.03	0.11	0.00
24	1	0.29	0.03	0.00	0.38	0.26	0.00	-0.15	-0.11	0.00
25	1	-0.28	0.01	0.00	0.33	-0.15	0.00	0.09	0.00	0.00
26	1	-0.10	0.37	0.00	-0.14	0.09	0.00	-0.02	0.47	0.00
27	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

46

47

48

A

A

A

Frequencies	--	1189.2248		1220.9771		1222.8439
Red. masses	--	1.6858		1.1927		1.3487
Frc consts	--	1.4047		1.0476		1.1883
IR Inten	--	14.8614		7.2470		310.6585

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	0.03	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.00
2	6	-0.02	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.04	0.04	0.00
3	6	-0.03	0.03	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00
4	6	0.07	-0.04	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00
5	6	-0.06	-0.04	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00
6	6	-0.05	0.01	0.00	-0.05	0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.00
7	6	0.07	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
8	6	-0.06	0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00
9	6	-0.05	-0.01	0.00	0.05	0.01	0.00	-0.01	0.03	0.00
10	6	0.06	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.06	0.00	0.00
11	6	0.07	0.04	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00
12	6	-0.03	-0.03	0.00	-0.02	-0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.00
13	6	-0.02	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.04	-0.04	0.00
14	6	0.06	-0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.04	0.00
15	7	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.10	0.00	0.00
16	8	-0.03	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00
17	8	-0.03	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00
18	1	0.08	0.15	0.00	0.04	0.12	0.00	-0.06	-0.34	0.00
19	1	-0.19	-0.09	0.00	-0.33	-0.18	0.00	0.47	0.27	0.00
20	1	-0.43	0.29	0.00	0.37	-0.25	0.00	-0.22	0.13	0.00
21	1	0.05	-0.35	0.00	0.03	0.36	0.00	0.00	-0.02	0.00
22	1	0.07	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.01	0.00	0.00
23	1	0.05	0.35	0.00	-0.03	0.36	0.00	0.00	0.03	0.00
24	1	-0.43	-0.29	0.00	-0.37	-0.25	0.00	-0.22	-0.13	0.00
25	1	-0.19	0.09	0.00	0.33	-0.18	0.00	0.48	-0.27	0.00
26	1	0.08	-0.15	0.00	-0.04	0.12	0.00	-0.06	0.34	0.00
27	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

49

50

51

A

A

A

Frequencies	--	1239.2349		1247.8650		1270.7138
Red. masses	--	2.6338		1.3152		3.2714
Frc consts	--	2.3831		1.2066		3.1123
IR Inten	--	149.6963		65.2766		532.8971

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.03	0.00	-0.02	-0.02	0.00	-0.05	0.02	0.00
2	6	0.00	0.04	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.03	0.04	0.00
3	6	-0.01	-0.04	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
4	6	0.05	0.04	0.00	0.02	0.04	0.00	0.01	0.02	0.00
5	6	-0.04	0.00	0.00	-0.04	-0.09	0.00	0.00	-0.07	0.00
6	6	-0.13	-0.11	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.04	-0.22	0.00
7	6	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00
8	6	-0.04	0.00	0.00	0.04	-0.09	0.00	0.00	0.07	0.00
9	6	-0.13	0.11	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.04	0.22	0.00
10	6	0.07	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00	0.22	0.00	0.00

11	6	0.05	-0.04	0.00	-0.02	0.04	0.00	0.01	-0.02	0.00
12	6	-0.01	0.04	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
13	6	0.00	-0.04	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.03	-0.04	0.00
14	6	0.02	0.03	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.05	-0.02	0.00
15	7	0.20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00
16	8	-0.06	0.05	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
17	8	-0.06	-0.05	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
18	1	0.04	0.23	0.00	-0.04	-0.28	0.00	-0.02	0.43	0.00
19	1	-0.11	-0.01	0.00	0.26	0.14	0.00	0.32	0.22	0.00
20	1	0.28	-0.23	0.00	-0.03	0.04	0.00	-0.18	0.13	0.00
21	1	0.09	0.47	0.00	0.05	0.36	0.00	0.01	-0.07	0.00
22	1	0.03	0.00	0.00	0.00	0.60	0.00	-0.09	0.00	0.00
23	1	0.09	-0.48	0.00	-0.05	0.36	0.00	0.01	0.07	0.00
24	1	0.28	0.23	0.00	0.03	0.04	0.00	-0.18	-0.13	0.00
25	1	-0.11	0.01	0.00	-0.26	0.14	0.00	0.32	-0.22	0.00
26	1	0.04	-0.23	0.00	0.04	-0.28	0.00	-0.02	-0.43	0.00
27	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

52

53

54

A

A

A

Frequencies -- 1305.2823

1338.3056

1371.7755

Red. masses -- 1.8571

2.1232

3.1746

Frc consts -- 1.8642

2.2405

3.5197

IR Inten -- 3.5426

0.2335

220.6184

Atom AN

		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.09	0.00	0.02	-0.04	0.00	0.06	0.00	0.00
2	6	-0.02	-0.04	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
3	6	0.02	0.00	0.00	-0.05	-0.04	0.00	0.03	-0.04	0.00
4	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.04	0.00	0.03	0.04	0.00
5	6	0.02	-0.05	0.00	0.01	0.19	0.00	-0.14	0.03	0.00
6	6	0.14	-0.01	0.00	-0.03	-0.03	0.00	-0.09	0.05	0.00
7	6	0.00	0.02	0.00	0.08	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00
8	6	-0.02	-0.05	0.00	0.01	-0.19	0.00	-0.14	-0.03	0.00
9	6	-0.14	-0.01	0.00	-0.03	0.03	0.00	-0.09	-0.05	0.00
10	6	0.00	-0.08	0.00	0.03	0.00	0.00	0.23	0.00	0.00
11	6	0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.04	0.00	0.03	-0.04	0.00
12	6	-0.02	0.00	0.00	-0.05	0.04	0.00	0.03	0.04	0.00
13	6	0.02	-0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
14	6	0.03	0.09	0.00	0.02	0.04	0.00	0.06	0.00	0.00
15	7	0.00	-0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00
16	8	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.00
17	8	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.00
18	1	-0.01	0.39	0.00	0.05	0.15	0.00	0.01	-0.58	0.00
19	1	-0.21	-0.14	0.00	0.12	0.08	0.00	0.05	0.02	0.00
20	1	-0.09	0.08	0.00	0.18	-0.19	0.00	0.00	-0.02	0.00
21	1	-0.02	-0.09	0.00	-0.08	-0.57	0.00	0.05	0.23	0.00
22	1	0.00	0.67	0.00	0.11	0.00	0.00	0.14	0.00	0.00
23	1	0.02	-0.09	0.00	-0.08	0.57	0.00	0.05	-0.23	0.00
24	1	0.09	0.08	0.00	0.18	0.19	0.00	0.00	0.02	0.00
25	1	0.21	-0.14	0.00	0.12	-0.08	0.00	0.05	-0.02	0.00
26	1	0.01	0.39	0.00	0.05	-0.15	0.00	0.01	0.58	0.00
27	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

55

56

57

A

A

A

Frequencies -- 1383.0690

1425.6266

1437.9591

Red. masses -- 3.0661

4.0679

9.7372

Frc consts -- 3.4556

4.8711

11.8626

IR Inten -- 27.3383

104.5322

1.9622

Atom AN

		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.03	0.00	0.04	0.17	0.00	-0.04	-0.24	0.00
2	6	-0.06	0.01	0.00	-0.10	-0.09	0.00	0.18	0.14	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.09	0.00	-0.12	0.13	0.00
4	6	0.00	0.04	0.00	0.01	0.16	0.00	-0.02	-0.25	0.00
5	6	0.07	-0.04	0.00	-0.19	-0.01	0.00	0.27	0.04	0.00

6	6	-0.04	-0.16	0.00	0.10	-0.08	0.00	-0.24	0.11	0.00
7	6	0.00	0.09	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.12	0.00	0.00
8	6	-0.07	-0.04	0.00	0.19	-0.01	0.00	0.27	-0.04	0.00
9	6	0.04	-0.16	0.00	-0.10	-0.08	0.00	-0.24	-0.11	0.00
10	6	0.00	0.29	0.00	0.00	0.03	0.00	0.22	0.00	0.00
11	6	0.00	0.04	0.00	-0.01	0.16	0.00	-0.02	0.25	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.09	0.00	-0.12	-0.13	0.00
13	6	0.06	0.01	0.00	0.10	-0.09	0.00	0.18	-0.14	0.00
14	6	0.00	-0.03	0.00	-0.04	0.17	0.00	-0.04	0.24	0.00
15	7	0.00	-0.11	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.15	0.00	0.00
16	8	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00
17	8	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00
18	1	0.04	0.43	0.00	0.00	-0.23	0.00	-0.01	0.06	0.00
19	1	0.29	0.20	0.00	0.06	-0.01	0.00	-0.15	-0.01	0.00
20	1	0.05	-0.04	0.00	0.03	-0.06	0.00	-0.12	0.13	0.00
21	1	-0.03	-0.30	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.02	0.20	0.00
22	1	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.78	0.00	-0.13	0.00	0.00
23	1	0.03	-0.30	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.02	-0.20	0.00
24	1	-0.05	-0.04	0.00	-0.03	-0.06	0.00	-0.12	-0.13	0.00
25	1	-0.29	0.20	0.00	-0.06	-0.01	0.00	-0.15	0.01	0.00
26	1	-0.04	0.43	0.00	0.00	-0.23	0.00	-0.01	-0.06	0.00
27	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

58

59

60

		A		A		A
Frequencies	--	1446.9906		1484.6483		1489.2858
Red. masses	--	1.9094		2.2342		2.0065
Frc consts	--	2.3555		2.9014		2.6220
IR Inten	--	19.6515		26.7270		0.7900

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	-0.06	0.00	0.04	-0.06	0.00	0.03	0.10	0.00
2	6	-0.04	-0.04	0.00	-0.07	-0.06	0.00	0.01	-0.05	0.00
3	6	-0.08	0.05	0.00	-0.07	0.09	0.00	-0.04	-0.02	0.00
4	6	0.06	0.06	0.00	0.06	0.01	0.00	-0.01	0.08	0.00
5	6	-0.07	0.01	0.00	-0.03	-0.11	0.00	0.11	-0.04	0.00
6	6	0.03	0.07	0.00	-0.01	0.10	0.00	-0.08	0.00	0.00
7	6	0.00	-0.12	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
8	6	0.07	0.01	0.00	-0.03	0.11	0.00	-0.11	-0.04	0.00
9	6	-0.03	0.07	0.00	-0.01	-0.10	0.00	0.08	0.00	0.00
10	6	0.00	-0.07	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00
11	6	-0.06	0.06	0.00	0.06	-0.01	0.00	0.01	0.08	0.00
12	6	0.08	0.05	0.00	-0.07	-0.09	0.00	0.04	-0.02	0.00
13	6	0.04	-0.04	0.00	-0.07	0.06	0.00	-0.01	-0.05	0.00
14	6	-0.03	-0.06	0.00	0.04	0.06	0.00	-0.03	0.10	0.00
15	7	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
17	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
18	1	0.06	0.24	0.00	0.08	0.21	0.00	-0.01	-0.40	0.00
19	1	0.31	0.13	0.00	0.41	0.18	0.00	-0.04	-0.09	0.00
20	1	0.38	-0.25	0.00	0.37	-0.18	0.00	0.12	-0.13	0.00
21	1	0.04	-0.23	0.00	0.07	-0.12	0.00	-0.06	-0.43	0.00
22	1	0.00	0.20	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.35	0.00
23	1	-0.04	-0.23	0.00	0.07	0.12	0.00	0.06	-0.43	0.00
24	1	-0.38	-0.25	0.00	0.37	0.18	0.00	-0.12	-0.13	0.00
25	1	-0.31	0.13	0.00	0.41	-0.18	0.00	0.04	-0.09	0.00
26	1	-0.06	0.24	0.00	0.08	-0.21	0.00	0.01	-0.40	0.00
27	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

61

62

63

		A		A		A				
Frequencies	--	1531.2486		1567.2806		1592.1220				
Red. masses	--	2.4665		4.5247		6.4536				
Frc consts	--	3.4073		6.5484		9.6383				
IR Inten	--	44.7852		113.0727		94.2975				
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	6	0.00	-0.13	0.00	-0.11	0.02	0.00	-0.13	-0.06	0.00
2	6	-0.07	0.04	0.00	0.24	0.08	0.00	0.25	0.09	0.00
3	6	0.09	-0.01	0.00	-0.17	0.01	0.00	-0.21	0.06	0.00
4	6	-0.02	-0.07	0.00	0.07	0.04	0.00	0.11	-0.01	0.00
5	6	-0.09	0.08	0.00	-0.10	0.04	0.00	-0.22	0.00	0.00
6	6	0.07	0.07	0.00	0.08	-0.13	0.00	0.20	-0.02	0.00
7	6	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.09	0.00	0.00
8	6	-0.09	-0.08	0.00	0.10	0.04	0.00	-0.22	0.00	0.00
9	6	0.07	-0.07	0.00	-0.08	-0.13	0.00	0.20	0.02	0.00
10	6	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.13	0.00	-0.03	0.00	0.00
11	6	-0.02	0.07	0.00	-0.07	0.04	0.00	0.11	0.01	0.00
12	6	0.09	0.01	0.00	0.17	0.01	0.00	-0.21	-0.06	0.00
13	6	-0.07	-0.04	0.00	-0.24	0.08	0.00	0.25	-0.09	0.00
14	6	0.00	0.13	0.00	0.11	0.02	0.00	-0.13	0.06	0.00
15	7	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.05	0.00	0.00
16	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
17	8	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
18	1	0.06	0.45	0.00	-0.15	-0.18	0.00	-0.13	0.11	0.00
19	1	0.11	0.15	0.00	-0.39	-0.25	0.00	-0.31	-0.20	0.00
20	1	-0.18	0.17	0.00	0.10	-0.19	0.00	0.17	-0.20	0.00
21	1	0.01	0.35	0.00	0.06	-0.15	0.00	0.12	-0.02	0.00
22	1	0.09	0.00	0.00	0.00	0.09	0.00	0.10	0.00	0.00
23	1	0.01	-0.35	0.00	-0.06	-0.15	0.00	0.12	0.02	0.00
24	1	-0.18	-0.17	0.00	-0.10	-0.19	0.00	0.17	0.20	0.00
25	1	0.11	-0.15	0.00	0.39	-0.25	0.00	-0.31	0.20	0.00
26	1	0.06	-0.45	0.00	0.15	-0.18	0.00	-0.13	-0.11	0.00
27	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			64			65			66	
			A			A			A	
Frequencies	--	1613.9145			1644.8768			1657.2104		
Red. masses	--	4.6707			5.3351			5.6124		
Frc consts	--	7.1679			8.5046			9.0814		
IR Inten	--	24.9851			326.7241			20.4822		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.09	0.00	-0.05	-0.16	0.00	0.04	0.18	0.00
2	6	0.02	-0.08	0.00	0.09	0.11	0.00	-0.06	-0.12	0.00
3	6	-0.14	0.17	0.00	0.02	-0.12	0.00	-0.08	0.18	0.00
4	6	0.07	-0.14	0.00	0.00	0.20	0.00	0.03	-0.27	0.00
5	6	0.00	-0.15	0.00	-0.02	-0.22	0.00	-0.02	0.17	0.00
6	6	0.05	0.00	0.00	0.03	0.13	0.00	0.03	-0.12	0.00
7	6	0.00	0.33	0.00	0.00	0.23	0.00	0.04	0.00	0.00
8	6	0.00	-0.15	0.00	0.02	-0.22	0.00	-0.02	-0.17	0.00
9	6	-0.05	0.00	0.00	-0.03	0.13	0.00	0.03	0.12	0.00
10	6	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.08	0.00	-0.02	0.00	0.00
11	6	-0.07	-0.14	0.00	0.00	0.20	0.00	0.03	0.27	0.00
12	6	0.14	0.17	0.00	-0.02	-0.12	0.00	-0.08	-0.18	0.00
13	6	-0.02	-0.08	0.00	-0.09	0.11	0.00	-0.06	0.12	0.00
14	6	0.00	0.09	0.00	0.05	-0.16	0.00	0.03	-0.18	0.00
15	7	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.02	-0.10	0.00	-0.01	0.24	0.00	0.00	-0.21	0.00
19	1	0.15	-0.03	0.00	-0.21	-0.03	0.00	0.23	0.01	0.00
20	1	0.29	-0.09	0.00	-0.15	-0.04	0.00	0.23	0.01	0.00
21	1	0.12	0.13	0.00	-0.04	-0.30	0.00	0.09	0.36	0.00
22	1	0.00	-0.59	0.00	0.00	-0.42	0.00	0.06	0.00	0.00
23	1	-0.12	0.13	0.00	0.04	-0.30	0.00	0.09	-0.36	0.00
24	1	-0.29	-0.09	0.00	0.15	-0.04	0.00	0.23	-0.01	0.00
25	1	-0.15	-0.03	0.00	0.21	-0.03	0.00	0.23	-0.01	0.00
26	1	0.02	-0.10	0.00	0.01	0.24	0.00	0.00	0.21	0.00
27	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			67			68			69	
			A			A			A	

Frequencies	--	3202.7695			3212.1180			3213.2116		
Red. masses	--	1.0930			1.0898			1.0897		
Frc consts	--	6.6055			6.6251			6.6287		
IR Inten	--	0.3348			0.7368			0.9892		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.02	0.00
4	6	0.02	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.02	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.02	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
19	1	0.01	-0.01	0.00	0.06	-0.13	0.00	-0.08	0.15	0.00
20	1	0.03	0.04	0.00	0.15	0.23	0.00	-0.16	-0.24	0.00
21	1	-0.18	0.02	0.00	-0.63	0.05	0.00	0.60	-0.05	0.00
22	1	0.96	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.26	0.00	0.00
23	1	-0.18	-0.02	0.00	0.63	0.05	0.00	0.59	0.05	0.00
24	1	0.03	-0.04	0.00	-0.15	0.23	0.00	-0.15	0.24	0.00
25	1	0.01	0.01	0.00	-0.07	-0.13	0.00	-0.08	-0.15	0.00
26	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
27	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			70				71			72
			A				A			A
Frequencies	--	3222.8714			3223.0612			3247.3448		
Red. masses	--	1.0922			1.0923			1.0996		
Frc consts	--	6.6843			6.6857			6.8318		
IR Inten	--	2.2200			5.6506			15.5382		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.02	-0.05	0.00	0.03	-0.05	0.00	-0.01	0.02	0.00
3	6	0.01	0.02	0.00	0.01	0.02	0.00	0.03	0.05	0.00
4	6	0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
12	6	-0.01	0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.05	0.00
13	6	-0.03	-0.05	0.00	0.02	0.05	0.00	0.01	0.02	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.04	-0.01	0.00	0.05	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00
19	1	-0.27	0.53	0.00	-0.30	0.59	0.00	0.12	-0.23	0.00
20	1	-0.10	-0.17	0.00	-0.10	-0.17	0.00	-0.32	-0.50	0.00
21	1	-0.22	0.02	0.00	-0.27	0.02	0.00	-0.19	0.02	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.24	0.02	0.00	-0.24	-0.02	0.00	0.21	0.02	0.00
24	1	0.11	-0.18	0.00	-0.09	0.15	0.00	0.34	-0.53	0.00



**Table S7.** Cartesian coordinates of optimized structure for (5-C<sub>9</sub>)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	47	0	0.646304	-1.167138	-1.541413
2	6	0	0.829638	-0.808527	2.975283
3	6	0	2.195303	-0.830388	3.191953
4	6	0	3.075547	-0.240551	2.236766
5	6	0	2.572836	0.316638	1.071902
6	1	0	4.145202	-0.227403	2.426502
7	6	0	1.165329	0.327512	0.790557
8	1	0	3.267513	0.758671	0.367962
9	6	0	0.253858	-0.210250	1.796868
10	6	0	0.645067	0.920116	-0.439521
11	6	0	-1.159529	-0.105567	1.618353
12	6	0	-1.686897	0.515528	0.442662
13	6	0	-2.135846	-0.627137	2.656115
14	1	0	0.184921	-1.243098	3.728024
15	1	0	2.598927	-1.280290	4.093871
16	6	0	-0.802992	1.056226	-0.577923
17	6	0	1.562469	1.810354	-1.284602
18	6	0	-1.390358	1.770347	-1.675709
19	1	0	1.196546	1.952309	-2.303372
20	1	0	2.579147	1.420454	-1.366527
21	1	0	1.630455	2.805128	-0.820217
22	6	0	-3.107983	0.651568	0.256358
23	1	0	-2.746825	0.191117	3.058284
24	1	0	-1.654024	-1.111502	3.502362
25	1	0	-2.825502	-1.358036	2.214798
26	6	0	-2.764833	1.902531	-1.799570
27	1	0	-0.756418	2.227284	-2.426095
28	6	0	-3.637757	1.320407	-0.832516
29	1	0	-3.784280	0.235141	0.993123
30	1	0	-4.713099	1.417833	-0.947259
31	1	0	-3.181955	2.455034	-2.636912

**Table S8. Vibrational Frequencies for (5-C<sub>9</sub>)**

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	34.2043			41.8632			52.3416		
Red. masses	--	9.9504			2.9794			7.2316		
Frc consts	--	0.0069			0.0031			0.0117		
IR Inten	--	0.0505			0.2118			0.6359		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.20	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.04	0.01	0.17	0.01
2	6	-0.07	0.12	0.13	0.00	0.00	-0.04	-0.01	-0.15	-0.11
3	6	-0.08	0.16	0.16	-0.01	-0.04	-0.12	-0.01	-0.15	-0.12
4	6	-0.11	0.13	0.11	-0.01	-0.05	-0.12	-0.01	-0.09	-0.01
5	6	-0.13	0.08	0.04	-0.01	-0.02	-0.07	0.00	-0.04	0.09
6	1	-0.12	0.15	0.12	-0.02	-0.07	-0.18	-0.01	-0.08	0.00
7	6	-0.12	0.05	0.03	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.05	0.07
8	1	-0.15	0.06	0.01	-0.01	-0.03	-0.09	0.00	0.00	0.17
9	6	-0.09	0.05	0.05	0.00	0.03	0.02	0.00	-0.09	-0.01
10	6	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.03	0.12
11	6	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.06	0.09	0.00	-0.10	-0.02
12	6	-0.09	-0.05	-0.05	0.00	0.03	0.02	0.00	-0.09	-0.01
13	6	-0.05	-0.01	-0.01	0.00	0.12	0.22	0.00	-0.13	-0.08
14	1	-0.05	0.14	0.16	0.00	-0.01	-0.05	-0.01	-0.20	-0.20
15	1	-0.07	0.21	0.22	-0.01	-0.07	-0.17	-0.01	-0.20	-0.20
16	6	-0.12	-0.04	-0.03	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.05	0.07
17	6	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.05	0.05	0.00	-0.03	0.11
18	6	-0.13	-0.07	-0.04	0.01	-0.02	-0.08	0.00	-0.05	0.08
19	1	-0.16	0.01	0.04	0.00	0.05	0.07	0.00	-0.02	0.11
20	1	-0.16	-0.01	-0.05	0.00	0.05	0.07	0.00	-0.03	0.10
21	1	-0.23	0.00	0.00	-0.01	0.09	0.03	-0.01	-0.04	0.12
22	6	-0.08	-0.11	-0.12	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.15	-0.11
23	1	0.01	-0.02	-0.04	0.31	-0.03	0.15	0.23	-0.16	-0.22
24	1	-0.04	0.03	0.02	0.00	0.30	0.58	-0.01	-0.02	0.14
25	1	-0.09	-0.04	-0.04	-0.29	0.14	0.04	-0.22	-0.22	-0.21
26	6	-0.11	-0.12	-0.10	0.01	-0.05	-0.13	0.00	-0.09	-0.01
27	1	-0.15	-0.05	-0.01	0.01	-0.03	-0.10	0.00	0.00	0.16
28	6	-0.09	-0.15	-0.14	0.00	-0.04	-0.11	0.00	-0.15	-0.12
29	1	-0.06	-0.12	-0.14	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.19	-0.19
30	1	-0.08	-0.19	-0.19	0.01	-0.06	-0.16	0.00	-0.19	-0.20
31	1	-0.12	-0.15	-0.11	0.01	-0.08	-0.18	0.00	-0.08	0.00
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	96.3870			103.9691			147.8803		
Red. masses	--	3.0119			1.9198			1.9379		
Frc consts	--	0.0165			0.0122			0.0250		
IR Inten	--	0.1191			0.0192			1.3874		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.03	0.00	0.01	0.04
2	6	0.01	0.07	0.15	0.00	0.04	0.08	0.00	0.02	0.04
3	6	0.01	0.04	0.09	0.00	0.01	0.02	0.00	0.01	0.01
4	6	0.00	-0.06	-0.09	-0.01	-0.07	-0.11	0.00	-0.02	-0.03
5	6	0.00	-0.08	-0.14	-0.01	-0.07	-0.12	0.01	-0.02	-0.04
6	1	-0.01	-0.11	-0.17	-0.02	-0.12	-0.20	0.00	-0.04	-0.06
7	6	0.01	-0.02	-0.04	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.01
8	1	-0.01	-0.15	-0.26	-0.02	-0.12	-0.20	0.01	-0.03	-0.06
9	6	0.01	0.02	0.05	0.00	0.01	0.02	0.00	0.02	0.02
10	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.03
11	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
12	6	0.01	-0.02	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04



13	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.03	-0.05	0.01	-0.05	-0.12
14	1	0.02	0.14	0.26	0.01	0.10	0.19	0.00	0.04	0.07
15	1	0.01	0.08	0.17	0.00	0.03	0.06	0.00	0.01	0.03
16	6	0.01	0.02	0.04	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
17	6	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.03	0.04	-0.04	-0.09	-0.12
18	6	0.00	0.10	0.17	0.01	-0.03	-0.06	0.01	-0.03	-0.07
19	1	-0.01	-0.05	-0.07	0.00	0.02	0.05	0.06	0.04	0.01
20	1	-0.01	0.03	0.04	0.00	0.03	0.08	0.06	-0.20	-0.35
21	1	0.10	-0.02	-0.01	0.02	0.06	0.02	-0.32	-0.17	-0.09
22	6	0.01	-0.07	-0.15	0.00	0.01	0.02	0.00	0.05	0.06
23	1	0.26	-0.06	-0.14	-0.43	0.12	0.13	0.34	-0.07	-0.37
24	1	0.01	0.12	0.22	0.01	-0.25	-0.49	0.00	0.09	0.16
25	1	-0.22	-0.08	-0.15	0.40	0.05	0.20	-0.31	-0.25	-0.31
26	6	0.00	0.08	0.12	0.01	-0.05	-0.08	0.01	-0.01	-0.06
27	1	-0.01	0.17	0.29	0.01	-0.05	-0.08	0.03	-0.06	-0.13
28	6	0.01	-0.03	-0.07	0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.03	0.03
29	1	0.01	-0.14	-0.28	0.00	0.03	0.07	-0.01	0.06	0.10
30	1	0.01	-0.07	-0.15	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.05	0.05
31	1	-0.01	0.14	0.23	0.01	-0.08	-0.13	0.02	-0.04	-0.11

		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies	--	151.6084			156.5076			180.1625		
Red. masses	--	1.3158			2.2931			5.1827		
Frc consts	--	0.0178			0.0331			0.0991		
IR Inten	--	0.3166			0.2424			4.5073		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.01	0.00	0.02	0.00	0.01	0.04	0.00	0.05	0.07
2	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.05	0.00	-0.03	-0.04
3	6	-0.01	0.01	-0.03	0.00	-0.02	-0.05	0.01	0.06	0.13
4	6	-0.02	0.01	-0.02	0.01	0.02	0.01	0.02	0.03	0.08
5	6	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.03	0.03	0.00	-0.07	-0.11
6	1	-0.02	0.01	-0.03	0.01	0.03	0.04	0.03	0.08	0.18
7	6	-0.01	0.01	0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.09	-0.17
8	1	-0.04	0.01	0.00	0.02	0.05	0.08	0.00	-0.10	-0.16
9	6	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.09	-0.17
10	6	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.01	-0.03	0.00	-0.07	-0.12
11	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.08	-0.14
12	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.10	-0.18
13	6	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.05	0.08	0.00	0.04	0.12
14	1	0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.03	-0.07	0.00	-0.04	-0.06
15	1	-0.01	0.01	-0.05	0.00	-0.04	-0.08	0.02	0.14	0.27
16	6	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.10	-0.18
17	6	0.09	-0.06	-0.07	-0.03	-0.15	-0.19	0.00	0.04	0.01
18	6	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.05	0.06	0.00	-0.07	-0.11
19	1	-0.13	-0.31	-0.49	0.04	-0.06	-0.18	0.00	0.03	0.09
20	1	-0.14	0.21	0.27	0.04	-0.21	-0.41	0.00	0.02	0.08
21	1	0.66	-0.11	-0.04	-0.20	-0.32	-0.12	-0.01	0.16	-0.04
22	6	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.03	-0.08	0.00	-0.03	-0.05
23	1	0.05	-0.01	-0.06	-0.30	0.08	0.29	0.10	-0.12	0.23
24	1	0.00	0.02	0.02	0.00	-0.08	-0.18	0.00	0.15	0.32
25	1	-0.05	-0.04	-0.05	0.27	0.21	0.25	-0.10	0.22	0.05
26	6	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.02	0.03	0.09
27	1	-0.04	-0.01	-0.02	0.00	0.09	0.14	0.00	-0.10	-0.17
28	6	-0.01	0.00	0.02	0.00	-0.03	-0.08	-0.01	0.06	0.14
29	1	0.00	0.01	0.03	0.00	-0.05	-0.12	0.00	-0.04	-0.06
30	1	-0.01	0.00	0.03	0.01	-0.06	-0.15	-0.02	0.15	0.30
31	1	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.06	0.05	-0.03	0.09	0.19

		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies	--	244.3195			268.5931			368.2209		
Red. masses	--	4.3838			4.5174			2.9199		
Frc consts	--	0.1542			0.1920			0.2333		
IR Inten	--	0.0323			0.9843			0.2407		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
2	6	0.01	0.07	0.14	0.10	0.03	-0.02	-0.07	0.00	0.00
3	6	-0.01	-0.08	-0.13	0.04	0.16	-0.07	-0.04	-0.09	0.03
4	6	-0.02	-0.07	-0.12	-0.05	0.16	-0.08	0.02	-0.08	0.05
5	6	0.01	0.08	0.15	-0.11	0.03	-0.02	0.06	-0.01	0.01
6	1	-0.03	-0.16	-0.28	-0.10	0.22	-0.13	0.05	-0.12	0.08
7	6	0.01	0.09	0.16	-0.03	-0.09	0.06	0.01	0.04	-0.04
8	1	0.02	0.12	0.22	-0.24	0.02	-0.04	0.11	0.00	0.03
9	6	0.01	0.08	0.16	0.01	-0.09	0.04	-0.03	0.05	-0.03
10	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.08	-0.03	0.00	-0.02
11	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.12	0.05	0.01	0.00	0.00
12	6	0.00	-0.08	-0.16	-0.02	-0.10	0.04	-0.03	-0.04	0.03
13	6	0.02	0.00	0.00	0.03	-0.12	0.07	0.30	-0.01	0.01
14	1	0.01	0.11	0.21	0.23	0.02	-0.03	-0.10	0.02	0.02
15	1	-0.02	-0.17	-0.30	0.09	0.24	-0.09	-0.07	-0.14	0.06
16	6	0.00	-0.08	-0.15	0.02	-0.09	0.05	-0.01	-0.03	0.02
17	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.08	-0.13	0.02	-0.01
18	6	0.00	-0.07	-0.14	0.12	0.03	-0.03	0.02	0.01	0.00
19	1	0.04	0.06	0.07	0.01	-0.10	0.07	-0.25	-0.14	-0.11
20	1	0.04	-0.07	-0.08	-0.01	-0.11	0.07	-0.25	0.17	0.11
21	1	-0.14	-0.01	0.00	0.00	-0.12	0.09	0.07	0.04	-0.01
22	6	0.01	-0.07	-0.13	-0.12	0.03	-0.02	-0.08	0.01	0.01
23	1	-0.01	0.00	0.02	0.03	-0.14	0.09	0.34	-0.09	0.07
24	1	0.02	-0.01	-0.03	0.06	-0.08	0.04	0.39	0.14	-0.11
25	1	0.05	0.02	0.02	0.04	-0.12	0.08	0.41	-0.12	0.07
26	6	-0.02	0.06	0.11	0.05	0.17	-0.09	-0.01	0.07	-0.04
27	1	0.01	-0.11	-0.20	0.25	0.02	-0.04	0.06	0.01	0.01
28	6	-0.01	0.07	0.12	-0.05	0.18	-0.07	-0.06	0.06	-0.04
29	1	0.01	-0.10	-0.19	-0.25	0.03	-0.03	-0.11	0.01	0.02
30	1	-0.02	0.16	0.29	-0.10	0.26	-0.09	-0.08	0.09	-0.07
31	1	-0.03	0.15	0.27	0.10	0.24	-0.13	0.01	0.10	-0.07

13

14

15

		A	A	A
Frequencies	--	383.1256	384.8505	392.3362
Red. masses	--	4.9189	2.3798	4.4325
Frc consts	--	0.4254	0.2077	0.4020
IR Inten	--	5.7666	1.3993	7.4231

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01
2	6	0.12	0.02	0.00	-0.05	0.01	-0.02	-0.12	0.00	0.01
3	6	0.15	0.02	0.03	-0.06	0.01	-0.03	-0.13	0.04	0.09
4	6	0.13	-0.03	-0.06	-0.06	0.03	0.02	-0.13	-0.06	-0.06
5	6	0.11	-0.02	0.01	-0.06	-0.01	0.00	-0.10	0.02	0.01
6	1	0.11	-0.05	-0.15	-0.07	0.06	0.05	-0.14	-0.14	-0.17
7	6	0.08	0.01	0.06	-0.05	-0.02	-0.01	-0.06	0.06	0.08
8	1	0.13	-0.02	0.00	-0.04	-0.02	-0.01	-0.08	0.02	0.02
9	6	0.08	-0.01	-0.06	-0.05	0.01	0.02	-0.06	-0.02	-0.11
10	6	0.00	0.01	0.18	-0.01	-0.02	-0.07	0.00	0.15	0.20
11	6	-0.01	0.04	-0.15	-0.02	0.00	0.06	0.00	-0.10	-0.19
12	6	-0.10	-0.01	-0.06	-0.02	0.01	0.03	0.04	-0.04	-0.11
13	6	0.06	0.12	-0.03	0.14	-0.04	0.01	0.06	0.01	0.04
14	1	0.14	0.04	0.03	-0.02	0.01	-0.03	-0.13	0.02	0.03
15	1	0.14	0.05	0.11	-0.06	0.00	-0.05	-0.12	0.10	0.19
16	6	-0.12	0.03	0.04	-0.02	0.00	-0.04	0.04	0.06	0.09
17	6	0.12	-0.12	0.08	0.25	0.04	-0.02	0.05	-0.04	-0.02
18	6	-0.16	0.00	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.08	0.03	0.02
19	1	0.23	0.04	0.04	0.48	0.34	0.11	0.10	0.05	-0.16
20	1	0.23	-0.26	-0.05	0.48	-0.29	-0.06	0.10	-0.08	-0.19
21	1	0.00	-0.26	0.14	0.00	0.10	-0.05	0.00	-0.31	0.09
22	6	-0.14	0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.09	0.00	0.03
23	1	0.10	0.01	0.07	0.16	-0.05	0.00	0.12	-0.18	0.21
24	1	0.09	0.22	0.02	0.19	0.05	-0.10	0.08	0.12	0.17

25	1	0.06	0.21	-0.04	0.21	-0.16	0.06	0.05	0.21	0.02
26	6	-0.18	-0.05	-0.06	-0.03	-0.01	0.03	0.11	-0.06	-0.08
27	1	-0.17	0.01	0.02	-0.01	0.02	0.00	0.08	0.04	0.05
28	6	-0.18	0.00	0.04	-0.02	-0.04	-0.01	0.10	0.03	0.08
29	1	-0.13	0.04	0.06	0.01	-0.02	0.01	0.11	0.02	0.07
30	1	-0.17	0.01	0.11	-0.01	-0.06	-0.05	0.09	0.11	0.19
31	1	-0.18	-0.09	-0.14	-0.04	0.00	0.07	0.11	-0.15	-0.19
		16				17			18	
		A				A			A	
Frequencies	--	408.7556			432.9505			482.7474		
Red. masses	--	3.1266			5.5336			2.8556		
Frc consts	--	0.3078			0.6111			0.3921		
IR Inten	--	12.8270			0.9677			0.1142		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.02	0.08	0.14	-0.16	0.14	-0.05	-0.01	-0.03	-0.09
3	6	0.01	-0.02	-0.07	-0.10	0.05	-0.02	0.01	0.01	0.03
4	6	0.01	-0.02	-0.08	0.12	0.03	-0.04	0.02	0.03	0.06
5	6	0.02	0.08	0.14	0.17	0.13	-0.06	0.01	-0.05	-0.10
6	1	0.00	-0.03	-0.11	0.19	-0.09	0.01	0.02	-0.03	-0.02
7	6	0.00	-0.04	-0.06	0.11	0.12	-0.08	0.01	0.10	0.13
8	1	0.03	0.20	0.35	0.22	0.14	-0.03	-0.01	-0.21	-0.40
9	6	0.00	-0.05	-0.06	-0.10	0.13	-0.08	0.00	0.09	0.16
10	6	0.00	-0.06	-0.14	0.07	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.01
11	6	0.00	-0.09	-0.10	-0.07	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00
12	6	0.00	-0.04	-0.05	-0.10	-0.12	0.08	0.00	-0.10	-0.14
13	6	-0.02	-0.04	0.03	-0.12	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00
14	1	0.05	0.20	0.38	-0.21	0.16	-0.01	-0.04	-0.21	-0.41
15	1	0.01	-0.02	-0.08	-0.18	-0.06	0.06	-0.01	-0.07	-0.09
16	6	0.01	-0.03	-0.05	0.11	-0.12	0.08	0.01	-0.08	-0.12
17	6	0.01	0.06	-0.02	0.08	-0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.02
18	6	-0.02	0.07	0.14	0.16	-0.13	0.05	0.00	0.04	0.11
19	1	0.01	0.05	0.06	0.13	0.06	-0.03	0.01	0.05	0.00
20	1	0.01	0.04	0.05	0.13	-0.07	0.03	0.01	0.00	-0.03
21	1	0.00	0.19	-0.08	0.09	-0.02	0.01	-0.05	0.03	-0.02
22	6	-0.02	0.07	0.14	-0.16	-0.14	0.04	-0.02	0.04	0.09
23	1	0.03	-0.13	0.09	-0.16	0.05	-0.03	-0.03	-0.01	0.00
24	1	-0.03	0.01	0.15	-0.17	-0.08	0.04	-0.03	-0.04	0.04
25	1	-0.09	0.07	-0.01	-0.17	0.05	-0.03	-0.03	0.00	-0.01
26	6	0.00	-0.04	-0.07	0.11	-0.03	0.04	0.00	-0.03	-0.06
27	1	-0.03	0.18	0.34	0.21	-0.15	0.02	-0.01	0.20	0.39
28	6	-0.01	-0.03	-0.06	-0.11	-0.04	0.02	-0.01	-0.01	-0.03
29	1	-0.03	0.18	0.35	-0.20	-0.16	0.00	-0.05	0.19	0.38
30	1	-0.01	-0.04	-0.08	-0.19	0.07	-0.05	-0.02	0.06	0.09
31	1	0.00	-0.05	-0.11	0.19	0.09	-0.02	0.01	0.01	-0.02
		19				20			21	
		A				A			A	
Frequencies	--	487.9242			512.4416			581.1777		
Red. masses	--	4.8562			3.3882			4.2634		
Frc consts	--	0.6812			0.5242			0.8484		
IR Inten	--	3.2229			1.1134			7.6175		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.06	-0.02	0.05	0.00	-0.05	-0.09	0.11	-0.10	0.00
3	6	-0.11	-0.03	-0.04	0.01	0.08	0.15	0.10	-0.01	0.06
4	6	-0.10	0.02	0.04	-0.02	-0.08	-0.13	-0.12	-0.05	-0.01
5	6	-0.05	0.04	-0.02	0.01	0.04	0.07	-0.12	-0.04	0.07
6	1	-0.07	0.02	0.12	-0.04	-0.24	-0.40	-0.19	-0.02	-0.19
7	6	0.01	-0.06	-0.04	0.01	0.08	0.14	-0.06	0.00	0.08
8	1	-0.04	0.04	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.12	-0.09	-0.01
9	6	0.02	0.05	0.00	0.00	-0.05	-0.10	0.07	-0.02	0.04
10	6	-0.01	-0.22	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.14
11	6	0.01	0.17	-0.06	0.01	0.00	0.00	0.02	0.07	-0.08

12	6	-0.02	0.01	-0.04	0.00	0.05	0.10	-0.06	-0.03	0.06
13	6	0.03	0.26	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.01	0.19	-0.09
14	1	-0.06	0.01	0.08	-0.01	-0.07	-0.13	0.11	-0.16	-0.10
15	1	-0.09	-0.03	-0.10	0.03	0.19	0.35	0.17	0.10	0.01
16	6	-0.02	-0.09	-0.07	0.01	-0.08	-0.14	0.04	-0.02	0.11
17	6	0.00	-0.22	0.19	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.14	-0.12
18	6	0.05	0.05	0.01	0.01	-0.04	-0.07	0.11	-0.05	0.08
19	1	0.02	-0.21	0.24	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.15	-0.03
20	1	0.00	-0.24	0.25	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.10	0.00
21	1	0.00	-0.10	0.14	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.29	-0.18
22	6	0.05	-0.01	0.08	0.00	0.05	0.09	-0.11	-0.11	-0.01
23	1	0.03	0.29	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.16	-0.04
24	1	0.01	0.23	-0.14	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.17	-0.04
25	1	0.02	0.21	-0.14	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.29	-0.11
26	6	0.09	0.02	0.01	-0.01	0.08	0.13	0.10	-0.03	-0.02
27	1	0.06	0.10	0.11	0.01	0.00	-0.01	0.16	-0.11	-0.02
28	6	0.10	-0.02	-0.05	0.01	-0.07	-0.15	-0.09	0.01	0.06
29	1	0.04	0.05	0.18	-0.01	0.06	0.12	-0.14	-0.17	-0.13
30	1	0.08	0.00	-0.09	0.02	-0.19	-0.35	-0.16	0.11	0.00
31	1	0.07	0.04	0.11	-0.03	0.23	0.39	0.17	-0.01	-0.21

		22			23			24		
		A			A			A		
Frequencies	--	588.3560			596.0847			622.4420		
Red. masses	--	3.5615			3.9912			6.5427		
Frc consts	--	0.7264			0.8355			1.4935		
IR Inten	--	25.0701			0.9794			4.6472		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.06	0.01	0.07	-0.02	-0.04	0.01	0.02	0.21	-0.12
3	6	0.06	-0.07	-0.08	-0.07	0.09	-0.03	0.19	0.01	-0.01
4	6	-0.04	0.01	0.08	0.06	0.07	-0.05	0.19	-0.03	-0.01
5	6	-0.08	-0.07	-0.03	0.01	-0.04	0.02	0.00	-0.22	0.12
6	1	-0.06	0.22	0.29	0.06	0.05	-0.06	0.07	0.15	-0.11
7	6	-0.05	-0.05	-0.11	0.09	-0.13	0.08	-0.13	-0.03	0.03
8	1	-0.04	0.03	0.15	-0.20	-0.03	0.02	-0.02	-0.22	0.12
9	6	0.03	-0.02	-0.05	-0.09	-0.11	0.09	-0.12	0.04	-0.01
10	6	-0.01	0.21	0.20	0.20	0.01	0.00	-0.14	0.00	0.00
11	6	0.02	0.05	0.06	-0.19	0.02	-0.01	-0.14	0.01	0.01
12	6	-0.02	-0.04	-0.05	-0.10	0.11	-0.09	-0.13	-0.04	0.00
13	6	0.00	0.05	-0.02	0.05	0.03	-0.01	-0.03	0.00	0.00
14	1	0.05	0.13	0.28	0.18	-0.05	-0.03	-0.01	0.22	-0.11
15	1	0.09	-0.02	-0.08	-0.08	0.07	-0.02	0.08	-0.15	0.10
16	6	0.04	-0.08	-0.11	0.11	0.12	-0.08	-0.12	0.03	-0.03
17	6	0.00	0.07	-0.05	-0.03	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00
18	6	0.07	-0.08	-0.02	0.05	0.02	-0.01	0.02	0.22	-0.11
19	1	0.02	0.11	-0.22	-0.20	-0.23	0.16	0.03	0.10	-0.12
20	1	0.02	0.08	-0.21	-0.19	0.26	-0.19	0.03	-0.09	0.11
21	1	0.01	-0.22	0.07	-0.15	0.01	-0.01	0.07	0.00	0.00
22	6	-0.06	0.02	0.08	-0.05	0.02	0.00	0.01	-0.22	0.11
23	1	-0.01	0.15	-0.13	0.18	-0.12	0.05	0.04	-0.06	0.02
24	1	-0.02	-0.01	-0.06	0.20	0.30	-0.15	0.05	0.15	-0.08
25	1	-0.03	-0.05	-0.04	0.18	-0.15	0.08	0.04	-0.09	0.04
26	6	0.03	0.02	0.07	0.09	-0.09	0.06	0.20	0.02	0.00
27	1	0.07	0.03	0.18	-0.17	0.02	0.01	-0.01	0.23	-0.09
28	6	-0.06	-0.05	-0.08	-0.09	-0.10	0.03	0.18	-0.01	0.02
29	1	-0.07	0.12	0.28	0.14	0.04	0.05	-0.01	-0.21	0.12
30	1	-0.08	-0.01	-0.09	-0.12	-0.06	0.02	0.07	0.17	-0.07
31	1	0.05	0.22	0.28	0.11	-0.02	0.07	0.09	-0.15	0.10

		25			26			27		
		A			A			A		
Frequencies	--	623.6714			679.8446			768.5936		
Red. masses	--	2.9942			5.8203			4.0639		
Frc consts	--	0.6862			1.5850			1.4144		

IR Inten		5.9857			0.0255			4.5215		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.01	-0.05	-0.08	0.07	-0.24	0.13	-0.05	-0.04	0.03
3	6	0.00	0.05	0.08	-0.08	-0.02	0.01	-0.13	0.03	-0.11
4	6	-0.01	-0.05	-0.10	-0.08	0.03	0.00	0.13	0.09	0.00
5	6	0.01	0.05	0.08	0.07	0.23	-0.14	0.05	-0.09	-0.04
6	1	-0.01	-0.08	-0.13	0.04	-0.15	0.10	0.18	0.12	0.19
7	6	0.00	-0.03	-0.07	0.12	0.05	-0.04	0.04	-0.01	0.20
8	1	0.03	0.16	0.27	0.14	0.23	-0.15	-0.13	-0.13	-0.13
9	6	0.00	-0.04	-0.07	0.11	-0.07	0.03	-0.05	-0.14	-0.06
10	6	0.00	0.01	0.02	0.00	0.03	0.04	0.00	0.01	0.03
11	6	0.00	0.12	0.24	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
12	6	0.00	-0.04	-0.08	-0.12	-0.07	0.03	0.02	-0.02	0.15
13	6	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.06	0.03	0.01	0.12	-0.05
14	1	0.00	0.01	0.03	0.15	-0.24	0.14	0.13	0.17	0.42
15	1	0.02	0.19	0.32	0.05	0.16	-0.10	-0.16	0.09	0.16
16	6	0.00	-0.04	-0.07	-0.12	0.05	-0.04	-0.03	-0.15	-0.06
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.05	0.00	0.10	-0.08
18	6	-0.01	0.04	0.08	-0.07	0.23	-0.14	-0.05	-0.03	0.05
19	1	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.08	-0.09	-0.01	0.10	-0.08
20	1	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.07	-0.08	0.00	0.11	-0.09
21	1	0.00	-0.04	0.02	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.08	-0.07
22	6	0.01	-0.04	-0.08	-0.07	-0.24	0.13	0.06	-0.06	-0.02
23	1	0.00	0.26	-0.25	0.01	-0.06	0.02	0.01	0.10	-0.03
24	1	0.00	-0.09	-0.16	0.00	-0.06	0.03	0.00	0.12	-0.06
25	1	0.00	-0.33	0.03	0.01	-0.07	0.04	0.00	0.14	-0.07
26	6	0.00	-0.06	-0.10	0.08	0.03	0.00	-0.11	0.03	-0.09
27	1	-0.02	0.16	0.29	-0.13	0.23	-0.15	0.09	0.10	0.28
28	6	0.00	0.05	0.08	0.08	-0.02	0.01	0.12	0.10	0.02
29	1	0.00	0.02	0.04	-0.14	-0.24	0.14	-0.08	-0.14	-0.19
30	1	-0.01	0.18	0.33	-0.04	0.16	-0.10	0.16	0.04	0.06
31	1	0.01	-0.07	-0.13	-0.04	-0.15	0.10	-0.15	-0.01	-0.02

		28			29			30		
		A			A			A		
Frequencies	--	769.0089			798.0850			802.0408		
Red. masses	--	3.8927			1.4971			1.3416		
Frc consts	--	1.3563			0.5618			0.5085		
IR Inten	--	2.4440			125.9660			30.1858		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.05	-0.03	-0.02	0.00	0.04	0.07	-0.01	-0.02	-0.03
3	6	-0.09	0.10	0.05	-0.01	0.03	0.04	-0.01	0.00	-0.01
4	6	0.08	0.00	-0.10	0.01	0.02	0.03	0.00	-0.01	-0.03
5	6	0.03	-0.02	0.07	0.01	0.03	0.06	0.00	-0.02	-0.02
6	1	0.11	-0.06	-0.11	-0.02	-0.23	-0.41	0.02	0.09	0.16
7	6	0.02	-0.16	-0.12	0.00	-0.05	-0.08	0.00	0.00	0.00
8	1	-0.07	0.12	0.32	-0.04	-0.14	-0.24	0.01	0.09	0.17
9	6	-0.01	0.01	0.17	0.00	-0.03	-0.03	0.00	0.02	0.04
10	6	0.01	0.01	0.04	0.00	0.03	0.05	0.00	0.01	0.02
11	6	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
12	6	0.04	-0.14	-0.10	0.00	0.01	0.05	0.00	-0.04	-0.06
13	6	0.01	0.09	-0.05	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00
14	1	0.04	-0.22	-0.37	-0.01	-0.21	-0.38	0.00	0.04	0.08
15	1	-0.14	-0.01	-0.02	-0.05	-0.27	-0.48	0.00	0.10	0.18
16	6	-0.03	0.01	0.19	0.00	-0.05	-0.08	0.00	-0.03	-0.05
17	6	0.01	0.08	-0.07	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	-0.04	-0.06	-0.05	0.00	0.01	0.03	-0.01	0.04	0.06
19	1	0.00	0.07	-0.07	0.00	0.02	-0.05	-0.01	-0.01	-0.01
20	1	0.00	0.10	-0.08	0.00	0.02	-0.05	-0.01	0.02	-0.03
21	1	0.02	0.04	-0.05	-0.01	-0.07	0.03	0.00	-0.03	0.01
22	6	0.03	-0.02	0.06	0.01	0.00	0.01	0.00	0.03	0.07
23	1	-0.02	0.12	-0.05	-0.01	0.03	-0.03	0.00	0.04	-0.03

24	1	-0.02	0.06	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.02	-0.02
25	1	-0.01	0.12	-0.06	0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.00
26	6	-0.10	0.09	0.03	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.03	0.05
27	1	0.10	-0.16	-0.22	0.01	0.01	0.03	0.03	-0.19	-0.34
28	6	0.10	0.01	-0.10	0.01	0.03	0.04	0.00	0.02	0.04
29	1	-0.11	0.14	0.37	0.00	-0.13	-0.24	0.00	-0.17	-0.31
30	1	0.12	0.03	0.05	0.03	-0.09	-0.17	0.03	-0.27	-0.48
31	1	-0.14	0.08	0.14	0.00	-0.09	-0.15	0.03	-0.25	-0.44

31					32			33		
A					A			A		
Frequencies	--	818.4282			824.9876			902.8933		
Red. masses	--	2.3415			2.9144			2.9782		
Frc consts	--	0.9241			1.1687			1.4305		
IR Inten	--	10.6258			9.8681			0.4322		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.01	0.00	-0.03	-0.05	0.11	-0.04	0.04	0.07	0.01
3	6	0.00	0.02	0.03	-0.03	0.00	-0.01	0.13	-0.05	0.04
4	6	-0.02	-0.05	-0.07	-0.07	-0.01	0.03	-0.12	-0.06	0.02
5	6	-0.01	-0.02	-0.02	-0.07	-0.09	0.05	-0.03	0.04	-0.09
6	1	0.01	0.14	0.24	-0.12	0.03	-0.05	-0.15	0.09	0.13
7	6	0.00	-0.05	-0.09	0.04	-0.04	0.06	0.04	0.05	0.02
8	1	0.03	0.27	0.49	-0.17	-0.13	-0.02	0.09	0.20	0.20
9	6	0.01	0.09	0.15	0.05	0.05	-0.08	-0.06	0.00	-0.04
10	6	0.02	0.03	0.03	0.19	-0.01	-0.01	0.12	-0.01	0.00
11	6	0.02	-0.04	-0.09	0.15	0.00	0.02	-0.14	0.01	0.00
12	6	0.00	0.07	0.16	0.05	-0.07	0.03	-0.07	-0.01	0.02
13	6	0.00	-0.02	-0.03	0.03	-0.01	0.01	-0.06	0.01	0.00
14	1	-0.03	-0.09	-0.20	-0.20	0.13	-0.01	-0.01	-0.06	-0.22
15	1	0.01	0.09	0.15	-0.07	-0.06	-0.02	0.17	-0.07	-0.16
16	6	0.01	-0.04	-0.11	0.05	0.06	-0.02	0.04	-0.05	0.00
17	6	0.01	0.00	0.02	0.05	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00
18	6	0.00	0.01	-0.02	-0.07	0.10	-0.05	-0.03	-0.06	0.08
19	1	-0.02	-0.04	0.01	-0.14	-0.29	0.24	-0.08	-0.19	0.16
20	1	-0.02	0.04	-0.05	-0.14	0.28	-0.22	-0.08	0.20	-0.16
21	1	-0.02	-0.04	0.03	-0.14	0.02	-0.01	-0.08	0.01	-0.01
22	6	-0.01	-0.02	-0.02	-0.06	-0.11	0.05	0.04	-0.07	0.00
23	1	-0.04	-0.16	0.16	-0.12	0.19	-0.09	0.10	-0.16	0.06
24	1	-0.02	0.00	0.11	-0.13	-0.33	0.14	0.11	0.32	-0.15
25	1	0.01	0.25	-0.04	-0.13	0.14	-0.09	0.11	-0.19	0.11
26	6	0.00	-0.03	-0.06	-0.06	0.02	-0.01	-0.12	0.06	-0.02
27	1	-0.06	0.23	0.37	-0.17	0.07	-0.11	0.08	-0.18	-0.14
28	6	-0.01	0.02	0.04	-0.04	-0.02	0.00	0.14	0.05	-0.04
29	1	-0.01	-0.13	-0.22	-0.17	-0.08	0.10	-0.03	0.03	0.18
30	1	-0.02	0.04	0.05	-0.08	0.05	0.01	0.18	0.05	0.13
31	1	-0.02	0.06	0.13	-0.11	-0.05	0.01	-0.16	-0.07	-0.09

34					35			36		
A					A			A		
Frequencies	--	905.0558			912.0575			1015.2536		
Red. masses	--	1.7244			1.6856			1.3603		
Frc consts	--	0.8322			0.8261			0.8261		
IR Inten	--	0.3616			1.3898			0.2774		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.01	0.02	0.09	0.00	-0.03	-0.05	0.00	-0.05	-0.09
3	6	-0.04	0.04	0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.04	0.07
4	6	0.04	0.00	-0.04	0.00	0.01	0.02	0.01	0.04	0.06
5	6	0.00	-0.07	-0.07	0.01	0.03	0.06	-0.01	-0.04	-0.08
6	1	0.08	0.12	0.23	-0.01	-0.09	-0.16	-0.04	-0.22	-0.39
7	6	-0.01	0.03	0.07	-0.01	-0.03	-0.06	0.00	0.01	0.01
8	1	0.03	0.22	0.44	-0.03	-0.16	-0.28	0.04	0.24	0.40
9	6	0.02	-0.05	-0.07	0.00	0.03	0.06	0.00	0.01	0.02
10	6	-0.04	0.00	-0.01	0.00	0.03	0.03	0.00	-0.01	0.00

11	6	0.04	0.00	0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
12	6	0.02	0.03	0.03	0.00	0.04	0.08	0.00	0.00	0.00
13	6	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.01
14	1	0.00	-0.23	-0.38	0.01	0.13	0.25	0.02	0.26	0.48
15	1	-0.07	-0.14	-0.24	0.01	0.09	0.17	-0.03	-0.25	-0.42
16	6	-0.01	-0.01	-0.04	0.00	-0.04	-0.08	-0.01	0.00	0.00
17	6	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
18	6	0.01	0.06	0.05	-0.01	0.05	0.09	0.00	0.00	0.00
19	1	0.03	0.06	-0.04	0.00	0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.02
20	1	0.02	-0.07	0.06	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.01	0.00
21	1	0.04	0.01	-0.01	0.00	-0.06	0.03	0.00	0.02	-0.01
22	6	-0.01	-0.01	-0.07	0.00	-0.04	-0.08	0.00	0.01	0.00
23	1	-0.03	0.07	-0.04	-0.01	-0.10	0.09	0.00	-0.03	0.03
24	1	-0.03	-0.08	0.04	0.00	0.03	0.06	0.00	0.00	0.02
25	1	-0.02	0.02	-0.02	0.00	0.12	-0.02	-0.01	0.06	-0.02
26	6	0.04	0.00	0.04	0.00	0.02	0.03	0.01	0.00	0.00
27	1	0.01	-0.15	-0.32	0.05	-0.25	-0.45	-0.01	0.01	0.01
28	6	-0.04	-0.04	-0.02	0.00	-0.02	-0.04	0.00	0.00	0.00
29	1	0.01	0.17	0.27	-0.01	0.21	0.40	0.00	0.01	0.01
30	1	-0.07	0.10	0.18	-0.02	0.15	0.28	0.00	-0.01	-0.02
31	1	0.07	-0.08	-0.15	0.02	-0.13	-0.23	0.00	-0.01	-0.01

		37			38			39		
		A			A			A		
Frequencies	--	1018.6339			1034.3575			1040.7272		
Red. masses	--	1.3544			2.3856			5.5839		
Frc consts	--	0.8280			1.5038			3.5634		
IR Inten	--	0.1179			2.3802			10.8551		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.05	-0.04	-0.02	0.20	-0.10
3	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.10	-0.04	0.05	-0.05	0.02
4	6	0.01	0.01	0.00	-0.08	-0.08	0.05	-0.12	-0.08	0.05
5	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.08	0.04	0.02	0.12	-0.06
6	1	0.00	0.00	-0.02	-0.04	-0.16	0.10	-0.05	-0.16	0.17
7	6	-0.01	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.14	-0.14	0.06
8	1	0.00	0.01	0.01	0.18	-0.09	0.04	-0.02	0.09	-0.11
9	6	0.00	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	0.02	-0.04	0.02
10	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.21	0.22
11	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.05	0.02
12	6	0.00	-0.01	-0.02	0.06	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.02
13	6	0.00	0.01	0.01	-0.09	-0.01	0.00	-0.01	0.04	-0.01
14	1	0.00	0.00	0.02	0.20	0.08	0.02	-0.11	0.20	-0.12
15	1	0.00	-0.01	-0.01	-0.03	0.16	-0.16	-0.02	-0.12	0.08
16	6	0.00	-0.01	-0.02	0.08	0.00	0.00	-0.12	-0.14	0.06
17	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.01	-0.01	0.13	-0.19
18	6	-0.01	0.04	0.08	0.02	0.05	-0.02	-0.01	0.14	-0.06
19	1	-0.01	-0.01	0.00	0.09	0.26	-0.23	0.05	0.21	-0.02
20	1	0.00	0.01	-0.02	0.09	-0.27	0.21	-0.02	0.12	0.05
21	1	0.00	-0.03	0.01	0.15	-0.02	0.02	0.03	0.33	-0.26
22	6	0.00	0.05	0.09	0.02	-0.07	0.05	0.03	0.18	-0.09
23	1	0.00	0.05	-0.04	0.12	-0.20	0.06	0.01	0.02	-0.01
24	1	0.00	-0.04	-0.03	0.09	0.31	-0.15	0.02	0.08	-0.05
25	1	-0.01	-0.04	0.00	0.11	-0.19	0.13	0.00	-0.01	0.00
26	6	0.01	-0.04	-0.07	-0.09	0.09	-0.06	0.10	-0.07	0.03
27	1	0.03	-0.23	-0.41	0.20	0.06	-0.02	0.06	0.11	-0.12
28	6	0.01	-0.03	-0.07	-0.06	-0.09	0.04	-0.06	-0.07	0.03
29	1	0.02	-0.26	-0.49	0.17	-0.11	0.00	0.13	0.17	-0.12
30	1	-0.03	0.23	0.38	-0.02	-0.14	0.14	0.01	-0.16	0.11
31	1	-0.03	0.23	0.42	-0.04	0.18	-0.11	0.04	-0.11	0.15

		40			41			42		
		A			A			A		
Frequencies	--	1050.6459			1051.8894			1054.9948		
Red. masses	--	1.3841			1.3745			2.6187		

Frc consts	--	0.9002			0.8960			1.7172		
IR Inten	--	0.0927			0.1559			19.6535		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	-0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.01
3	6	0.01	0.05	0.10	0.01	-0.01	0.01	-0.07	0.06	-0.03
4	6	-0.01	-0.06	-0.10	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.01
5	6	0.01	0.03	0.05	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.09	0.06
6	1	0.06	0.31	0.56	0.00	0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.02
7	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.01	-0.01
8	1	-0.03	-0.17	-0.30	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	-0.11	0.04
9	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.10	0.08	-0.04
10	6	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.10
11	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.13	-0.07
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.06	-0.03
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.10	0.06
14	1	0.02	0.14	0.26	-0.02	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.02
15	1	-0.04	-0.29	-0.51	0.00	-0.03	-0.01	-0.03	0.13	-0.09
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.01	-0.01
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.06	-0.11
18	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.05	-0.01	-0.09	0.05
19	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.05	0.38
20	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.06	-0.03	0.36
21	1	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.54	-0.35
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.05	-0.02	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.04	-0.03	0.01	-0.09	0.02
24	1	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.02	0.00	-0.12	0.03
25	1	-0.01	0.03	-0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.16	0.07
26	6	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.06	0.10	0.03	-0.03	0.02
27	1	-0.02	-0.01	-0.01	-0.02	0.16	0.29	-0.04	-0.11	0.04
28	6	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.06	-0.10	0.07	0.07	-0.04
29	1	-0.02	0.01	0.01	0.02	-0.15	-0.29	-0.06	0.00	-0.01
30	1	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.29	0.52	0.02	0.17	-0.08
31	1	0.00	0.00	0.02	0.05	-0.29	-0.54	0.02	-0.06	0.02

		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies	--	1062.8352			1072.0532			1073.3654		
Red. masses	--	2.2347			1.8577			1.8853		
Frc consts	--	1.4873			1.2579			1.2798		
IR Inten	--	1.0748			7.5805			3.7806		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.05	-0.06	0.03	0.01	0.02	0.01	0.01	0.00	-0.02
3	6	0.07	-0.09	0.06	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00
4	6	0.08	0.09	-0.07	-0.01	-0.02	0.02	-0.01	-0.02	0.01
5	6	-0.05	0.05	-0.02	0.02	0.03	-0.01	0.01	0.02	-0.02
6	1	0.00	0.26	-0.11	0.01	-0.07	0.02	0.01	-0.06	0.01
7	6	-0.02	-0.02	0.01	-0.03	0.02	-0.02	-0.03	0.02	-0.02
8	1	-0.31	0.06	-0.02	0.12	0.01	-0.03	0.10	0.03	0.00
9	6	-0.01	0.03	-0.02	-0.05	-0.07	0.00	-0.05	-0.03	0.06
10	6	0.00	0.00	0.05	0.01	0.09	0.02	0.01	0.09	0.01
11	6	-0.01	0.04	-0.02	-0.01	-0.04	0.14	-0.01	-0.14	-0.08
12	6	0.00	0.04	-0.02	0.04	-0.05	-0.01	0.03	-0.02	0.05
13	6	0.01	-0.03	0.01	0.01	0.01	-0.13	0.01	0.11	0.09
14	1	-0.30	-0.06	0.05	0.12	-0.01	-0.06	0.10	0.02	0.02
15	1	-0.01	-0.24	0.10	0.02	0.04	0.01	0.02	0.02	-0.01
16	6	0.02	-0.02	0.00	0.04	0.02	-0.01	0.04	0.02	-0.02
17	6	0.00	-0.03	-0.06	-0.01	-0.10	-0.04	-0.01	-0.08	-0.03
18	6	0.06	0.04	-0.01	-0.01	0.03	-0.01	-0.01	0.03	-0.01
19	1	0.05	0.02	0.16	0.04	-0.06	0.29	0.04	-0.05	0.23
20	1	-0.04	-0.01	0.19	-0.04	-0.11	0.34	-0.03	-0.10	0.27
21	1	0.01	0.27	-0.17	0.02	0.35	-0.21	0.02	0.27	-0.16
22	6	0.05	-0.06	0.03	-0.01	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.02



23	1	0.00	-0.03	0.01	-0.10	-0.24	0.26	0.06	0.48	-0.38
24	1	-0.02	-0.08	0.05	-0.01	0.15	0.18	0.00	-0.11	-0.25
25	1	0.01	-0.01	0.01	0.05	0.51	-0.12	-0.11	-0.42	0.02
26	6	-0.08	0.10	-0.07	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.00
27	1	0.32	0.05	-0.02	-0.07	0.02	-0.02	-0.06	0.03	-0.01
28	6	-0.06	-0.09	0.06	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01
29	1	0.31	-0.06	0.05	-0.07	-0.05	-0.08	-0.07	0.03	0.07
30	1	0.02	-0.26	0.11	-0.01	0.02	0.04	0.00	-0.03	-0.01
31	1	0.00	0.27	-0.11	-0.03	-0.05	0.00	-0.03	-0.03	0.01

		46			47			48		
		A			A			A		
Frequencies	--	1094.5208			1108.9563			1138.8005		
Red. masses	--	1.7118			1.7146			2.8332		
Frc consts	--	1.2082			1.2423			2.1648		
IR Inten	--	0.9988			3.6040			0.0294		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.01	-0.01	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.01	0.13	-0.07
3	6	-0.04	0.01	0.00	0.02	-0.06	0.04	-0.01	-0.03	0.01
4	6	0.04	0.00	0.00	0.03	0.05	-0.03	0.00	-0.04	0.03
5	6	0.00	-0.01	0.01	-0.05	0.03	-0.01	0.00	0.12	-0.07
6	1	0.09	-0.08	0.03	-0.03	0.16	-0.09	0.19	-0.34	0.18
7	6	-0.08	0.04	-0.02	0.05	-0.04	0.02	-0.04	-0.10	0.06
8	1	0.01	-0.01	-0.01	-0.26	0.05	0.01	-0.05	0.14	-0.06
9	6	0.05	0.02	-0.01	0.07	0.02	-0.01	0.04	-0.11	0.05
10	6	-0.06	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.06	0.00	0.00
11	6	0.05	-0.01	0.00	0.03	-0.01	0.00	0.04	0.00	0.00
12	6	0.07	-0.03	0.02	0.08	-0.04	0.02	0.04	0.12	-0.05
13	6	-0.10	0.02	-0.01	-0.08	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.00
14	1	0.08	-0.01	0.00	-0.24	0.00	0.01	0.08	0.14	-0.08
15	1	-0.08	-0.05	0.03	-0.08	-0.22	0.13	-0.19	-0.28	0.18
16	6	-0.07	-0.03	0.02	0.06	0.04	-0.02	-0.04	0.11	-0.06
17	6	0.11	-0.01	0.00	-0.06	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
18	6	0.01	0.02	-0.01	-0.05	-0.01	0.01	0.00	-0.13	0.07
19	1	-0.13	-0.37	0.31	0.09	0.21	-0.12	0.00	-0.01	0.01
20	1	-0.13	0.35	-0.23	0.08	-0.23	0.17	0.00	0.01	-0.02
21	1	-0.20	0.05	-0.03	0.12	0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.00
22	6	0.01	0.01	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.01	-0.13	0.07
23	1	0.16	-0.22	0.06	0.14	-0.20	0.06	-0.02	0.05	-0.03
24	1	0.12	0.41	-0.20	0.10	0.35	-0.17	-0.02	-0.07	0.04
25	1	0.15	-0.21	0.15	0.14	-0.18	0.13	-0.03	0.04	-0.02
26	6	0.04	0.01	0.00	0.02	-0.05	0.03	0.00	0.04	-0.03
27	1	0.02	0.03	0.00	-0.27	-0.03	-0.02	-0.06	-0.14	0.06
28	6	-0.05	-0.02	0.01	0.02	0.05	-0.03	-0.01	0.04	-0.02
29	1	0.05	0.00	-0.01	-0.27	-0.01	-0.01	0.13	-0.14	0.09
30	1	-0.08	0.00	0.00	-0.07	0.19	-0.11	-0.20	0.31	-0.19
31	1	0.09	0.09	-0.04	-0.04	-0.16	0.09	0.20	0.35	-0.18

		49			50			51		
		A			A			A		
Frequencies	--	1219.5909			1222.1183			1232.9491		
Red. masses	--	1.3586			1.2507			1.1001		
Frc consts	--	1.1906			1.1006			0.9853		
IR Inten	--	7.3189			5.5150			0.7458		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.03	-0.02	0.01	0.04	0.03	-0.02	-0.01	-0.01	0.01
3	6	0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.02	0.01	0.03	0.01	-0.01
4	6	-0.04	0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00
5	6	0.05	-0.04	0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
6	1	-0.31	0.46	-0.23	-0.06	0.09	-0.05	0.22	-0.32	0.16
7	6	0.04	0.03	-0.02	-0.03	0.02	-0.01	-0.02	-0.02	0.01
8	1	0.38	-0.07	-0.01	0.06	0.00	-0.01	-0.23	0.03	0.01
9	6	-0.05	-0.01	0.01	0.02	-0.03	0.02	-0.03	0.02	-0.01

10	6	0.02	-0.03	0.03	0.03	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
11	6	0.02	-0.04	0.02	0.03	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00
12	6	0.04	0.02	-0.01	-0.04	0.03	-0.02	0.03	0.02	-0.01
13	6	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.00
14	1	-0.03	-0.02	0.01	0.34	0.02	-0.03	-0.25	-0.01	0.02
15	1	0.03	0.02	-0.02	-0.30	-0.38	0.24	0.25	0.33	-0.21
16	6	-0.05	-0.02	0.01	0.01	-0.03	0.02	0.02	-0.02	0.01
17	6	-0.01	0.02	-0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
18	6	-0.03	-0.02	0.01	0.04	0.03	-0.01	0.01	0.01	0.00
19	1	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.02	0.02	-0.01
20	1	0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.02	0.02	-0.01
21	1	0.01	0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
22	6	0.05	-0.03	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01
23	1	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00
24	1	0.00	0.03	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
25	1	0.02	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.01
26	6	0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.02	0.01	-0.02	-0.01	0.00
27	1	-0.09	-0.02	0.01	0.39	0.05	0.01	0.22	0.02	0.01
28	6	-0.04	0.02	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.03	0.01	-0.01
29	1	0.36	-0.03	0.04	0.11	0.01	0.00	0.25	-0.01	0.02
30	1	-0.30	0.40	-0.24	-0.09	0.14	-0.08	-0.24	0.33	-0.20
31	1	0.06	0.07	-0.03	-0.31	-0.45	0.22	-0.21	-0.31	0.15

52

53

54

		A	A	A
Frequencies	--	1280.2594	1294.4365	1325.9734
Red. masses	--	1.3573	3.4928	1.6822
Frc consts	--	1.3107	3.4482	1.7426
IR Inten	--	8.1460	72.8421	0.3176

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.05	-0.02	0.01	-0.04	0.04	-0.02	-0.01	-0.02	0.01
3	6	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.02	-0.02	0.01
4	6	0.01	-0.01	0.00	-0.03	-0.02	0.02	-0.01	-0.02	0.01
5	6	-0.05	-0.01	0.01	-0.02	-0.03	0.02	0.01	-0.01	0.00
6	1	0.13	-0.20	0.10	-0.11	0.09	-0.04	-0.06	0.07	-0.03
7	6	0.01	0.05	-0.03	0.23	0.02	-0.02	0.08	0.03	-0.02
8	1	-0.42	0.02	0.03	-0.59	0.00	0.05	-0.35	0.01	0.03
9	6	-0.05	0.06	-0.03	0.08	-0.06	0.02	-0.12	0.06	-0.03
10	6	0.05	-0.01	0.01	0.01	0.20	-0.15	-0.02	-0.04	0.03
11	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.04	-0.01	0.00	0.00
12	6	-0.04	-0.04	0.02	-0.09	-0.06	0.03	0.13	0.06	-0.03
13	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.04	-0.02	0.01	-0.03	0.01
14	1	0.46	-0.03	-0.01	-0.22	0.05	-0.01	0.53	-0.04	-0.01
15	1	-0.11	-0.15	0.09	-0.02	-0.02	0.02	0.07	0.05	-0.03
16	6	0.03	-0.05	0.03	-0.22	0.00	0.00	-0.06	0.04	-0.02
17	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.08	0.01	0.00	0.00
18	6	-0.05	0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.01
19	1	0.04	0.07	-0.03	0.06	0.01	0.00	0.04	0.06	-0.03
20	1	0.04	-0.07	0.02	-0.05	-0.01	0.00	-0.05	0.08	-0.04
21	1	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.02	0.04	-0.02
22	6	0.04	0.01	0.00	0.05	0.04	-0.02	0.00	-0.02	0.01
23	1	-0.03	0.03	-0.02	0.01	0.01	0.00	-0.06	0.07	-0.03
24	1	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.05	0.06	-0.03
25	1	-0.03	0.03	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.06	0.07	-0.04
26	6	0.01	0.01	0.00	0.04	-0.02	0.02	0.01	-0.01	0.01
27	1	-0.44	0.00	-0.03	0.46	-0.01	0.04	0.39	0.00	0.03
28	6	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.01
29	1	0.39	0.02	0.01	0.30	0.05	-0.01	-0.55	-0.04	-0.01
30	1	-0.09	0.14	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.06	-0.03
31	1	0.12	0.18	-0.09	0.15	0.14	-0.07	0.04	0.03	-0.01

55

56

57

		A	A	A
Frequencies	--	1332.5353	1370.0659	1393.6810

Red. masses	--	4.1264			7.5318			5.3732		
Frc consts	--	4.3170			8.3297			6.1491		
IR Inten	--	4.7190			37.7740			32.5711		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.06	-0.01	0.00	0.00	0.04	-0.02	-0.08	0.02	-0.01
3	6	-0.03	-0.06	0.04	0.03	-0.06	0.03	0.06	0.05	-0.03
4	6	-0.02	0.07	-0.04	-0.07	0.03	-0.01	0.06	-0.02	0.01
5	6	0.06	0.00	0.00	0.11	0.06	-0.05	-0.13	-0.02	0.03
6	1	0.16	-0.21	0.10	-0.08	0.04	-0.01	0.17	-0.20	0.09
7	6	-0.17	-0.03	0.03	0.00	-0.26	0.14	-0.04	0.24	-0.13
8	1	0.13	0.00	-0.01	0.29	0.06	-0.05	-0.06	-0.04	0.01
9	6	-0.13	0.05	-0.02	-0.17	-0.05	0.02	0.01	-0.24	0.12
10	6	0.27	-0.02	0.01	0.02	0.29	-0.17	0.18	0.00	0.00
11	6	0.22	-0.02	0.01	0.01	0.37	-0.18	0.06	0.04	-0.02
12	6	-0.11	-0.02	0.01	0.16	-0.10	0.05	0.05	0.22	-0.11
13	6	-0.07	0.00	0.00	-0.01	-0.13	0.06	0.01	-0.01	0.00
14	1	-0.01	-0.01	-0.01	0.21	0.03	-0.04	-0.39	0.03	0.01
15	1	0.13	0.18	-0.11	0.15	0.11	-0.07	0.01	-0.03	0.02
16	6	-0.19	0.06	-0.04	-0.03	-0.22	0.12	-0.04	-0.24	0.13
17	6	-0.09	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.05	-0.03	0.00	0.00
18	6	0.06	-0.01	0.01	-0.09	0.06	-0.04	-0.14	0.03	-0.03
19	1	0.08	0.24	-0.11	-0.03	-0.11	0.07	0.04	0.08	0.01
20	1	0.07	-0.22	0.09	0.04	-0.13	0.08	0.04	-0.08	-0.01
21	1	0.24	0.01	0.00	0.02	-0.06	0.05	0.15	0.00	0.00
22	6	0.06	-0.01	0.01	0.03	0.05	-0.02	-0.07	-0.01	0.01
23	1	0.15	-0.12	-0.04	0.03	-0.08	-0.02	0.03	-0.06	0.05
24	1	0.05	0.21	-0.11	0.00	-0.13	0.08	0.01	-0.03	0.01
25	1	0.14	-0.06	0.13	0.03	-0.04	0.09	0.02	-0.07	0.01
26	6	-0.02	-0.08	0.04	0.06	0.01	0.00	0.06	0.02	-0.01
27	1	0.25	0.00	0.03	-0.19	0.06	-0.04	-0.03	0.04	-0.01
28	6	-0.03	0.06	-0.03	-0.04	-0.04	0.02	0.05	-0.06	0.04
29	1	-0.13	0.00	0.01	-0.13	0.04	-0.04	-0.47	-0.02	-0.02
30	1	0.13	-0.18	0.11	-0.16	0.13	-0.09	-0.03	0.06	-0.04
31	1	0.17	0.22	-0.11	0.09	0.07	-0.02	0.18	0.20	-0.09
			58			59			60	
			A			A			A	
Frequencies	--	1419.4457			1442.2073			1454.1136		
Red. masses	--	1.7062			7.3021			1.1940		
Frc consts	--	2.0255			8.9485			1.4875		
IR Inten	--	12.1796			4.8823			23.1149		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.07	0.04	-0.02	-0.19	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01
3	6	-0.01	-0.04	0.03	0.13	0.09	-0.06	-0.01	-0.01	0.01
4	6	0.02	-0.04	0.02	0.10	-0.09	0.04	0.00	-0.02	0.01
5	6	0.05	0.01	-0.01	-0.20	0.03	0.01	0.03	0.00	0.00
6	1	-0.15	0.24	-0.12	0.11	-0.07	0.03	-0.05	0.07	-0.04
7	6	0.02	0.02	-0.01	0.05	0.15	-0.08	-0.01	0.01	-0.01
8	1	-0.33	0.04	0.01	0.24	-0.01	-0.03	-0.15	0.02	0.01
9	6	-0.04	-0.07	0.04	0.00	-0.20	0.10	-0.02	-0.02	0.01
10	6	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.04	0.00	0.00	0.00
11	6	0.12	0.01	-0.01	-0.03	0.24	-0.11	0.02	0.02	-0.01
12	6	-0.03	0.05	-0.03	0.01	-0.25	0.12	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.03	-0.03	0.01	-0.01	-0.08	0.04	0.03	0.09	-0.04
14	1	0.22	0.04	-0.03	0.13	-0.01	0.02	0.09	0.01	-0.01
15	1	0.22	0.29	-0.18	0.07	-0.02	0.01	0.03	0.05	-0.03
16	6	0.01	-0.02	0.01	-0.04	0.17	-0.09	-0.01	0.00	0.00
17	6	0.02	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.05	0.00	0.02	-0.02
18	6	0.06	-0.01	0.01	0.19	0.04	0.00	0.03	0.00	0.00
19	1	0.00	-0.02	-0.01	-0.05	-0.06	0.17	-0.01	-0.02	0.11
20	1	0.00	0.01	0.02	0.04	-0.05	0.17	0.01	-0.03	0.12
21	1	-0.05	-0.01	0.00	0.00	-0.23	0.08	0.00	-0.15	0.05

22	6	-0.06	-0.03	0.02	0.23	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.01
23	1	0.11	0.03	-0.16	0.10	0.06	-0.19	-0.13	-0.33	0.51
24	1	0.04	0.10	-0.04	0.02	-0.03	0.04	-0.16	-0.30	0.11
25	1	0.11	0.14	0.08	0.11	0.17	0.09	-0.14	-0.58	-0.08
26	6	0.01	0.04	-0.02	-0.13	-0.11	0.05	-0.01	0.00	0.00
27	1	-0.35	-0.04	-0.01	-0.09	0.02	-0.03	-0.08	0.00	0.00
28	6	-0.02	0.05	-0.03	-0.13	0.08	-0.05	-0.02	0.01	-0.01
29	1	0.22	-0.03	0.03	-0.22	0.01	0.00	-0.06	-0.01	0.00
30	1	0.20	-0.29	0.17	-0.16	0.10	-0.07	0.00	-0.03	0.02
31	1	-0.17	-0.24	0.12	-0.03	0.05	-0.04	-0.03	-0.04	0.02

61				62				63			
A				A				A			
Frequencies	--	1455.4419		1478.3632		1484.0709					
Red. masses	--	1.1996		2.0668		1.9979					
Frc consts	--	1.4972		2.6614		2.5926					
IR Inten	--	16.0650		30.1630		35.0045					

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.01	0.00	0.00	0.04	-0.05	0.02	0.14	0.01	-0.01
3	6	0.00	0.01	0.00	0.07	0.06	-0.04	-0.05	0.01	0.00
4	6	0.01	-0.01	0.01	-0.06	0.06	-0.03	-0.07	0.01	0.00
5	6	0.00	0.01	0.00	-0.05	-0.04	0.03	0.12	-0.04	0.01
6	1	-0.02	0.03	-0.02	0.17	-0.32	0.17	-0.09	0.03	-0.01
7	6	-0.01	0.01	0.00	0.10	0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.02
8	1	0.02	0.00	-0.01	0.21	-0.07	0.02	-0.39	0.00	0.05
9	6	0.00	-0.02	0.01	-0.11	0.02	-0.01	-0.03	-0.03	0.02
10	6	0.00	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00
11	6	0.00	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
12	6	0.00	-0.02	0.01	0.10	0.03	-0.01	-0.03	0.03	-0.02
13	6	0.00	0.02	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.01
14	1	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.06	0.04	-0.47	0.02	0.00
15	1	0.01	0.01	-0.01	-0.19	-0.33	0.20	-0.15	-0.11	0.07
16	6	0.01	0.01	0.00	-0.10	0.01	-0.01	0.01	-0.03	0.02
17	6	0.00	-0.07	0.09	0.00	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00
18	6	0.01	0.01	0.00	0.05	-0.04	0.02	0.11	0.04	-0.01
19	1	0.09	0.14	-0.47	-0.06	-0.07	-0.04	0.00	-0.02	-0.11
20	1	-0.07	0.14	-0.48	0.06	-0.07	-0.02	-0.02	0.03	0.11
21	1	0.01	0.61	-0.22	-0.02	0.05	-0.02	-0.19	0.00	0.00
22	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.05	0.02	0.12	-0.01	0.01
23	1	-0.01	-0.08	0.10	0.09	-0.05	0.00	0.04	0.06	-0.10
24	1	-0.04	-0.08	0.03	-0.07	-0.11	0.06	0.04	0.06	-0.03
25	1	-0.01	-0.13	0.00	0.10	-0.04	0.06	0.04	0.11	0.02
26	6	-0.01	-0.01	0.01	0.06	0.06	-0.03	-0.07	-0.01	0.00
27	1	-0.07	0.00	-0.01	-0.24	-0.06	0.01	-0.35	0.02	-0.04
28	6	-0.01	0.01	-0.01	-0.07	0.06	-0.03	-0.04	-0.02	0.01
29	1	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.06	0.03	-0.45	-0.01	-0.01
30	1	0.00	0.00	0.00	0.16	-0.31	0.18	-0.15	0.14	-0.08
31	1	0.00	0.01	-0.01	-0.18	-0.32	0.16	-0.07	0.01	-0.01

64				65				66			
A				A				A			
Frequencies	--	1503.3920		1510.2493		1522.6875					
Red. masses	--	1.4215		1.3333		1.0516					
Frc consts	--	1.8930		1.7918		1.4366					
IR Inten	--	19.5281		24.7278		20.4779					

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.02	0.01	0.00	0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.02	-0.03	0.02	-0.01	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00
4	6	0.02	0.01	-0.01	-0.01	-0.05	0.03	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.02	0.01	0.00	0.06	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
6	1	0.01	0.02	-0.01	-0.12	0.12	-0.05	0.01	-0.01	0.00
7	6	-0.01	-0.01	0.01	-0.04	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00
8	1	0.05	0.00	-0.02	-0.24	0.03	0.00	0.01	0.00	0.00

9	6	0.07	0.02	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	0.03	0.02	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00
11	6	-0.05	-0.02	0.01	-0.03	0.03	-0.02	0.01	0.00	0.02
12	6	0.01	0.02	-0.01	0.04	-0.03	0.02	-0.01	0.00	0.00
13	6	0.04	-0.03	0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.03	0.05
14	1	0.06	0.01	-0.01	-0.18	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.02
15	1	0.06	0.08	-0.05	-0.10	-0.07	0.05	0.00	-0.01	0.00
16	6	-0.07	-0.03	0.01	0.02	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.04	0.01	0.01	-0.04	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
18	6	0.07	-0.01	0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.03	-0.04	0.27	0.14	0.17	0.42	-0.01	-0.01	0.04
20	1	0.12	-0.15	-0.35	-0.05	0.09	-0.32	0.02	-0.02	-0.05
21	1	0.49	0.06	-0.01	0.54	-0.07	0.03	0.06	0.01	0.00
22	6	0.06	-0.01	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.29	0.13	0.09	0.18	-0.02	-0.11	0.42	-0.33	0.07
24	1	0.15	0.24	-0.10	-0.10	-0.17	0.12	0.00	-0.34	-0.61
25	1	-0.27	0.00	-0.17	0.21	0.05	0.13	-0.30	0.29	-0.18
26	6	0.00	0.05	-0.03	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
27	1	-0.29	-0.03	0.00	0.12	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00
28	6	-0.04	-0.02	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.01
29	1	-0.14	-0.01	0.00	0.12	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.02
30	1	-0.06	0.00	0.00	0.05	-0.05	0.03	-0.02	0.02	-0.01
31	1	-0.14	-0.16	0.08	0.03	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
			67			68			69	
			A			A			A	
Frequencies	--	1535.7606			1553.3719			1560.7476		
Red. masses	--	1.6561			1.6839			1.4180		
Frc consts	--	2.3014			2.3940			2.0352		
IR Inten	--	50.2523			29.6622			5.1107		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.04	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.01
3	6	0.02	-0.02	0.01	0.03	-0.02	0.01	0.01	0.01	-0.01
4	6	-0.01	0.03	-0.02	-0.05	0.08	-0.04	0.03	-0.03	0.01
5	6	-0.04	-0.01	0.01	-0.01	-0.04	0.02	-0.04	0.02	-0.01
6	1	0.07	-0.09	0.05	0.11	-0.18	0.09	-0.01	0.04	-0.02
7	6	0.08	-0.03	0.01	0.08	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.02
8	1	0.15	-0.03	-0.01	0.20	-0.06	0.01	0.14	0.01	-0.02
9	6	-0.03	0.02	-0.01	-0.05	-0.02	0.01	0.03	0.03	-0.02
10	6	-0.08	0.02	-0.01	-0.09	0.00	-0.01	0.05	0.01	-0.02
11	6	0.08	-0.04	0.02	0.09	0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.01
12	6	-0.10	0.04	-0.02	-0.05	0.03	-0.01	-0.02	0.01	0.00
13	6	-0.04	0.04	-0.03	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.02	-0.01
14	1	0.19	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.12	-0.01	0.00
15	1	0.05	0.00	-0.01	0.02	-0.05	0.02	0.01	0.02	-0.01
16	6	0.04	-0.01	0.01	0.08	-0.01	0.01	-0.05	-0.01	0.00
17	6	-0.01	0.02	0.01	0.00	-0.05	-0.01	0.00	-0.05	-0.01
18	6	0.04	0.01	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.03	-0.03	0.02
19	1	-0.16	-0.23	0.16	0.30	0.35	0.26	0.33	0.44	0.00
20	1	0.18	-0.20	-0.27	-0.30	0.41	-0.09	-0.33	0.41	0.16
21	1	0.26	0.10	-0.03	0.18	-0.15	0.05	-0.09	-0.16	0.05
22	6	0.03	0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.03	0.02	-0.01
23	1	0.25	-0.08	-0.11	-0.21	0.03	0.13	0.17	-0.04	-0.08
24	1	-0.17	-0.19	0.23	0.13	0.24	-0.12	-0.10	-0.16	0.10
25	1	0.37	-0.06	0.23	-0.21	-0.08	-0.12	0.18	0.03	0.11
26	6	-0.04	0.01	-0.01	-0.04	-0.06	0.03	0.02	0.08	-0.04
27	1	-0.05	0.01	-0.01	0.01	0.04	-0.01	-0.26	-0.05	0.01
28	6	0.04	-0.07	0.04	0.01	0.04	-0.02	0.00	-0.06	0.03
29	1	-0.26	0.03	-0.03	0.04	-0.01	0.01	-0.18	0.02	-0.02
30	1	-0.12	0.18	-0.11	0.04	0.00	0.00	-0.09	0.06	-0.04
31	1	-0.02	0.06	-0.04	0.07	0.12	-0.06	-0.12	-0.13	0.06
			70			71			72	
			A			A			A	

Frequencies		1579.5010			1590.9900			1649.1866		
Red. masses		3.4177			6.7844			5.0918		
Frc consts		5.0237			10.1180			8.1595		
IR Inten		1.7723			90.9665			32.1731		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.02	-0.08	0.05	0.06	0.09	-0.05	-0.21	-0.04	0.03
3	6	0.10	0.18	-0.11	-0.07	-0.17	0.10	0.16	0.06	-0.05
4	6	0.03	-0.15	0.08	-0.11	0.21	-0.11	-0.16	0.08	-0.03
5	6	0.01	0.06	-0.04	0.09	-0.11	0.05	0.21	-0.05	0.01
6	1	-0.15	0.12	-0.06	0.17	-0.25	0.13	0.01	-0.23	0.13
7	6	-0.01	-0.05	0.03	0.01	0.16	-0.09	-0.11	0.01	0.01
8	1	-0.14	0.08	-0.03	-0.09	-0.11	0.08	-0.28	-0.02	0.05
9	6	-0.13	0.02	-0.01	-0.02	-0.17	0.09	0.11	-0.01	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.06	0.04	0.00	0.00
11	6	0.19	0.02	-0.01	0.02	0.11	-0.05	-0.05	0.00	0.00
12	6	-0.11	-0.03	0.02	-0.01	-0.19	0.10	0.11	0.00	0.00
13	6	0.00	-0.03	0.02	0.01	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
14	1	-0.26	-0.09	0.06	-0.04	0.10	-0.05	0.28	-0.05	0.02
15	1	-0.20	-0.25	0.15	0.15	0.13	-0.09	-0.01	-0.23	0.13
16	6	0.01	0.05	-0.03	-0.01	0.18	-0.10	-0.11	-0.01	-0.01
17	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00
18	6	-0.02	-0.05	0.02	-0.09	-0.13	0.06	0.21	0.05	-0.01
19	1	-0.05	-0.06	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.01	0.02	-0.04
20	1	0.06	-0.08	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.04
21	1	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.03	-0.02	-0.02	0.00	0.00
22	6	-0.03	0.06	-0.03	-0.06	0.11	-0.06	-0.22	0.04	-0.03
23	1	-0.27	0.03	0.16	-0.08	0.01	0.05	0.01	0.01	-0.01
24	1	0.20	0.38	-0.18	0.04	0.05	-0.03	-0.02	-0.05	0.02
25	1	-0.26	-0.13	-0.14	-0.08	-0.04	-0.04	0.01	0.02	0.00
26	6	0.03	0.10	-0.05	0.12	0.23	-0.12	-0.16	-0.08	0.03
27	1	0.00	-0.05	0.03	0.09	-0.13	0.08	-0.28	0.03	-0.04
28	6	0.07	-0.12	0.07	0.08	-0.21	0.12	0.17	-0.07	0.05
29	1	-0.02	0.07	-0.04	0.04	0.12	-0.06	0.29	0.05	-0.02
30	1	-0.11	0.15	-0.09	-0.17	0.18	-0.11	0.00	0.23	-0.13
31	1	-0.08	-0.07	0.03	-0.20	-0.27	0.14	0.02	0.24	-0.13

Frequencies		1664.2142			3049.2363			3056.8673		
Red. masses		5.3184			1.0487			1.0442		
Frc consts		8.6786			5.7448			5.7490		
IR Inten		11.9875			7.1782			5.0736		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.23	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.17	-0.07	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.15	-0.07	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.21	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	1	0.00	0.21	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.11	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	1	0.27	0.02	-0.04	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.13	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.12	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.02
14	1	-0.30	0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
15	1	0.01	0.22	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.11	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00
18	6	0.20	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	0.03	0.04	0.01	0.26	-0.19	-0.04	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.03	0.04	0.01	-0.27	-0.19	-0.05	0.00	0.00	0.00



8	1	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.04	-0.02	-0.01	-0.22	0.12
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.08	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
14	1	-0.01	0.21	-0.12	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.06	0.03
15	1	0.13	-0.07	0.03	0.07	-0.04	0.02	-0.43	0.23	-0.10
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.00	-0.02	0.01	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.04	-0.03	-0.01
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
23	1	0.06	0.12	0.11	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.02
24	1	0.83	-0.33	0.19	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.06	0.03
25	1	0.07	-0.01	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.03
26	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.21	-0.12	0.00	0.03	-0.02
28	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00
29	1	0.00	-0.04	0.02	0.00	0.14	-0.07	0.00	0.01	-0.01
30	1	0.02	0.01	-0.01	-0.48	-0.25	0.11	-0.07	-0.04	0.02
31	1	-0.01	0.00	0.00	0.66	-0.31	0.23	0.10	-0.05	0.04
			82			83			84	
			A			A			A	
Frequencies	--	3232.7729			3235.1362			3251.6843		
Red. masses	--	1.0915			1.0923			1.0935		
Frc consts	--	6.7207			6.7357			6.8119		
IR Inten	--	2.6331			2.3723			9.2822		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
6	1	0.02	0.01	-0.01	0.37	0.17	-0.13	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	1	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.29	0.17	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.21	-0.11	0.00	0.01	0.00
15	1	0.02	-0.01	0.01	0.67	-0.37	0.16	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
18	6	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.04
19	1	0.04	-0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.07	0.05	0.01
20	1	0.01	0.01	0.00	-0.04	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01	0.00
21	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
22	6	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.02
23	1	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.01
24	1	0.02	-0.01	0.00	-0.12	0.05	-0.03	0.01	0.00	0.00
25	1	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01
26	6	0.04	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.01
27	1	0.01	-0.28	0.16	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.72	-0.40
28	6	0.05	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
29	1	0.01	0.33	-0.17	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.40	-0.21
30	1	-0.62	-0.32	0.14	0.02	0.01	-0.01	0.06	0.03	-0.01
31	1	-0.42	0.20	-0.15	0.01	-0.01	0.00	-0.26	0.12	-0.09
			85			86			87	



		A			A			A		
Frequencies		--	3253.3234		3258.7594		3268.4595			
Red. masses		--	1.0945		1.0973		1.0934			
Frc consts		--	6.8251		6.8658		6.8818			
IR Inten		--	10.7817		8.8202		12.5206			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.04
3	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.00
4	6	-0.03	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
5	6	0.00	-0.07	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
6	1	0.33	0.14	-0.11	0.01	0.00	0.00	-0.10	-0.04	0.03
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	1	0.03	0.77	-0.44	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.11	0.06
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
14	1	0.00	0.17	-0.09	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.80	-0.43
15	1	0.09	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.14	-0.06
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00
19	1	0.02	-0.01	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.08	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
21	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.03	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02
24	1	-0.05	0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.18	0.07	-0.04
25	1	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.02
26	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.32	-0.18	0.00	-0.01	0.01
28	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.02	-0.01	-0.01	-0.70	0.37	0.00	0.01	0.00
30	1	0.01	0.01	0.00	-0.35	-0.18	0.08	0.01	0.00	0.00
31	1	0.01	0.00	0.00	-0.22	0.10	-0.08	0.00	0.00	0.00

**Table S9.** Cartesian coordinates of optimized structure for (**5-C<sub>1</sub>C<sub>2</sub>**)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	1.430155	-0.287201	1.169998
2	6	0	2.357860	0.782379	1.314933
3	6	0	1.961851	2.113482	0.980170
4	6	0	0.674400	2.350443	0.524499
5	6	0	-0.306005	1.308451	0.355548
6	6	0	0.076888	-0.059055	0.710735
7	6	0	-1.625783	1.580677	-0.094504
8	6	0	-2.569481	0.508541	-0.147598
9	6	0	-2.189471	-0.847922	0.225579
10	6	0	-0.850606	-1.128359	0.635565
11	6	0	-3.925625	0.749798	-0.560779
12	6	0	-4.863516	-0.266083	-0.602570
13	6	0	-4.494749	-1.594050	-0.228866
14	6	0	-3.199394	-1.871288	0.171249
15	6	0	-2.072714	2.973849	-0.503420
16	6	0	-0.391614	-2.535146	0.980163
17	1	0	1.678925	-1.245063	1.619650
18	1	0	3.302488	0.608677	1.827642
19	1	0	2.658148	2.933896	1.119440
20	1	0	0.397284	3.375244	0.309718
21	1	0	-4.228132	1.751996	-0.839532
22	1	0	-5.882973	-0.057898	-0.914359
23	1	0	-5.237225	-2.386435	-0.256412
24	1	0	-2.957093	-2.886648	0.459203
25	1	0	-2.508732	2.965604	-1.509583
26	1	0	-1.263272	3.702860	-0.519355
27	1	0	-2.841739	3.357368	0.180059
28	1	0	-1.129703	-3.295063	0.729042
29	1	0	-0.176014	-2.639073	2.052643
30	1	0	0.525849	-2.802332	0.435236
31	47	0	2.927426	-0.554345	-0.729311

**Table S10.** Vibrational frequencies for (5-C<sub>1</sub>C<sub>2</sub>)

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	29.5066			39.5490			53.3077		
Red. masses	--	8.4583			5.5518			3.2529		
Frc consts	--	0.0043			0.0051			0.0054		
IR Inten	--	0.3871			0.3951			0.6985		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.09	0.12	0.04	0.01	-0.10	0.07	0.03	-0.01	0.00
2	6	0.06	0.14	0.05	0.04	-0.12	0.04	-0.01	0.01	0.09
3	6	0.02	0.13	0.07	0.06	-0.10	0.07	-0.02	0.02	0.13
4	6	0.01	0.10	0.08	0.07	-0.08	0.06	0.00	0.00	0.06
5	6	0.04	0.08	0.07	0.05	-0.07	0.04	0.04	-0.01	-0.03
6	6	0.08	0.09	0.06	0.01	-0.07	0.09	0.04	-0.02	-0.04
7	6	0.03	0.04	0.06	0.08	-0.05	-0.03	0.05	-0.02	-0.09
8	6	0.08	0.01	0.00	0.06	-0.03	-0.03	0.04	-0.01	-0.04
9	6	0.12	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.07	0.04	-0.01	-0.03
10	6	0.11	0.06	0.04	-0.03	-0.04	0.13	0.05	-0.02	-0.08
11	6	0.08	-0.04	-0.05	0.09	-0.02	-0.13	0.02	0.00	0.01
12	6	0.13	-0.08	-0.13	0.06	0.01	-0.13	0.00	0.01	0.10
13	6	0.17	-0.07	-0.15	0.00	0.02	-0.03	0.00	0.02	0.13
14	6	0.16	-0.03	-0.09	-0.03	0.01	0.07	0.02	0.01	0.06
15	6	-0.02	0.04	0.10	0.13	-0.06	-0.10	0.09	-0.04	-0.18
16	6	0.16	0.08	0.04	-0.08	-0.03	0.25	0.05	-0.04	-0.17
17	1	0.11	0.13	0.06	0.01	-0.11	0.03	0.02	-0.01	0.01
18	1	0.09	0.16	-0.01	0.04	-0.14	0.03	-0.02	0.01	0.11
19	1	0.00	0.15	0.06	0.07	-0.12	0.08	-0.05	0.03	0.20
20	1	-0.02	0.10	0.09	0.08	-0.08	0.06	-0.02	0.00	0.09
21	1	0.06	-0.04	-0.04	0.13	-0.02	-0.20	0.02	-0.01	0.00
22	1	0.14	-0.11	-0.18	0.09	0.02	-0.20	-0.01	0.02	0.15
23	1	0.21	-0.10	-0.22	-0.02	0.04	-0.03	-0.02	0.03	0.21
24	1	0.19	-0.03	-0.12	-0.08	0.01	0.14	0.02	0.02	0.10
25	1	0.05	0.07	0.07	0.20	-0.08	-0.13	-0.04	-0.12	-0.12
26	1	-0.06	0.09	0.21	0.15	-0.07	-0.08	0.15	-0.10	-0.38
27	1	-0.09	-0.04	0.07	0.10	-0.01	-0.17	0.21	0.10	-0.13
28	1	0.14	0.06	0.19	-0.16	-0.01	0.43	0.16	-0.04	-0.48
29	1	0.31	0.13	0.02	0.02	0.09	0.24	-0.20	-0.19	-0.14
30	1	0.09	0.06	-0.07	-0.16	-0.15	0.19	0.20	0.09	0.01
31	47	-0.16	-0.08	-0.02	-0.06	0.09	-0.05	-0.05	0.01	0.01
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	97.0845			101.7445			126.9958		
Red. masses	--	4.9346			1.3397			1.5470		
Frc consts	--	0.0274			0.0082			0.0147		
IR Inten	--	0.7176			0.2494			0.4894		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.03	-0.08	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00
2	6	-0.04	0.06	0.04	-0.01	0.00	0.01	0.01	-0.02	-0.01
3	6	-0.11	0.07	0.23	-0.02	0.00	0.04	0.03	-0.02	-0.04
4	6	-0.12	0.07	0.23	-0.01	0.00	0.02	0.03	-0.01	-0.04
5	6	-0.06	0.04	0.07	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00
6	6	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
7	6	-0.04	0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00
8	6	-0.02	0.00	-0.04	-0.01	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.01
9	6	-0.03	0.03	0.06	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.01
10	6	-0.02	0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.02
11	6	0.01	-0.03	-0.15	-0.02	0.02	0.08	0.02	-0.01	-0.06
12	6	0.00	-0.03	-0.10	-0.02	0.02	0.06	0.01	0.00	-0.02

13	6	-0.04	0.02	0.09	0.00	0.00	-0.04	-0.02	0.02	0.07
14	6	-0.05	0.04	0.15	0.01	-0.01	-0.07	-0.02	0.01	0.07
15	6	-0.03	0.01	-0.04	0.03	-0.01	-0.07	-0.02	0.00	0.02
16	6	0.00	0.04	0.01	0.03	0.01	0.02	0.05	-0.01	-0.12
17	1	0.04	0.00	-0.15	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01
18	1	-0.01	0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.00
19	1	-0.16	0.10	0.35	-0.03	0.01	0.06	0.04	-0.03	-0.07
20	1	-0.17	0.08	0.36	-0.02	0.00	0.03	0.05	-0.02	-0.07
21	1	0.03	-0.06	-0.27	-0.04	0.03	0.14	0.05	-0.02	-0.13
22	1	0.02	-0.05	-0.18	-0.04	0.03	0.12	0.02	0.00	-0.05
23	1	-0.05	0.02	0.17	0.01	-0.01	-0.08	-0.04	0.03	0.13
24	1	-0.07	0.07	0.27	0.02	-0.03	-0.15	-0.04	0.02	0.12
25	1	0.07	-0.01	-0.09	-0.14	-0.08	0.00	0.27	0.06	-0.11
26	1	-0.05	0.02	0.03	0.09	-0.08	-0.29	-0.10	0.09	0.35
27	1	-0.11	-0.01	-0.13	0.18	0.11	0.02	-0.26	-0.16	-0.16
28	1	-0.06	0.04	0.17	-0.14	0.03	0.48	-0.08	0.01	0.20
29	1	0.19	0.07	-0.03	0.49	0.16	-0.06	0.46	0.01	-0.20
30	1	-0.10	-0.01	-0.15	-0.23	-0.14	-0.35	-0.16	-0.07	-0.46
31	47	0.07	-0.05	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.02

7

8

9

		A	A	A
Frequencies	--	155.7362	161.2998	244.4341
Red. masses	--	3.1315	1.4723	4.2818
Frc consts	--	0.0447	0.0226	0.1507
IR Inten	--	5.2213	0.0835	0.8362

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.02	0.07	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.07
2	6	0.02	-0.01	-0.05	-0.01	0.01	0.04	-0.10	0.02	0.31
3	6	0.02	0.00	-0.07	-0.02	0.01	0.06	-0.03	-0.01	0.14
4	6	-0.01	0.01	0.04	0.00	0.00	0.01	0.08	-0.04	-0.22
5	6	-0.04	0.03	0.12	0.01	0.00	-0.03	0.04	-0.01	-0.14
6	6	-0.04	0.03	0.14	0.01	0.00	-0.03	0.01	0.01	-0.04
7	6	-0.03	0.02	0.09	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.01	-0.03
8	6	-0.04	0.02	0.14	0.01	0.00	-0.01	-0.04	0.03	0.10
9	6	-0.03	0.02	0.11	0.02	-0.01	-0.05	-0.03	0.04	0.11
10	6	-0.03	0.02	0.09	0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.03	0.03
11	6	-0.03	0.02	0.09	-0.01	0.02	0.06	-0.04	0.01	0.09
12	6	0.01	-0.01	-0.05	-0.02	0.03	0.09	0.02	-0.04	-0.08
13	6	0.02	-0.02	-0.12	0.00	0.01	0.00	0.03	-0.03	-0.08
14	6	-0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.01	-0.08	-0.01	0.02	0.10
15	6	0.04	-0.05	-0.19	-0.02	-0.02	-0.05	-0.03	0.02	0.02
16	6	0.02	-0.02	-0.12	-0.02	0.01	0.08	0.01	0.02	-0.04
17	1	-0.01	0.02	0.07	0.01	0.00	-0.01	-0.07	-0.01	0.08
18	1	0.04	-0.01	-0.10	-0.02	0.00	0.05	-0.17	0.03	0.44
19	1	0.06	-0.02	-0.15	-0.03	0.02	0.10	-0.06	0.00	0.20
20	1	-0.01	0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	0.18	-0.07	-0.47
21	1	-0.03	0.03	0.13	-0.01	0.02	0.08	-0.07	0.02	0.13
22	1	0.03	-0.02	-0.11	-0.04	0.05	0.17	0.05	-0.07	-0.20
23	1	0.05	-0.05	-0.24	0.00	0.01	-0.01	0.07	-0.06	-0.19
24	1	0.00	-0.01	-0.03	0.03	-0.03	-0.15	-0.01	0.04	0.16
25	1	0.32	-0.21	-0.31	0.44	0.02	-0.26	-0.05	0.06	0.03
26	1	0.03	-0.03	-0.07	-0.13	0.12	0.43	-0.05	0.04	0.06
27	1	-0.15	0.04	-0.46	-0.39	-0.22	-0.37	-0.03	-0.04	0.06
28	1	0.07	-0.01	-0.30	0.00	0.00	0.06	0.01	0.02	-0.04
29	1	-0.02	-0.20	-0.13	-0.11	0.07	0.10	0.06	-0.04	-0.05
30	1	0.06	0.13	-0.13	0.03	-0.03	0.17	-0.01	0.05	-0.10
31	47	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.04

10

11

12

		A	A	A
Frequencies	--	247.5529	266.4927	355.5197
Red. masses	--	5.5182	4.4608	3.0328
Frc consts	--	0.1992	0.1867	0.2259
IR Inten	--	0.6101	2.1383	0.0791

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.12	0.06	0.34	0.10	0.08	0.04	-0.06	-0.04	-0.02
2	6	-0.05	0.01	0.15	-0.01	0.20	0.01	-0.01	-0.10	0.00
3	6	0.02	-0.01	-0.05	-0.09	0.16	-0.04	0.03	-0.08	0.02
4	6	0.02	0.01	-0.03	-0.10	-0.01	-0.06	0.04	0.01	0.02
5	6	-0.04	0.03	0.11	0.02	-0.11	0.01	-0.01	0.05	0.00
6	6	-0.08	0.05	0.25	0.05	-0.09	0.04	-0.03	0.04	-0.02
7	6	0.01	-0.01	-0.05	0.04	-0.12	0.02	-0.02	-0.02	0.00
8	6	0.03	-0.03	-0.16	0.05	-0.08	0.03	0.03	-0.05	0.02
9	6	0.03	-0.03	-0.14	0.01	-0.09	0.04	0.00	-0.05	0.01
10	6	-0.03	0.02	0.06	0.03	-0.11	0.04	0.02	0.01	-0.01
11	6	0.03	-0.03	-0.13	0.09	0.07	0.01	0.06	0.04	0.01
12	6	-0.04	0.02	0.12	0.00	0.18	-0.05	0.01	0.10	-0.03
13	6	-0.04	0.02	0.11	-0.08	0.15	-0.06	-0.04	0.09	-0.02
14	6	0.03	-0.03	-0.13	-0.11	0.01	-0.02	-0.05	0.00	0.00
15	6	-0.02	0.01	0.03	0.00	-0.13	0.05	-0.21	-0.09	-0.05
16	6	0.03	0.01	-0.04	0.01	-0.14	0.00	0.23	0.09	0.05
17	1	-0.13	0.07	0.37	0.21	0.13	0.10	-0.10	-0.05	-0.03
18	1	-0.04	0.03	0.15	0.01	0.29	-0.01	-0.03	-0.15	0.02
19	1	0.09	-0.04	-0.23	-0.16	0.22	-0.07	0.07	-0.12	0.04
20	1	0.09	-0.01	-0.20	-0.21	-0.05	-0.13	0.07	0.03	0.04
21	1	0.04	-0.04	-0.20	0.20	0.11	0.04	0.11	0.05	0.02
22	1	-0.08	0.05	0.28	0.03	0.26	-0.07	0.03	0.15	-0.05
23	1	-0.08	0.05	0.27	-0.14	0.21	-0.09	-0.09	0.13	-0.04
24	1	0.05	-0.04	-0.18	-0.23	-0.02	-0.03	-0.09	-0.02	-0.01
25	1	-0.11	0.07	0.08	-0.02	-0.12	0.06	-0.33	-0.21	0.01
26	1	-0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.09	0.03	-0.26	-0.03	-0.20
27	1	0.05	-0.02	0.13	0.02	-0.16	0.08	-0.15	-0.12	0.03
28	1	0.05	0.00	-0.07	-0.02	-0.10	-0.02	0.37	-0.04	-0.03
29	1	0.09	-0.07	-0.07	0.03	-0.18	-0.01	0.13	0.14	0.08
30	1	0.02	0.10	-0.11	0.00	-0.14	-0.03	0.33	0.24	0.15
31	47	0.02	-0.01	-0.05	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00

13

14

15

		A	A	A
Frequencies	--	373.7556	381.6936	390.3640
Red. masses	--	2.9080	3.4449	6.3757
Frc consts	--	0.2393	0.2957	0.5724
IR Inten	--	1.6810	4.0196	0.6794

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	0.00	0.00	0.04	0.01	0.02	0.18	0.07	-0.02
2	6	-0.07	0.01	0.04	0.00	0.03	0.12	0.22	0.07	0.05
3	6	-0.05	-0.01	-0.05	0.07	0.01	-0.05	0.20	0.07	0.08
4	6	-0.05	-0.04	-0.03	0.05	0.01	-0.02	0.19	0.02	0.02
5	6	-0.05	-0.03	0.04	-0.01	0.04	0.12	0.11	0.02	0.01
6	6	-0.02	-0.02	-0.05	0.05	-0.01	-0.07	0.10	0.05	0.02
7	6	-0.04	0.01	0.10	-0.06	0.04	0.22	0.03	-0.10	0.01
8	6	-0.05	0.01	0.05	-0.02	0.02	0.10	-0.11	-0.05	-0.03
9	6	-0.02	-0.04	-0.03	0.04	-0.01	-0.10	-0.12	-0.03	0.00
10	6	0.01	-0.03	-0.09	0.06	-0.02	-0.20	-0.04	0.10	0.01
11	6	-0.04	0.00	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.17	-0.08	-0.06
12	6	-0.04	-0.01	-0.05	0.03	-0.02	-0.07	-0.23	-0.06	-0.03
13	6	-0.06	0.00	0.04	-0.01	0.02	0.10	-0.22	-0.07	-0.04
14	6	-0.04	-0.03	-0.01	0.02	0.01	-0.02	-0.18	-0.04	-0.06
15	6	0.23	0.07	0.03	-0.10	-0.06	-0.07	0.04	-0.12	0.04
16	6	0.20	0.06	0.06	-0.12	-0.03	0.02	0.01	0.14	-0.03
17	1	-0.03	0.02	0.03	0.01	0.00	0.03	0.19	0.07	-0.02
18	1	-0.10	0.03	0.09	-0.04	0.05	0.20	0.23	0.02	0.02
19	1	-0.05	0.00	-0.10	0.11	-0.01	-0.17	0.17	0.10	0.10
20	1	-0.03	-0.04	-0.04	0.06	0.01	-0.10	0.21	0.03	0.00
21	1	0.00	0.01	-0.06	0.01	-0.02	-0.06	-0.16	-0.09	-0.10
22	1	-0.02	-0.02	-0.11	0.06	-0.04	-0.19	-0.23	-0.02	-0.01
23	1	-0.08	0.02	0.08	-0.04	0.05	0.24	-0.20	-0.09	-0.04
24	1	-0.01	-0.03	-0.03	0.00	0.01	-0.03	-0.18	-0.06	-0.11

25	1	0.36	0.13	-0.03	-0.12	-0.36	-0.05	0.04	-0.09	0.04
26	1	0.35	-0.07	0.12	-0.10	-0.06	-0.31	0.05	-0.13	0.05
27	1	0.20	0.25	-0.09	-0.08	0.14	-0.16	0.05	-0.13	0.05
28	1	0.34	-0.10	0.09	-0.24	0.03	0.19	0.04	0.12	-0.08
29	1	0.13	0.23	0.10	-0.14	0.18	0.04	-0.01	0.10	-0.03
30	1	0.29	0.16	0.17	-0.16	-0.30	0.08	0.03	0.20	-0.02
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
			16			17			18	
			A			A			A	
Frequencies	--	417.6599			435.0600			484.5391		
Red. masses	--	3.3643			5.4777			4.9640		
Frc consts	--	0.3458			0.6109			0.6867		
IR Inten	--	4.9766			0.4899			0.1192		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.08	0.05	0.20	0.18	-0.08	0.10	0.04	0.06	0.00
2	6	0.02	0.00	-0.03	0.12	-0.01	0.03	0.10	0.03	0.03
3	6	0.05	0.01	-0.07	-0.07	-0.10	-0.05	0.10	0.02	0.04
4	6	-0.01	0.05	0.14	-0.12	-0.18	0.03	0.08	-0.01	0.02
5	6	0.03	0.02	-0.04	-0.06	-0.16	0.02	-0.04	0.05	-0.01
6	6	0.01	0.01	-0.06	0.12	-0.09	0.07	-0.02	-0.04	0.01
7	6	0.05	-0.03	-0.10	-0.06	-0.02	-0.04	-0.06	0.18	-0.06
8	6	0.02	-0.03	-0.05	-0.13	0.09	-0.09	0.01	0.03	-0.02
9	6	0.00	-0.04	-0.09	0.07	0.16	-0.04	0.03	-0.05	0.01
10	6	0.02	-0.02	-0.15	0.07	0.02	-0.01	0.06	-0.18	0.05
11	6	-0.03	0.02	0.17	-0.20	0.09	-0.02	-0.04	-0.06	0.02
12	6	0.02	-0.02	-0.08	-0.12	0.00	-0.05	-0.09	-0.03	-0.02
13	6	-0.01	-0.03	-0.07	0.09	0.07	-0.01	-0.10	-0.02	-0.03
14	6	-0.07	0.00	0.15	0.10	0.19	0.04	-0.08	0.01	-0.01
15	6	0.02	-0.01	0.02	-0.09	-0.02	-0.02	-0.11	0.29	-0.09
16	6	-0.02	0.01	0.01	0.09	0.03	0.02	0.11	-0.29	0.07
17	1	-0.13	0.10	0.32	0.19	-0.05	0.17	0.04	0.05	-0.01
18	1	0.01	0.01	-0.01	0.18	0.13	-0.03	0.09	-0.03	0.02
19	1	0.08	-0.01	-0.11	-0.16	-0.01	-0.14	0.08	0.05	0.02
20	1	-0.07	0.08	0.35	-0.16	-0.19	0.05	0.10	-0.01	-0.01
21	1	-0.09	0.07	0.42	-0.26	0.09	0.05	-0.04	-0.05	0.04
22	1	0.03	-0.01	-0.12	-0.15	-0.14	-0.03	-0.08	0.03	-0.03
23	1	-0.03	-0.02	-0.08	0.20	-0.03	0.04	-0.08	-0.04	-0.02
24	1	-0.14	0.06	0.41	0.13	0.22	0.13	-0.09	0.01	0.02
25	1	0.04	0.09	0.01	-0.12	-0.05	-0.01	-0.11	0.29	-0.09
26	1	0.00	0.01	0.13	-0.15	0.04	-0.04	-0.08	0.27	-0.08
27	1	-0.01	-0.11	0.04	-0.11	-0.09	0.00	-0.10	0.29	-0.08
28	1	-0.05	0.01	0.13	0.14	-0.04	0.05	0.09	-0.27	0.06
29	1	-0.01	0.17	0.02	0.10	0.09	0.03	0.10	-0.30	0.07
30	1	-0.03	-0.11	0.04	0.11	0.07	0.03	0.11	-0.28	0.07
31	47	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			19			20			21	
			A			A			A	
Frequencies	--	498.1074			520.3565			585.7455		
Red. masses	--	3.0648			3.5086			4.7973		
Frc consts	--	0.4480			0.5597			0.9698		
IR Inten	--	2.0036			4.5978			2.3593		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.03	-0.17	0.02	-0.01	-0.05	-0.16	0.04	-0.05
2	6	-0.03	0.01	0.04	-0.06	0.03	0.16	-0.14	-0.01	-0.06
3	6	-0.01	0.01	0.03	0.06	-0.02	-0.16	0.09	0.09	0.03
4	6	0.03	0.00	-0.08	-0.02	0.01	0.09	0.10	0.15	0.00
5	6	-0.06	0.03	0.19	-0.03	0.02	0.10	0.07	0.06	0.01
6	6	-0.05	0.03	0.14	0.04	-0.02	-0.15	-0.07	0.00	-0.03
7	6	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.05	-0.08	0.03
8	6	0.05	-0.04	-0.17	0.03	-0.02	-0.11	-0.08	0.04	-0.03
9	6	0.03	-0.04	-0.14	-0.04	0.03	0.15	0.05	0.09	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.09	0.03
11	6	-0.02	0.02	0.09	0.03	-0.02	-0.11	-0.16	0.04	-0.06

12	6	0.01	0.00	-0.02	-0.05	0.04	0.17	-0.13	-0.01	-0.03
13	6	0.02	-0.02	-0.06	0.04	-0.03	-0.16	0.09	0.06	0.01
14	6	-0.03	0.01	0.10	-0.03	0.02	0.09	0.10	0.15	0.00
15	6	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.20	0.06
16	6	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.20	0.06
17	1	0.14	-0.10	-0.38	-0.05	0.01	0.03	-0.14	0.03	-0.07
18	1	0.00	-0.03	-0.04	-0.15	0.06	0.34	-0.19	-0.15	-0.01
19	1	0.03	-0.01	-0.09	0.13	-0.05	-0.36	0.20	-0.02	0.11
20	1	0.15	-0.05	-0.43	-0.03	0.02	0.15	0.09	0.15	0.01
21	1	-0.10	0.08	0.41	0.04	-0.03	-0.14	-0.18	0.03	-0.06
22	1	-0.02	0.03	0.13	-0.11	0.09	0.42	-0.17	-0.16	0.00
23	1	-0.01	0.01	0.02	0.12	-0.09	-0.45	0.21	-0.06	0.06
24	1	-0.11	0.08	0.43	-0.01	0.00	0.03	0.13	0.17	0.01
25	1	0.03	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.05	-0.23	0.07
26	1	0.02	-0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.03	-0.16	0.04
27	1	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.05	-0.22	0.05
28	1	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.08	-0.21	0.04
29	1	-0.01	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.22	0.05
30	1	0.01	0.01	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.08	-0.19	0.04
31	47	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		22			23			24		
		A			A			A		
Frequencies	--	599.8461			615.2119			617.4949		
Red. masses	--	3.9562			3.4401			6.5801		
Frc consts	--	0.8387			0.7671			1.4783		
IR Inten	--	0.3213			5.5828			2.0287		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.05	-0.01	0.04	-0.02	-0.14	-0.09	0.25	-0.05
2	6	-0.08	0.07	-0.03	-0.06	0.03	0.17	0.16	0.08	0.03
3	6	0.04	0.11	-0.01	0.08	-0.02	-0.16	0.18	0.05	0.07
4	6	0.03	-0.03	0.02	-0.03	0.01	0.13	0.09	-0.24	0.05
5	6	0.12	-0.11	0.07	0.00	0.00	-0.03	-0.10	-0.09	-0.03
6	6	-0.05	-0.17	0.03	-0.01	0.00	-0.02	-0.15	0.00	-0.05
7	6	0.18	0.07	0.01	0.02	-0.02	-0.10	-0.13	-0.05	-0.01
8	6	0.05	0.17	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.12	0.00	-0.04
9	6	-0.13	0.11	-0.04	0.01	-0.01	-0.03	-0.09	-0.07	-0.02
10	6	-0.17	-0.06	-0.05	-0.04	0.03	0.17	-0.13	-0.05	-0.02
11	6	0.03	0.04	0.00	-0.03	0.03	0.12	-0.06	0.22	-0.07
12	6	0.10	-0.07	0.04	0.03	-0.03	-0.13	0.15	0.08	0.03
13	6	-0.06	-0.12	0.02	-0.03	0.03	0.13	0.19	0.05	0.03
14	6	-0.04	0.01	-0.02	0.04	-0.03	-0.11	0.08	-0.20	0.07
15	6	-0.05	0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.03	0.00
16	6	0.04	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.01	0.00
17	1	0.17	0.02	0.05	-0.01	-0.01	-0.10	-0.11	0.25	-0.05
18	1	-0.08	0.04	-0.03	-0.16	0.04	0.34	0.11	-0.17	0.05
19	1	0.06	0.10	-0.01	0.12	-0.04	-0.30	0.02	0.20	0.01
20	1	-0.16	-0.10	-0.05	-0.09	0.03	0.31	0.07	-0.24	0.03
21	1	-0.15	-0.03	-0.06	-0.05	0.05	0.21	-0.07	0.22	-0.06
22	1	0.12	-0.03	0.01	0.08	-0.07	-0.29	0.09	-0.14	0.09
23	1	-0.08	-0.09	-0.02	-0.09	0.08	0.36	0.06	0.18	-0.03
24	1	0.17	0.06	-0.02	0.03	-0.03	-0.11	0.06	-0.20	0.09
25	1	-0.15	-0.20	0.03	-0.02	0.09	0.00	0.02	0.06	-0.02
26	1	-0.27	0.26	-0.14	-0.01	0.01	0.05	0.09	-0.15	0.04
27	1	-0.12	-0.19	0.02	0.01	-0.08	0.04	0.02	0.08	-0.01
28	1	0.27	-0.24	0.09	0.01	0.03	-0.11	0.09	-0.13	0.04
29	1	0.10	0.21	0.01	0.06	-0.21	-0.02	0.04	0.05	-0.01
30	1	0.12	0.27	0.02	-0.03	0.14	-0.10	0.00	0.11	-0.02
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		25			26			27		
		A			A			A		
Frequencies	--	632.1560			678.6215			769.3379		
Red. masses	--	2.7860			5.7955			3.6743		
Frc consts	--	0.6560			1.5725			1.2813		

IR Inten		15.2934			0.3704			13.2435		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	0.04	0.14	-0.23	0.07	0.01	-0.05	-0.08
2	6	0.00	0.00	-0.03	-0.06	-0.04	-0.01	-0.10	0.03	0.03
3	6	-0.01	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.02	0.09	0.05	-0.09
4	6	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.27	-0.04	0.03	-0.02	0.03
5	6	0.05	-0.03	-0.11	0.08	0.10	0.00	0.08	-0.07	-0.15
6	6	0.04	-0.03	-0.11	0.12	-0.04	0.04	-0.07	-0.01	0.23
7	6	-0.05	0.05	0.23	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01
8	6	0.04	-0.01	-0.11	-0.13	0.03	-0.04	-0.04	-0.03	0.17
9	6	0.03	-0.02	-0.12	-0.10	-0.11	-0.01	0.07	-0.07	-0.13
10	6	-0.06	0.03	0.18	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.04
11	6	0.01	-0.01	-0.02	-0.14	0.24	-0.09	0.01	-0.05	-0.06
12	6	0.00	-0.01	0.00	0.07	0.05	0.01	-0.09	0.04	0.06
13	6	0.00	-0.02	-0.04	0.09	0.00	0.02	0.07	0.04	-0.09
14	6	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.29	0.06	0.02	0.00	0.07
15	6	-0.01	0.01	0.02	-0.02	0.07	-0.02	-0.03	0.07	-0.02
16	6	0.00	0.01	0.01	0.02	-0.07	0.02	-0.02	0.06	-0.02
17	1	-0.07	0.06	0.22	0.19	-0.20	0.12	0.14	-0.04	-0.12
18	1	-0.05	0.02	0.07	0.00	0.17	-0.04	-0.16	0.00	0.15
19	1	-0.07	0.03	0.21	0.10	-0.14	0.07	0.01	0.06	0.27
20	1	-0.09	0.02	0.22	0.05	0.30	0.01	-0.19	0.01	0.46
21	1	-0.07	0.04	0.26	-0.20	0.23	-0.09	0.15	-0.08	-0.30
22	1	-0.06	0.06	0.25	0.01	-0.19	0.04	-0.10	0.00	0.08
23	1	-0.05	0.02	0.15	-0.09	0.17	-0.05	0.09	0.02	-0.03
24	1	-0.08	0.08	0.33	-0.06	-0.31	0.06	-0.13	0.05	0.36
25	1	0.10	-0.29	-0.03	-0.01	0.08	-0.03	-0.02	0.09	-0.02
26	1	0.03	-0.04	-0.15	-0.02	0.06	-0.02	0.00	0.04	-0.02
27	1	-0.07	0.25	-0.19	-0.02	0.08	-0.02	-0.03	0.08	-0.02
28	1	0.03	0.02	-0.13	0.04	-0.08	0.02	-0.02	0.05	0.02
29	1	0.11	-0.25	-0.04	0.03	-0.07	0.02	-0.04	0.16	-0.01
30	1	-0.03	0.20	-0.14	0.02	-0.06	0.00	0.00	0.01	0.03
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		28			29			30		
		A			A			A		
Frequencies	--	773.7957			805.9098			823.5050		
Red. masses	--	4.7923			1.3684			1.4287		
Frc consts	--	1.6906			0.5236			0.5708		
IR Inten	--	4.0365			66.2160			54.4986		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	0.09	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.02
2	6	0.14	-0.03	0.11	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.04
3	6	-0.09	-0.14	-0.08	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01	-0.05
4	6	-0.08	0.03	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.01	-0.08
5	6	-0.04	0.08	-0.13	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.02	0.05
6	6	-0.04	0.15	0.10	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.04
7	6	0.00	0.02	0.01	-0.02	0.00	0.03	-0.03	-0.01	-0.01
8	6	-0.03	0.15	0.07	0.02	-0.02	-0.08	0.01	-0.02	-0.06
9	6	-0.04	0.08	-0.12	0.01	-0.01	-0.07	-0.03	0.03	0.07
10	6	0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.01	-0.04
11	6	0.05	0.08	-0.04	-0.01	0.01	0.07	0.02	-0.01	0.01
12	6	0.15	-0.03	0.10	-0.01	0.01	0.05	0.02	-0.01	-0.03
13	6	-0.10	-0.15	-0.05	-0.01	0.01	0.05	0.00	0.01	0.03
14	6	-0.09	0.04	0.00	-0.02	0.02	0.08	0.00	0.02	-0.01
15	6	0.05	-0.15	0.05	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00
16	6	0.06	-0.16	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02
17	1	-0.06	-0.03	-0.25	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.07	0.20
18	1	0.13	0.08	0.17	-0.02	0.01	0.04	-0.20	0.08	0.42
19	1	-0.21	-0.06	0.03	-0.02	0.01	0.07	-0.20	0.07	0.62
20	1	0.02	0.12	0.28	-0.01	0.01	0.06	-0.08	0.07	0.35
21	1	-0.10	-0.01	-0.23	0.10	-0.07	-0.33	-0.03	0.04	0.23
22	1	0.17	0.06	0.09	0.14	-0.11	-0.53	0.00	0.03	0.09
23	1	-0.19	-0.07	-0.06	0.15	-0.12	-0.55	0.00	0.00	0.03



24	1	0.05	0.13	0.21	0.11	-0.08	-0.39	0.07	0.00	-0.16
25	1	0.04	-0.18	0.06	0.03	-0.06	-0.01	0.01	0.06	-0.01
26	1	0.03	-0.14	0.03	0.02	-0.03	-0.04	0.04	-0.05	0.04
27	1	0.04	-0.17	0.04	-0.02	0.08	-0.05	0.01	0.01	0.01
28	1	0.03	-0.14	0.04	0.01	-0.01	-0.02	0.03	-0.06	0.06
29	1	0.03	-0.14	0.05	0.02	-0.06	-0.01	-0.02	0.12	0.00
30	1	0.05	-0.21	0.05	-0.01	0.06	-0.03	0.03	-0.02	0.05
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			31			32			33	
			A			A			A	
Frequencies	--	831.7739			862.2924			907.0005		
Red. masses	--	2.7114			1.7669			3.2485		
Frc consts	--	1.1053			0.7740			1.5745		
IR Inten	--	9.6393			3.2173			1.1238		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.08	0.08	-0.04	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.09	-0.02
2	6	-0.05	-0.01	-0.04	-0.02	0.01	0.06	-0.16	0.02	-0.07
3	6	-0.03	-0.03	-0.03	0.00	0.00	-0.01	0.10	0.10	0.04
4	6	-0.01	-0.12	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.05	-0.08	0.04
5	6	0.06	-0.05	0.06	0.05	-0.02	-0.13	-0.05	-0.04	-0.02
6	6	0.03	0.08	0.02	-0.03	0.02	0.09	0.06	0.01	0.04
7	6	0.14	0.05	0.03	-0.01	0.01	0.07	-0.13	-0.05	-0.02
8	6	0.03	0.07	-0.03	0.02	-0.02	-0.08	-0.07	0.01	-0.01
9	6	0.06	-0.05	0.04	-0.02	0.01	0.08	0.04	0.05	-0.01
10	6	0.15	0.05	0.02	0.01	-0.01	-0.05	0.13	0.05	0.02
11	6	-0.09	0.08	-0.03	0.01	-0.01	-0.04	0.02	0.08	-0.03
12	6	-0.06	0.00	-0.02	0.01	-0.01	-0.06	0.16	-0.02	0.04
13	6	-0.04	-0.03	0.01	-0.01	0.02	0.05	-0.12	-0.11	0.00
14	6	-0.03	-0.12	0.02	-0.01	0.00	0.04	-0.06	0.07	-0.01
15	6	0.03	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.03	-0.05	-0.02	-0.01
16	6	0.03	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.06	0.01	0.01
17	1	-0.16	0.07	-0.04	0.12	-0.13	-0.35	-0.04	0.06	0.34
18	1	-0.18	-0.04	0.17	0.16	-0.04	-0.29	-0.17	-0.09	-0.09
19	1	-0.16	0.03	0.20	0.06	-0.02	-0.18	0.21	0.03	-0.04
20	1	-0.17	-0.15	0.09	-0.04	0.01	0.10	0.03	-0.11	-0.08
21	1	-0.18	0.06	-0.03	-0.13	0.09	0.47	-0.09	0.07	0.06
22	1	-0.07	-0.08	-0.03	-0.06	0.04	0.21	0.17	0.08	0.09
23	1	-0.08	0.00	-0.06	0.04	-0.02	-0.12	-0.17	-0.05	-0.09
24	1	-0.13	-0.18	-0.06	0.11	-0.10	-0.44	0.04	0.06	-0.10
25	1	-0.07	-0.23	0.05	0.07	-0.15	-0.01	0.04	0.22	-0.05
26	1	-0.21	0.30	-0.13	0.01	-0.01	-0.05	0.18	-0.28	0.12
27	1	-0.07	-0.19	0.01	-0.05	0.13	-0.09	0.05	0.17	-0.01
28	1	-0.22	0.30	-0.08	0.00	-0.02	0.05	-0.20	0.29	-0.06
29	1	-0.09	-0.14	0.01	-0.07	0.12	0.00	-0.07	-0.16	0.02
30	1	-0.04	-0.29	0.02	0.03	-0.09	0.06	-0.02	-0.28	0.02
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			34			35			36	
			A			A			A	
Frequencies	--	922.9832			942.1831			984.3954		
Red. masses	--	1.5095			1.9189			1.3498		
Frc consts	--	0.7577			1.0036			0.7707		
IR Inten	--	2.6029			1.5163			33.4885		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	-0.01	-0.07	0.03	-0.01	-0.07	-0.04	0.01	0.06
2	6	0.04	-0.01	-0.04	0.01	0.00	-0.03	0.07	-0.05	-0.07
3	6	-0.03	-0.02	0.04	-0.02	-0.01	0.04	0.00	0.05	0.01
4	6	-0.02	0.01	0.05	-0.01	0.00	0.04	-0.03	0.04	0.05
5	6	0.01	0.01	-0.02	0.03	0.00	-0.09	0.01	-0.03	-0.03
6	6	-0.02	0.01	0.03	-0.04	0.02	0.09	0.02	-0.02	0.01
7	6	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.02	0.05	-0.01	-0.03	0.00
8	6	-0.01	0.01	0.07	0.04	-0.02	-0.12	-0.02	-0.01	0.00
9	6	0.01	-0.02	-0.08	-0.04	0.02	0.12	0.01	0.00	0.01
10	6	-0.02	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.05	0.01	-0.01	0.00

11	6	0.02	-0.03	-0.06	-0.02	0.01	0.07	0.00	0.02	0.00
12	6	-0.02	0.00	-0.03	-0.02	0.01	0.02	0.02	0.00	0.01
13	6	0.01	0.02	0.03	0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	0.00
14	6	-0.01	0.00	0.08	0.02	-0.03	-0.07	0.00	0.02	-0.01
15	6	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.04	-0.01	0.02	0.00
16	6	-0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.02	-0.04	0.00	0.02	0.00
17	1	-0.18	0.22	0.53	-0.13	0.18	0.44	0.15	-0.21	-0.51
18	1	-0.14	0.04	0.31	-0.10	0.02	0.19	-0.31	0.00	0.66
19	1	0.05	-0.04	-0.25	0.08	-0.04	-0.29	0.02	0.06	-0.12
20	1	0.10	-0.02	-0.27	0.06	-0.02	-0.16	0.01	-0.02	-0.28
21	1	-0.07	0.05	0.31	0.08	-0.06	-0.29	0.00	0.02	0.00
22	1	-0.08	0.03	0.21	0.05	-0.05	-0.24	0.02	0.00	0.01
23	1	0.08	-0.03	-0.19	-0.05	0.05	0.23	-0.01	-0.01	0.01
24	1	0.07	-0.08	-0.30	-0.08	0.05	0.30	0.00	0.02	-0.01
25	1	-0.03	-0.01	0.01	0.08	-0.20	0.00	0.03	-0.01	-0.01
26	1	-0.04	0.06	0.01	0.01	-0.02	-0.10	0.01	-0.01	-0.02
27	1	0.01	-0.08	0.03	-0.06	0.15	-0.11	-0.01	0.09	-0.04
28	1	0.02	-0.04	0.02	-0.02	-0.04	0.11	-0.01	0.04	-0.03
29	1	0.02	-0.01	-0.01	-0.08	0.22	0.00	-0.01	-0.01	0.00
30	1	0.00	0.06	-0.01	0.05	-0.14	0.11	-0.01	0.00	-0.01
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		37			38			39		
		A			A			A		
Frequencies	--	1020.8530			1024.5514			1033.2929		
Red. masses	--	1.3559			2.0627			1.6466		
Frc consts	--	0.8325			1.2757			1.0358		
IR Inten	--	0.2496			1.7006			1.5814		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.12	0.00	0.01	-0.07	0.02
2	6	-0.01	0.00	0.00	0.10	-0.06	0.04	0.01	0.00	0.03
3	6	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.15	0.05	0.06	0.04	-0.10
4	6	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.01	-0.10	-0.04	-0.01	0.11
5	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.01	0.01	-0.03	0.02	-0.04
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.01	-0.01	-0.03	0.02	-0.02
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.04	-0.02
8	6	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.02	-0.01
9	6	0.01	0.00	-0.02	-0.04	-0.01	-0.01	-0.04	0.00	-0.01
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.01
11	6	-0.03	0.02	0.09	0.00	-0.04	0.02	0.01	-0.06	0.01
12	6	0.02	-0.01	-0.07	0.03	-0.03	0.01	0.01	-0.02	0.01
13	6	0.02	-0.02	-0.08	0.03	0.06	-0.01	0.03	0.06	0.00
14	6	-0.03	0.02	0.09	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
15	6	-0.01	0.00	0.01	0.06	0.00	0.01	0.04	-0.02	0.03
16	6	-0.01	0.00	0.01	0.06	0.01	0.01	0.04	-0.01	0.01
17	1	0.01	0.01	0.00	-0.25	-0.16	0.06	-0.05	-0.08	0.04
18	1	-0.01	0.01	-0.01	0.10	-0.17	0.05	0.10	0.01	-0.13
19	1	-0.01	-0.01	0.04	0.04	0.23	-0.38	-0.21	0.16	0.54
20	1	0.02	0.00	-0.03	-0.36	0.02	0.37	0.14	-0.11	-0.62
21	1	0.12	-0.10	-0.49	-0.05	-0.08	-0.06	-0.05	-0.07	0.02
22	1	-0.10	0.08	0.40	0.02	-0.06	0.07	0.01	-0.04	0.00
23	1	-0.12	0.10	0.47	-0.01	0.11	0.02	-0.01	0.10	-0.03
24	1	0.12	-0.11	-0.49	-0.09	-0.02	-0.08	-0.08	-0.03	0.00
25	1	0.02	-0.03	0.00	-0.04	-0.13	0.05	0.02	-0.20	0.04
26	1	0.02	-0.02	-0.03	-0.12	0.20	-0.06	-0.05	0.07	-0.07
27	1	-0.01	0.05	-0.03	-0.02	-0.20	0.03	-0.03	-0.03	-0.04
28	1	0.01	-0.01	-0.02	-0.13	0.22	-0.05	-0.06	0.10	-0.03
29	1	0.02	-0.05	0.00	-0.07	-0.13	0.02	-0.02	-0.10	0.02
30	1	-0.01	0.06	-0.03	-0.01	-0.22	0.01	-0.01	-0.12	0.00
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
		40			41			42		
		A			A			A		
Frequencies	--	1048.5885			1052.9921			1054.2614		
Red. masses	--	3.5289			1.3867			2.6357		

Frc consts		2.2861			0.9059			1.7260		
IR Inten		0.4504			0.0277			1.9339		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.13	0.06	0.00	0.01	0.00	0.05	0.05	0.04
2	6	-0.04	0.02	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.06	-0.09
3	6	0.02	0.09	0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.03	-0.08	0.05
4	6	0.02	-0.14	0.01	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.08	0.01
5	6	-0.05	0.07	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00
6	6	0.02	0.10	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	0.00
7	6	-0.03	0.12	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.04	0.01
8	6	0.08	0.09	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.04	0.02	-0.02
9	6	-0.01	0.08	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.10	0.01	-0.02
10	6	-0.02	0.10	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.06	-0.02
11	6	0.05	-0.03	0.03	-0.02	0.00	0.06	0.00	-0.14	0.02
12	6	-0.15	0.10	-0.08	0.04	-0.03	-0.10	0.07	-0.07	0.05
13	6	-0.01	-0.05	0.03	-0.02	0.04	0.10	0.07	0.17	-0.03
14	6	0.07	-0.17	0.05	0.01	0.00	-0.06	-0.05	0.00	-0.01
15	6	-0.01	-0.11	0.01	0.00	0.01	0.01	0.02	-0.02	-0.01
16	6	-0.02	-0.09	0.03	0.01	0.00	0.00	0.04	-0.04	0.03
17	1	0.07	-0.22	-0.14	0.02	0.02	0.00	0.35	0.04	-0.15
18	1	-0.14	0.15	0.17	-0.01	0.01	0.00	-0.21	0.28	0.15
19	1	-0.03	0.18	-0.21	0.01	-0.03	0.00	0.13	-0.20	-0.18
20	1	-0.04	-0.14	0.13	0.01	0.01	0.01	0.18	-0.01	0.23
21	1	0.24	0.01	-0.01	0.07	-0.09	-0.35	-0.20	-0.20	0.04
22	1	-0.14	0.35	0.00	-0.14	0.10	0.60	0.08	-0.22	-0.02
23	1	0.03	-0.11	-0.05	0.14	-0.09	-0.55	-0.09	0.34	-0.03
24	1	0.22	-0.12	0.11	-0.10	0.07	0.29	-0.24	-0.06	-0.07
25	1	0.04	0.05	0.00	0.02	-0.04	0.00	-0.05	0.01	0.02
26	1	0.12	-0.26	0.10	0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.04
27	1	0.07	-0.02	0.04	-0.02	0.04	-0.03	0.01	-0.11	0.04
28	1	0.15	-0.25	0.02	-0.02	0.02	0.00	-0.04	0.05	-0.04
29	1	0.10	-0.08	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.02	-0.15	0.02
30	1	0.00	0.11	-0.04	0.01	-0.04	0.01	0.00	-0.10	-0.01
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies		1072.5693			1074.0047			1081.7347		
Red. masses		1.7759			3.2458			1.7873		
Frc consts		1.2037			2.2059			1.2322		
IR Inten		1.3748			1.7378			0.8062		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.01	0.00	0.02	-0.02	0.03	0.00	0.00	-0.02
2	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.01	-0.01	0.01
3	6	0.00	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01
4	6	-0.01	-0.01	0.02	0.01	0.02	0.01	-0.01	0.01	0.02
5	6	0.05	-0.02	0.00	-0.11	0.05	-0.07	0.03	-0.02	-0.05
6	6	0.04	0.04	-0.03	-0.06	-0.11	-0.02	-0.02	0.01	0.04
7	6	0.00	-0.04	0.09	-0.07	0.18	0.03	-0.03	0.00	0.14
8	6	-0.01	-0.03	-0.02	0.07	0.09	-0.02	0.01	-0.03	-0.05
9	6	-0.04	0.02	-0.05	0.13	-0.06	0.03	-0.02	0.01	0.05
10	6	-0.05	0.08	0.09	0.04	-0.16	0.10	0.02	-0.01	-0.11
11	6	0.01	-0.01	0.02	-0.04	0.04	0.00	0.00	0.01	0.02
12	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01
13	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.01
14	6	0.00	0.00	0.02	-0.02	-0.02	0.01	0.01	0.01	-0.02
15	6	0.00	0.02	-0.10	0.07	-0.13	-0.04	0.03	0.00	-0.12
16	6	0.05	-0.07	-0.10	-0.03	0.11	-0.09	-0.02	0.01	0.09
17	1	-0.09	-0.04	-0.06	0.27	0.00	-0.05	-0.04	0.02	0.04
18	1	0.01	-0.03	-0.02	-0.02	0.11	0.05	0.01	-0.02	0.00
19	1	-0.05	0.04	0.04	0.06	-0.04	0.00	-0.02	0.01	0.03
20	1	-0.05	-0.05	-0.10	0.22	0.09	0.02	0.00	-0.01	-0.10
21	1	0.10	-0.01	-0.04	-0.19	-0.03	-0.12	0.05	0.00	-0.07
22	1	0.00	0.04	0.01	-0.02	-0.07	0.04	0.00	0.01	0.02

23	1	0.02	-0.01	0.02	-0.06	0.03	-0.03	0.02	-0.03	-0.01
24	1	0.08	0.01	-0.04	-0.19	-0.09	-0.05	0.02	0.03	0.05
25	1	-0.17	0.37	-0.02	-0.14	0.09	0.06	-0.24	0.42	0.01
26	1	-0.05	0.08	0.16	-0.02	-0.04	0.17	-0.09	0.14	0.21
27	1	0.12	-0.22	0.18	0.13	-0.44	0.20	0.16	-0.39	0.26
28	1	-0.02	-0.12	0.27	-0.07	0.11	0.09	0.03	0.06	-0.20
29	1	-0.22	0.43	0.01	-0.15	0.41	-0.04	0.17	-0.39	0.01
30	1	0.16	-0.40	0.27	0.04	-0.01	0.11	-0.12	0.24	-0.21
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			46			47			48	
			A			A			A	
Frequencies	--	1093.4743			1105.1525			1132.1745		
Red. masses	--	1.6847			1.6760			2.7115		
Frc consts	--	1.1868			1.2061			2.0478		
IR Inten	--	1.8234			2.9287			1.5581		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03	0.02	0.00	-0.12	0.03
2	6	-0.04	-0.02	-0.01	-0.03	0.03	-0.02	0.00	0.07	-0.03
3	6	0.04	0.03	0.01	0.01	-0.05	0.02	-0.03	0.01	0.00
4	6	-0.01	-0.01	0.00	0.03	0.01	0.01	0.06	-0.13	0.04
5	6	-0.06	0.00	-0.02	-0.07	0.01	-0.02	0.03	0.12	-0.01
6	6	0.07	0.06	0.01	-0.04	-0.05	-0.01	-0.07	0.10	-0.04
7	6	-0.05	-0.02	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	0.04	-0.02	0.01
8	6	-0.06	-0.04	-0.01	-0.06	-0.06	0.00	0.04	-0.12	0.04
9	6	0.06	0.00	0.02	-0.06	0.01	-0.02	0.00	-0.12	0.02
10	6	0.05	0.03	0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.00
11	6	-0.01	-0.01	0.00	0.05	0.03	0.01	-0.04	0.13	-0.03
12	6	0.05	0.00	0.01	-0.04	0.06	-0.02	0.02	-0.04	0.01
13	6	-0.03	0.01	-0.01	-0.01	-0.07	0.01	0.01	-0.04	0.01
14	6	-0.01	0.00	-0.01	0.05	0.00	0.02	-0.04	0.13	-0.04
15	6	0.09	0.04	0.01	0.08	0.04	0.02	0.01	0.03	0.00
16	6	-0.10	-0.05	-0.02	0.06	0.02	0.01	-0.02	-0.01	0.00
17	1	0.00	0.00	-0.02	0.26	0.06	-0.01	-0.07	-0.19	-0.05
18	1	-0.07	-0.16	-0.02	-0.04	0.14	0.02	0.06	0.56	0.03
19	1	0.10	-0.02	0.03	0.14	-0.16	0.03	-0.23	0.19	-0.13
20	1	-0.08	-0.03	-0.01	0.15	0.06	0.06	0.14	-0.11	0.07
21	1	-0.04	-0.03	-0.01	0.27	0.10	0.04	0.03	0.15	-0.03
22	1	0.07	0.05	0.01	0.00	0.24	-0.05	-0.06	-0.36	0.06
23	1	-0.12	0.09	-0.07	0.10	-0.19	0.08	0.22	-0.23	0.10
24	1	-0.01	0.01	0.02	0.26	0.06	0.04	-0.08	0.13	-0.03
25	1	-0.08	-0.27	0.09	-0.08	-0.28	0.08	-0.02	-0.07	0.01
26	1	-0.22	0.37	-0.14	-0.20	0.35	-0.15	-0.05	0.11	-0.05
27	1	-0.08	-0.25	0.00	-0.08	-0.22	-0.01	-0.02	-0.03	0.00
28	1	0.26	-0.44	0.11	-0.15	0.24	-0.05	0.05	-0.10	0.03
29	1	0.14	0.22	-0.03	-0.09	-0.12	0.02	0.01	0.06	0.00
30	1	0.05	0.38	0.01	-0.03	-0.26	0.00	0.01	0.08	0.00
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			49			50			51	
			A			A			A	
Frequencies	--	1202.1214			1221.0369			1229.9315		
Red. masses	--	1.3433			1.3092			1.1131		
Frc consts	--	1.1437			1.1500			0.9921		
IR Inten	--	12.5451			1.5648			0.7026		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	-0.04	-0.02	0.03	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
2	6	0.04	0.05	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
3	6	0.00	-0.02	0.01	0.05	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.01
4	6	0.02	0.01	0.01	-0.05	0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.01
5	6	0.03	-0.04	0.01	-0.03	-0.05	0.00	0.03	0.02	0.00
6	6	-0.04	0.01	0.00	0.02	0.05	0.00	0.02	0.00	0.00
7	6	-0.02	-0.04	0.00	-0.03	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00
8	6	-0.04	0.02	-0.02	0.05	0.03	0.00	-0.03	0.02	-0.01
9	6	0.06	0.02	0.01	-0.02	-0.04	0.00	0.00	-0.04	0.01

10	6	0.00	-0.03	0.01	-0.03	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
11	6	-0.03	-0.05	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.02	-0.02	0.00
12	6	0.03	0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.03	0.00
13	6	-0.02	0.00	0.00	0.04	-0.01	0.01	0.03	-0.01	0.01
14	6	0.03	-0.02	0.01	-0.05	0.02	-0.02	-0.01	0.01	-0.01
15	6	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.00
16	6	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.39	-0.16	-0.08	-0.05	-0.02	-0.03	0.10	0.04	0.03
18	1	0.14	0.66	0.01	0.01	0.14	0.02	-0.04	-0.21	-0.01
19	1	0.15	-0.16	0.06	0.46	-0.38	0.19	-0.23	0.19	-0.10
20	1	-0.02	0.00	-0.01	-0.39	-0.10	-0.12	0.15	0.03	0.05
21	1	-0.22	-0.12	-0.03	0.00	0.02	-0.01	-0.33	-0.13	-0.06
22	1	0.12	0.39	-0.05	-0.02	-0.03	0.00	0.17	0.57	-0.08
23	1	-0.13	0.11	-0.06	0.37	-0.31	0.16	0.35	-0.31	0.16
24	1	0.07	-0.02	0.02	-0.33	-0.06	-0.07	-0.26	-0.06	-0.05
25	1	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00	-0.02	-0.02	0.01
26	1	-0.01	0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.01
27	1	-0.02	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
28	1	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
29	1	-0.02	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.00
30	1	-0.01	0.01	-0.01	0.02	0.01	0.01	0.01	0.02	0.01
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

52

53

54

Frequencies -- 1272.9429  
 Red. masses -- 1.4045  
 Frc consts -- 1.3409  
 IR Inten -- 2.2526

1320.2418  
 2.1930  
 2.2521  
 52.4898

1325.7719  
 2.1062  
 2.1812  
 48.7777

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	0.01	-0.02	0.00	0.04	-0.01	0.02	0.00	0.01
2	6	0.00	0.02	0.00	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01
3	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.03	0.00
4	6	0.04	0.03	0.01	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.03	-0.01
5	6	-0.04	-0.07	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.11	-0.12	-0.02
6	6	0.08	-0.05	0.04	0.15	-0.03	0.06	0.01	0.02	0.00
7	6	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.12	-0.02	-0.02	-0.07	0.01
8	6	-0.04	0.04	-0.02	-0.03	-0.02	0.00	0.20	-0.02	0.06
9	6	0.00	0.06	-0.01	-0.15	-0.15	-0.01	0.02	0.00	0.01
10	6	0.02	0.01	0.00	0.04	-0.05	0.01	-0.07	0.08	-0.03
11	6	0.05	0.00	0.01	0.02	0.01	0.00	-0.04	0.03	-0.01
12	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.04	-0.01
13	6	0.02	0.00	0.01	0.00	0.04	-0.01	0.01	0.00	0.00
14	6	-0.04	-0.02	-0.01	0.02	0.05	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.05	-0.01
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.05	-0.01	0.02	-0.02	0.01
17	1	-0.42	-0.11	-0.08	-0.56	-0.15	-0.13	-0.10	-0.05	-0.02
18	1	0.03	0.14	-0.02	-0.05	-0.07	-0.01	-0.03	-0.08	0.00
19	1	-0.14	0.12	-0.06	0.07	-0.06	0.04	0.08	-0.03	0.03
20	1	0.45	0.17	0.12	0.02	-0.01	0.01	0.53	0.22	0.14
21	1	0.38	0.11	0.08	-0.17	-0.06	-0.03	-0.60	-0.16	-0.13
22	1	-0.06	-0.21	0.03	0.02	0.08	-0.01	-0.07	-0.14	0.01
23	1	0.19	-0.17	0.08	0.11	-0.06	0.04	-0.03	0.04	-0.02
24	1	-0.38	-0.13	-0.07	0.60	0.24	0.11	0.20	0.06	0.04
25	1	-0.03	-0.07	0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.06	-0.10	0.02
26	1	-0.01	0.02	-0.01	0.05	-0.10	0.04	0.04	0.00	0.03
27	1	-0.02	-0.06	0.01	0.02	-0.03	0.02	-0.05	-0.08	0.00
28	1	0.02	-0.02	0.00	0.07	-0.05	0.02	0.03	-0.04	0.01
29	1	0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.05	-0.02	-0.04	-0.08	0.02
30	1	0.02	0.05	0.00	-0.04	-0.06	0.00	-0.02	-0.11	-0.02
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

55

56

57

Frequencies -- 1355.1986

1408.2339

1415.2717

Red. masses	--	4.5511		6.8544		5.4539				
Frc consts	--	4.9246		8.0088		6.4363				
IR Inten	--	58.9086		50.3252		17.0800				
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z			
1	6	0.06	0.01	0.02	-0.13	0.01	-0.05	0.09	0.00	0.03
2	6	0.00	-0.11	0.02	0.07	0.03	0.02	-0.04	-0.04	-0.01
3	6	-0.06	0.09	-0.03	-0.01	-0.05	0.00	-0.04	-0.01	-0.01
4	6	0.06	0.05	0.01	0.00	0.06	-0.01	0.08	0.08	0.02
5	6	-0.15	-0.19	-0.02	0.09	-0.09	0.04	0.13	-0.24	0.08
6	6	-0.19	0.04	-0.07	0.00	-0.23	0.04	-0.03	0.23	-0.05
7	6	0.23	0.05	0.06	-0.06	0.35	-0.09	-0.18	0.02	-0.06
8	6	-0.12	0.02	-0.04	-0.03	-0.23	0.04	-0.06	0.24	-0.07
9	6	-0.08	-0.10	0.00	0.13	-0.10	0.05	0.12	-0.26	0.08
10	6	0.19	0.12	0.03	-0.11	0.37	-0.09	-0.18	-0.03	-0.04
11	6	0.06	0.04	0.01	-0.10	0.04	-0.04	0.05	-0.03	0.02
12	6	-0.02	-0.09	0.01	0.05	-0.02	0.02	-0.01	-0.02	0.00
13	6	-0.07	0.06	-0.03	-0.02	-0.05	0.01	-0.03	0.00	-0.01
14	6	0.08	0.02	0.02	0.06	0.08	0.00	0.04	0.07	0.00
15	6	-0.08	0.00	-0.03	0.02	-0.09	0.02	0.04	-0.04	0.02
16	6	-0.06	-0.04	-0.01	0.04	-0.11	0.03	0.02	0.02	0.00
17	1	0.23	0.06	0.06	0.14	0.12	0.03	0.13	0.02	0.05
18	1	0.11	0.28	-0.02	0.10	0.15	0.02	-0.06	-0.09	-0.01
19	1	0.18	-0.12	0.08	-0.09	0.03	-0.04	-0.25	0.18	-0.11
20	1	0.32	0.14	0.07	-0.08	0.04	-0.03	0.14	0.10	0.04
21	1	-0.02	0.01	-0.01	0.06	0.11	-0.01	0.40	0.09	0.09
22	1	0.05	0.21	-0.03	0.12	0.29	-0.03	-0.03	-0.09	0.01
23	1	0.11	-0.11	0.05	-0.25	0.16	-0.10	-0.13	0.09	-0.05
24	1	0.01	0.00	0.01	-0.26	-0.01	-0.06	0.26	0.14	0.04
25	1	0.12	0.09	-0.11	0.01	-0.11	0.04	-0.11	0.00	0.07
26	1	0.12	-0.21	0.11	0.08	-0.17	0.06	-0.09	0.09	-0.06
27	1	0.12	0.12	0.12	0.01	-0.11	0.02	-0.09	-0.04	-0.11
28	1	0.08	-0.18	0.02	0.04	-0.11	0.01	0.04	-0.03	0.04
29	1	0.17	0.11	-0.04	0.00	-0.09	0.04	-0.12	-0.13	0.01
30	1	0.06	0.16	0.09	0.01	-0.10	-0.02	-0.07	-0.17	-0.05
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			58			59			60	
			A			A			A	
Frequencies	--	1422.2117		1446.2591		1453.8400				
Red. masses	--	1.5171		5.0302		1.2162				
Frc consts	--	1.8079		6.1990		1.5146				
IR Inten	--	1.3362		219.4070		22.2282				
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.09	0.00	-0.03	-0.20	-0.13	-0.03	-0.01	-0.02	0.00
2	6	0.00	-0.06	0.01	0.11	0.21	0.00	0.01	0.02	0.00
3	6	0.04	-0.04	0.02	0.09	-0.06	0.04	0.00	0.00	0.00
4	6	0.04	0.05	0.01	-0.19	-0.05	-0.06	-0.02	-0.01	0.00
5	6	0.00	-0.03	0.01	0.03	0.11	-0.01	0.01	0.00	0.00
6	6	0.02	-0.03	0.01	0.04	-0.08	0.02	-0.01	0.01	0.00
7	6	-0.06	-0.01	-0.02	0.00	-0.14	0.03	0.00	0.00	0.00
8	6	0.01	0.02	0.00	-0.07	0.18	-0.05	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	0.01	-0.01	0.03	-0.15	0.04	0.01	0.01	0.00
10	6	0.06	0.04	0.01	0.00	0.11	-0.02	0.00	-0.01	0.00
11	6	0.06	-0.01	0.02	0.15	0.03	0.03	-0.03	-0.01	-0.01
12	6	0.00	0.05	-0.01	-0.05	-0.07	0.00	0.01	0.00	0.00
13	6	-0.03	0.04	-0.02	-0.11	0.06	-0.04	0.02	0.00	0.01
14	6	-0.05	-0.04	0.00	0.11	0.02	0.03	-0.02	0.00	-0.01
15	6	0.02	-0.01	0.01	-0.03	0.07	-0.02	-0.01	0.02	-0.01
16	6	-0.02	0.01	-0.01	0.00	-0.04	0.01	-0.05	0.10	-0.04
17	1	0.31	0.16	0.07	0.34	0.06	0.07	0.05	0.00	0.01
18	1	0.11	0.40	-0.03	0.00	-0.25	0.08	0.00	-0.06	0.01
19	1	-0.27	0.25	-0.13	0.26	-0.20	0.11	0.05	-0.05	0.02
20	1	-0.25	-0.04	-0.08	0.32	0.12	0.09	0.05	0.01	0.01
21	1	-0.25	-0.11	-0.04	-0.10	-0.05	-0.02	0.12	0.04	0.02

22	1	-0.08	-0.30	0.04	-0.08	-0.18	0.02	0.03	0.05	0.00
23	1	0.23	-0.21	0.11	0.04	-0.10	0.03	0.01	0.01	0.00
24	1	0.27	0.05	0.06	0.05	0.00	0.01	-0.04	0.00	0.00
25	1	-0.07	0.06	0.04	0.09	-0.19	-0.06	0.08	-0.12	-0.04
26	1	-0.03	0.04	-0.02	0.10	-0.08	0.02	0.06	-0.06	0.01
27	1	-0.05	0.02	-0.09	0.02	-0.16	0.16	0.04	-0.10	0.12
28	1	0.04	-0.06	0.01	-0.04	0.03	-0.06	0.22	-0.27	0.22
29	1	0.12	-0.07	-0.04	0.03	0.07	0.01	0.30	-0.53	-0.14
30	1	0.04	-0.06	0.11	0.01	0.03	-0.01	0.12	-0.36	0.43
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

61				62				63			
A				A				A			
Frequencies	--	1457.7896		1474.2673		1480.9457					
Red. masses	--	1.2124		2.3334		2.1137					
Frc consts	--	1.5180		2.9881		2.7314					
IR Inten	--	16.9989		17.6861		26.8406					

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.04	-0.02	0.12	0.05	0.03
2	6	0.01	0.04	0.00	-0.05	-0.08	0.00	-0.03	0.01	-0.02
3	6	-0.01	0.00	0.00	0.08	-0.03	0.03	-0.05	-0.02	-0.02
4	6	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.03	0.00	0.09	0.01	0.03
5	6	-0.01	0.01	0.00	-0.11	0.03	-0.04	0.02	0.05	0.00
6	6	-0.02	-0.02	0.00	0.11	-0.02	0.04	-0.07	-0.07	-0.01
7	6	0.02	-0.01	0.00	0.02	-0.07	0.02	-0.03	-0.02	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.08	0.05	0.01	-0.05	-0.02	-0.01
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.06	0.00	0.05	0.02	0.01
10	6	0.01	0.02	0.00	-0.05	0.00	-0.02	-0.03	0.03	-0.02
11	6	0.01	0.01	0.00	0.03	0.07	-0.01	0.13	0.04	0.03
12	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.08	-0.11	0.00	-0.03	0.02	-0.01
13	6	-0.02	0.01	-0.01	0.02	-0.04	0.01	-0.10	0.01	-0.03
14	6	0.02	0.00	0.00	0.12	0.07	0.02	0.11	-0.01	0.03
15	6	0.05	-0.09	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00
16	6	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.02	0.00
17	1	-0.06	-0.04	-0.02	0.00	0.07	0.00	-0.39	-0.15	-0.10
18	1	-0.03	-0.12	0.01	0.04	0.34	-0.05	-0.08	-0.19	0.00
19	1	0.07	-0.07	0.03	-0.21	0.25	-0.11	-0.08	-0.01	-0.02
20	1	0.11	0.03	0.04	-0.22	-0.04	-0.07	-0.29	-0.13	-0.08
21	1	-0.06	-0.01	-0.01	-0.03	0.06	-0.02	-0.42	-0.15	-0.08
22	1	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.31	-0.06	-0.11	-0.30	0.03
23	1	0.00	-0.01	0.00	-0.32	0.29	-0.15	0.02	-0.13	0.03
24	1	-0.05	-0.02	-0.01	-0.42	-0.09	-0.08	-0.26	-0.14	-0.03
25	1	-0.32	0.47	0.16	0.06	0.07	-0.03	0.01	-0.10	-0.01
26	1	-0.26	0.27	-0.05	-0.07	0.09	-0.05	0.11	-0.10	0.00
27	1	-0.15	0.41	-0.44	0.04	0.06	0.02	-0.03	-0.14	0.05
28	1	0.06	-0.08	0.05	-0.01	0.00	0.08	0.11	-0.13	0.11
29	1	0.08	-0.12	-0.03	0.05	-0.15	-0.03	-0.09	-0.15	0.00
30	1	0.03	-0.08	0.10	0.06	-0.04	0.11	-0.04	-0.10	-0.03
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

64				65				66			
A				A				A			
Frequencies	--	1508.5712		1521.4489		1522.6981					
Red. masses	--	1.3876		1.3280		1.2000					
Frc consts	--	1.8605		1.8112		1.6393					
IR Inten	--	6.6261		29.4478		17.7989					

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.04	0.02	-0.02	0.02	-0.01	0.01
2	6	0.01	-0.03	0.01	0.01	-0.08	0.02	-0.01	0.04	-0.01
3	6	-0.03	0.04	-0.02	-0.03	0.07	-0.02	0.02	-0.04	0.01
4	6	-0.01	-0.02	0.00	-0.03	-0.04	0.00	0.01	0.02	0.00
5	6	0.07	-0.01	0.02	0.01	0.03	0.00	-0.02	-0.01	-0.01
6	6	0.00	0.03	0.00	0.04	0.01	0.01	-0.03	-0.02	-0.01
7	6	-0.05	0.02	-0.01	0.02	0.01	0.01	0.00	-0.02	0.02
8	6	0.00	-0.02	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	0.03	0.02	0.00

9	6	-0.07	0.01	-0.02	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.02	-0.03	0.01	-0.02	-0.02	-0.01	0.02	0.03	0.01
11	6	0.04	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.01
12	6	-0.03	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01
13	6	0.02	-0.05	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.03	0.00
14	6	0.04	0.03	0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.00
15	6	0.03	0.03	0.01	0.01	0.02	0.01	0.00	0.02	0.05
16	6	-0.03	-0.03	-0.01	0.04	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.01
17	1	0.04	0.02	0.01	0.19	0.11	0.05	-0.08	-0.05	-0.02
18	1	0.03	0.02	0.01	0.08	0.17	-0.01	-0.04	-0.07	0.00
19	1	0.10	-0.08	0.04	0.15	-0.08	0.06	-0.08	0.05	-0.03
20	1	0.09	0.01	0.02	0.14	0.01	0.03	-0.08	-0.01	-0.05
21	1	-0.13	-0.04	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.11	0.06	0.04
22	1	-0.05	-0.05	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.05	0.11	-0.01
23	1	-0.14	0.10	-0.06	0.02	-0.02	0.01	0.05	-0.01	0.01
24	1	-0.17	-0.03	-0.04	-0.03	-0.02	0.01	0.08	0.02	0.01
25	1	-0.26	0.01	0.13	-0.15	0.09	0.07	0.16	0.39	-0.05
26	1	0.24	-0.24	-0.07	0.15	-0.16	-0.10	0.15	-0.17	-0.60
27	1	-0.32	-0.27	-0.21	-0.22	-0.16	-0.16	-0.30	-0.40	-0.09
28	1	-0.20	0.22	-0.14	0.04	-0.15	0.44	0.10	-0.07	-0.10
29	1	0.39	0.12	-0.07	-0.50	-0.30	0.07	0.00	0.08	0.01
30	1	0.20	0.12	0.30	-0.09	0.11	-0.24	-0.07	-0.09	-0.07
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			67			68			69	
			A			A			A	
Frequencies	--	1532.6684			1547.0369			1561.9563		
Red. masses	--	1.2632			1.4433			2.3234		
Frc consts	--	1.7483			2.0352			3.3397		
IR Inten	--	51.2778			10.6639			41.6460		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.03	0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.05	-0.06	0.00
2	6	0.00	0.07	-0.01	0.00	0.05	-0.01	0.02	0.09	-0.01
3	6	0.03	-0.06	0.02	0.04	-0.06	0.02	0.05	-0.07	0.03
4	6	0.01	0.03	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.03	0.04	-0.02
5	6	0.00	-0.04	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.08	0.01
6	6	-0.03	0.01	-0.01	-0.06	-0.01	-0.01	0.00	0.09	-0.02
7	6	-0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.03	-0.01	0.04	0.06	0.00
8	6	0.01	0.00	0.00	0.05	0.02	0.01	-0.05	-0.05	-0.01
9	6	-0.03	0.00	-0.01	-0.04	0.01	-0.01	-0.09	0.00	-0.03
10	6	0.04	0.01	0.00	0.08	0.02	0.02	0.08	-0.05	0.04
11	6	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.02	-0.01	0.06	-0.02	0.02
12	6	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.08	0.01	-0.02	0.12	-0.03
13	6	0.02	-0.02	0.01	0.02	0.03	0.00	0.07	-0.12	0.05
14	6	0.00	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.02	0.06	-0.01
15	6	-0.01	-0.01	0.01	0.03	0.05	-0.03	-0.01	-0.02	0.00
16	6	0.01	-0.03	-0.05	0.00	0.01	0.00	0.00	0.05	0.02
17	1	-0.06	-0.07	-0.04	-0.06	-0.05	-0.02	0.14	0.01	0.04
18	1	-0.05	-0.12	0.01	-0.04	-0.07	0.01	-0.03	-0.09	0.01
19	1	-0.10	0.05	-0.04	-0.11	0.07	-0.05	-0.09	0.06	-0.04
20	1	-0.07	0.01	-0.02	-0.16	-0.02	-0.05	0.00	0.06	-0.01
21	1	-0.03	-0.02	0.00	0.18	0.10	0.02	-0.24	-0.13	-0.04
22	1	-0.01	-0.02	0.00	0.05	0.18	-0.02	-0.10	-0.17	0.01
23	1	-0.02	0.02	-0.01	0.02	0.03	0.00	-0.21	0.14	-0.09
24	1	0.02	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	-0.35	-0.04	-0.08
25	1	0.13	0.06	-0.05	-0.50	-0.31	0.21	0.08	0.07	-0.03
26	1	-0.04	0.04	-0.10	0.22	-0.20	0.44	-0.01	-0.02	-0.05
27	1	0.05	-0.01	0.06	-0.17	0.00	-0.21	0.03	0.01	0.03
28	1	-0.36	0.16	0.53	0.10	-0.13	0.07	0.35	-0.30	-0.07
29	1	-0.15	-0.27	-0.01	-0.16	0.00	0.03	-0.25	0.05	0.06
30	1	0.26	0.51	0.16	-0.08	0.01	-0.14	-0.26	-0.23	-0.30
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			70			71			72	
			A			A			A	



Frequencies	--	1586.1593		1597.7094		1607.5729				
Red. masses	--	3.6161		7.2091		4.1009				
Frc consts	--	5.3603		10.8424		6.2441				
IR Inten	--	2.3486		69.3997		20.7592				
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.08	0.04	0.02	-0.05	-0.07	0.00	-0.13	-0.09	-0.04
2	6	-0.08	-0.02	-0.03	0.00	0.08	-0.01	0.08	0.14	0.02
3	6	0.19	-0.08	0.07	0.10	-0.08	0.04	-0.16	-0.02	-0.05
4	6	-0.15	0.02	-0.05	-0.09	0.04	-0.04	0.26	0.05	0.08
5	6	-0.10	0.02	-0.03	0.04	-0.16	0.04	-0.21	-0.04	-0.06
6	6	0.02	0.02	0.00	0.09	0.25	-0.02	0.15	0.06	0.03
7	6	0.21	0.03	0.05	0.00	0.14	-0.03	0.13	0.00	0.04
8	6	-0.12	-0.02	-0.03	0.02	-0.25	0.05	-0.06	-0.01	-0.01
9	6	0.12	-0.03	0.04	0.00	0.22	-0.04	0.08	-0.01	0.02
10	6	-0.13	-0.01	-0.03	-0.12	-0.20	0.00	-0.11	-0.04	-0.02
11	6	-0.05	-0.08	0.00	0.05	0.14	-0.02	0.02	0.00	0.00
12	6	0.07	0.13	-0.01	-0.01	-0.25	0.05	-0.01	0.00	0.00
13	6	-0.04	-0.03	0.00	-0.22	0.22	-0.10	0.03	0.00	0.01
14	6	0.01	0.01	0.00	0.16	-0.11	0.06	-0.05	0.00	-0.01
15	6	-0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.02	-0.01
16	6	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00
17	1	-0.15	-0.05	-0.06	0.19	0.02	0.06	0.21	0.04	0.09
18	1	-0.06	0.16	-0.03	-0.04	-0.04	0.01	0.01	-0.29	0.02
19	1	-0.17	0.28	-0.10	-0.10	0.12	-0.05	0.02	-0.22	0.04
20	1	-0.02	0.08	-0.02	0.12	0.12	0.02	-0.49	-0.21	-0.13
21	1	0.08	-0.06	0.03	-0.16	0.09	-0.06	-0.03	-0.01	-0.01
22	1	-0.01	-0.24	0.05	0.10	0.21	-0.02	-0.01	0.03	-0.01
23	1	0.04	-0.11	0.03	0.27	-0.25	0.13	0.00	0.03	-0.01
24	1	0.08	0.02	0.01	-0.03	-0.19	0.02	0.13	0.05	0.02
25	1	-0.31	0.02	0.12	0.08	0.03	-0.03	-0.22	-0.01	0.08
26	1	0.25	-0.29	0.17	-0.02	0.00	-0.04	0.17	-0.19	0.13
27	1	-0.21	-0.03	-0.21	0.05	0.00	0.05	-0.13	-0.02	-0.13
28	1	-0.14	0.16	-0.06	-0.07	0.14	-0.09	-0.09	0.12	-0.04
29	1	0.17	-0.01	-0.03	0.07	0.01	-0.01	0.08	-0.02	-0.01
30	1	0.10	0.00	0.16	0.01	-0.08	0.05	0.05	-0.02	0.08
31	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			73			74			75	
			A			A			A	
Frequencies	--	1663.8367		3031.0770		3056.0329				
Red. masses	--	5.3127		1.0463		1.0433				
Frc consts	--	8.6654		5.6640		5.7408				
IR Inten	--	12.2095		34.8699		11.9468				
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.05	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.07	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.04	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.04	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.16	-0.06	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.16	0.05	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.04	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.27	0.16	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.18	-0.18	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.23	-0.03	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.29	-0.03	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.04	-0.01
16	6	0.00	-0.01	0.00	-0.05	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.07	-0.02	-0.02	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.02	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.01	0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.09	0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00







**Table S11.** Cartesian coordinates of optimized structure for (6-C<sub>9</sub>C<sub>10</sub>)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	3.803114	0.714907	0.131178
2	6	0	3.323016	1.889806	-0.504425
3	6	0	1.955432	2.167501	-0.553967
4	6	0	1.002839	1.283756	0.022984
5	1	0	1.631785	3.082507	-1.036817
6	6	0	1.497446	0.086695	0.648757
7	6	0	-0.438317	1.563844	0.023874
8	6	0	2.896299	-0.175278	0.699097
9	6	0	0.564398	-0.836212	1.256369
10	1	0	3.250843	-1.076904	1.193745
11	1	0	4.869963	0.518544	0.175376
12	6	0	-1.344491	0.640140	0.652041
13	6	0	-0.991301	2.739406	-0.553764
14	6	0	-0.824073	-0.566119	1.258382
15	1	0	0.957210	-1.644592	1.872650
16	1	0	4.028838	2.584955	-0.949958
17	6	0	-2.739222	0.922237	0.705711
18	6	0	-2.363115	2.994854	-0.501855
19	1	0	-0.348887	3.465217	-1.039150
20	1	0	-1.488912	-1.166061	1.879548
21	6	0	-3.247263	2.086843	0.137320
22	1	0	-3.404734	0.219904	1.202849
23	1	0	-2.757819	3.903125	-0.948098
24	1	0	-4.309777	2.304987	0.184004
25	47	0	-0.446746	-2.239701	-0.490731

**Table S12.** Vibrational frequencies for (6-C<sub>9</sub>C<sub>10</sub>)

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	38.8423			51.2167			99.2340		
Red. masses	--	8.9845			9.9194			4.2974		
Frc consts	--	0.0080			0.0153			0.0249		
IR Inten	--	0.2486			0.2732			0.5844		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.13	0.17	0.07	0.03	0.14	0.00	0.02	0.13	0.20
2	6	0.07	0.16	0.08	0.04	0.20	0.12	0.00	0.00	-0.03
3	6	0.06	0.08	0.05	0.04	0.20	0.11	-0.02	-0.09	-0.18
4	6	0.09	0.02	0.02	0.03	0.13	0.00	-0.01	-0.05	-0.11
5	1	0.02	0.07	0.06	0.04	0.24	0.20	-0.03	-0.18	-0.34
6	6	0.15	0.04	0.02	0.02	0.07	-0.10	0.00	0.03	0.03
7	6	0.08	-0.06	-0.02	0.03	0.13	0.00	-0.01	-0.05	-0.10
8	6	0.16	0.12	0.04	0.02	0.07	-0.11	0.02	0.13	0.21
9	6	0.20	0.00	0.01	0.01	0.04	-0.16	0.01	0.01	0.01
10	1	0.20	0.13	0.04	0.01	0.03	-0.19	0.03	0.21	0.34
11	1	0.14	0.23	0.09	0.03	0.13	0.00	0.03	0.22	0.35
12	6	0.12	-0.10	-0.01	0.02	0.07	-0.10	0.00	0.00	-0.02
13	6	0.02	-0.11	-0.06	0.04	0.19	0.10	-0.01	-0.04	-0.09
14	6	0.18	-0.08	0.00	0.01	0.04	-0.16	0.00	-0.01	-0.03
15	1	0.23	-0.01	-0.03	0.01	0.04	-0.17	0.00	0.02	0.02
16	1	0.04	0.20	0.11	0.04	0.25	0.21	-0.01	-0.03	-0.07
17	6	0.11	-0.17	-0.04	0.02	0.07	-0.11	0.02	0.07	0.12
18	6	0.01	-0.18	-0.09	0.04	0.19	0.11	0.01	0.04	0.06
19	1	-0.01	-0.09	-0.07	0.05	0.23	0.19	-0.02	-0.08	-0.16
20	1	0.22	-0.08	0.04	0.01	0.03	-0.16	0.00	-0.01	-0.04
21	6	0.05	-0.21	-0.07	0.03	0.12	0.00	0.03	0.11	0.18
22	1	0.14	-0.19	-0.03	0.01	0.02	-0.18	0.04	0.12	0.20
23	1	-0.04	-0.22	-0.12	0.05	0.24	0.19	0.02	0.06	0.09
24	1	0.04	-0.27	-0.09	0.03	0.12	0.00	0.05	0.18	0.31
25	47	-0.17	0.04	0.00	-0.04	-0.20	0.03	-0.01	-0.03	-0.04
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	102.1404			168.9374			247.7097		
Red. masses	--	3.8082			7.2716			4.4828		
Frc consts	--	0.0234			0.1223			0.1621		
IR Inten	--	1.0316			6.0144			0.9958		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.10	0.05	-0.04	0.18
2	6	0.01	0.08	0.16	-0.01	-0.07	-0.17	0.12	-0.08	0.06
3	6	0.01	0.07	0.13	0.00	0.03	0.02	0.12	-0.06	-0.14
4	6	-0.01	-0.01	-0.02	0.02	0.12	0.19	0.03	0.04	-0.12
5	1	0.02	0.14	0.25	0.00	0.01	-0.01	0.19	-0.08	-0.24
6	6	-0.02	-0.05	-0.09	0.02	0.13	0.21	-0.02	-0.01	-0.15
7	6	-0.01	-0.02	-0.04	0.02	0.12	0.19	0.01	0.13	0.03
8	6	-0.02	-0.07	-0.11	0.02	0.09	0.12	-0.04	-0.06	-0.01
9	6	-0.02	-0.04	-0.08	0.01	0.09	0.14	-0.01	0.00	-0.13
10	1	-0.03	-0.11	-0.19	0.03	0.12	0.17	-0.14	-0.08	0.01
11	1	-0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.09	-0.22	0.05	-0.02	0.37
12	6	0.01	0.05	0.09	0.03	0.13	0.21	0.05	0.12	0.09
13	6	-0.03	-0.11	-0.20	0.01	0.03	0.01	-0.10	0.12	0.10
14	6	0.00	0.05	0.07	0.02	0.09	0.14	0.03	0.11	0.04
15	1	-0.01	-0.06	-0.11	0.00	0.03	0.06	0.01	-0.01	-0.16
16	1	0.02	0.16	0.29	-0.03	-0.18	-0.37	0.18	-0.10	0.11
17	6	0.02	0.12	0.19	0.02	0.10	0.13	0.02	-0.02	0.08
18	6	-0.02	-0.07	-0.15	-0.02	-0.07	-0.18	-0.15	-0.06	0.01

19	1	-0.05	-0.21	-0.38	0.00	0.00	-0.03	-0.15	0.21	0.16
20	1	0.01	0.06	0.10	0.01	0.03	0.06	0.03	0.12	0.06
21	6	0.01	0.06	0.09	-0.01	-0.02	-0.09	-0.11	-0.15	-0.06
22	1	0.04	0.20	0.33	0.02	0.13	0.18	0.10	-0.07	0.11
23	1	-0.03	-0.15	-0.28	-0.04	-0.18	-0.37	-0.22	-0.11	-0.03
24	1	0.02	0.11	0.15	-0.03	-0.08	-0.21	-0.14	-0.29	-0.18
25	47	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.08	-0.09	0.00	0.00	0.00
			7			8			9	
			A			A			A	
Frequencies	--	248.2122			310.6639			406.9473		
Red. masses	--	4.4809			4.3564			3.3224		
Frc consts	--	0.1627			0.2477			0.3242		
IR Inten	--	1.0452			1.2880			5.6695		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	0.18	0.06	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01
2	6	-0.11	0.11	-0.01	0.02	0.06	0.11	0.01	-0.06	-0.12
3	6	-0.13	-0.08	-0.10	0.01	-0.02	-0.04	0.02	0.07	0.11
4	6	-0.03	-0.12	-0.03	-0.01	-0.05	-0.10	0.01	0.02	0.01
5	1	-0.22	-0.14	-0.16	0.01	-0.02	-0.04	0.04	0.17	0.28
6	6	0.00	-0.13	-0.09	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	-0.10
7	6	0.01	-0.04	0.12	-0.01	-0.05	-0.10	0.00	-0.02	-0.01
8	6	0.03	0.01	-0.07	-0.01	-0.05	-0.10	0.00	0.07	0.12
9	6	-0.02	-0.11	-0.05	0.02	0.15	0.27	-0.02	-0.09	-0.17
10	1	0.12	0.03	-0.11	-0.02	-0.08	-0.14	0.00	0.18	0.30
11	1	-0.02	0.32	0.18	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.03	0.07
12	6	-0.02	0.02	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.10
13	6	0.13	0.01	0.14	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	-0.08	-0.11
14	6	-0.01	0.00	0.13	0.04	0.15	0.27	0.01	0.10	0.17
15	1	-0.01	-0.13	-0.07	0.05	0.27	0.40	0.00	-0.13	-0.23
16	1	-0.16	0.18	0.03	0.03	0.14	0.27	0.00	-0.14	-0.25
17	6	-0.02	0.07	0.02	-0.01	-0.05	-0.09	-0.03	-0.07	-0.12
18	6	0.14	0.03	-0.06	0.00	0.06	0.11	0.03	0.06	0.12
19	1	0.20	0.01	0.24	-0.02	-0.01	-0.03	-0.03	-0.18	-0.29
20	1	0.02	0.00	0.15	0.05	0.27	0.40	0.06	0.12	0.24
21	6	0.06	0.02	-0.18	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01
22	1	-0.10	0.13	0.00	-0.01	-0.08	-0.13	-0.07	-0.17	-0.31
23	1	0.20	0.02	-0.12	0.02	0.14	0.26	0.06	0.13	0.25
24	1	0.05	-0.01	-0.37	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.02	-0.07
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.00	0.00	0.00
			10			11			12	
			A			A			A	
Frequencies	--	408.0833			445.3711			446.2180		
Red. masses	--	6.5236			3.1207			4.7161		
Frc consts	--	0.6401			0.3647			0.5533		
IR Inten	--	1.0450			8.8408			1.8652		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.27	0.04	-0.03	0.00	0.04	0.10	0.01	-0.06	0.00
2	6	0.13	0.00	0.00	0.02	0.01	0.02	0.12	0.00	0.00
3	6	0.08	-0.11	0.03	0.01	-0.04	-0.14	0.13	0.13	-0.06
4	6	0.04	-0.09	0.06	0.02	0.11	0.13	0.01	0.12	-0.12
5	1	0.05	-0.13	0.01	0.01	-0.17	-0.38	0.26	0.19	-0.05
6	6	0.20	-0.07	0.02	-0.02	0.07	0.05	-0.06	0.17	-0.10
7	6	-0.07	-0.07	0.06	0.01	0.06	0.16	-0.05	-0.16	0.04
8	6	0.28	-0.01	-0.04	-0.04	-0.07	-0.14	-0.10	0.08	0.00
9	6	0.04	0.02	-0.02	0.00	0.02	-0.02	-0.01	0.15	-0.05
10	1	0.33	-0.01	-0.07	-0.08	-0.21	-0.38	-0.22	0.07	0.08
11	1	0.29	0.11	-0.06	-0.01	0.05	0.17	-0.02	-0.18	0.03
12	6	-0.21	0.01	0.02	0.00	0.01	0.07	-0.13	-0.15	0.06
13	6	-0.11	-0.07	0.04	0.00	-0.09	-0.11	0.08	-0.14	0.12
14	6	-0.02	0.03	-0.03	-0.01	-0.03	0.00	-0.06	-0.13	0.05
15	1	-0.09	-0.02	0.01	0.02	-0.04	-0.11	0.16	0.20	-0.08
16	1	0.02	0.09	-0.04	0.04	-0.03	-0.01	0.21	-0.05	0.05
17	6	-0.26	0.10	-0.03	-0.03	-0.08	-0.13	-0.12	0.01	0.07

18	6	-0.12	0.05	-0.01	0.03	0.00	0.02	0.11	-0.05	-0.01
19	1	-0.09	-0.10	0.02	-0.01	-0.23	-0.33	0.19	-0.17	0.24
20	1	0.08	-0.05	0.01	-0.01	-0.11	-0.07	0.08	-0.21	0.12
21	6	-0.24	0.14	-0.03	0.03	0.05	0.09	0.02	0.03	-0.05
22	1	-0.31	0.12	-0.06	-0.08	-0.20	-0.36	-0.21	0.13	0.12
23	1	0.01	0.08	-0.05	0.03	-0.02	-0.04	0.22	-0.02	-0.04
24	1	-0.22	0.21	-0.05	0.04	0.10	0.15	0.03	0.13	-0.12
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

13				14			15		
A				A			A		
Frequencies	--	498.2494		518.8426		556.5268			
Red. masses	--	5.3348		3.2259		2.9049			
Frc consts	--	0.7803		0.5116		0.5301			
IR Inten	--	6.8551		2.8997		3.6947			

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.10	0.07	-0.01	-0.07	-0.12	0.00	0.04	0.07
2	6	-0.13	-0.15	0.08	0.01	0.08	0.13	0.00	-0.01	-0.02
3	6	-0.11	-0.02	0.03	0.00	-0.05	-0.09	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.14	0.04	-0.01	0.00	-0.03	-0.06	0.01	0.10	0.18
5	1	0.02	0.02	0.02	-0.01	-0.09	-0.17	-0.02	-0.17	-0.30
6	6	0.04	0.08	-0.07	0.01	0.09	0.16	0.01	0.07	0.11
7	6	-0.15	0.01	0.01	-0.01	-0.03	-0.06	-0.02	-0.10	-0.18
8	6	-0.01	-0.05	0.03	0.00	0.03	0.05	-0.01	-0.04	-0.07
9	6	0.28	0.02	-0.03	-0.01	-0.04	-0.06	-0.01	-0.07	-0.10
10	1	-0.15	-0.08	0.08	0.00	-0.01	-0.03	-0.03	-0.19	-0.33
11	1	0.01	-0.03	0.04	-0.02	-0.19	-0.33	0.00	-0.01	0.00
12	6	0.01	-0.09	0.07	0.03	0.09	0.16	-0.02	-0.07	-0.11
13	6	-0.10	0.06	-0.03	-0.01	-0.04	-0.09	0.00	0.00	0.00
14	6	0.25	-0.12	0.03	-0.01	-0.04	-0.06	0.02	0.06	0.11
15	1	0.44	0.02	-0.14	-0.03	-0.18	-0.23	-0.01	-0.16	-0.22
16	1	-0.14	-0.15	0.07	0.03	0.18	0.31	-0.02	-0.14	-0.25
17	6	0.01	0.05	-0.03	0.01	0.03	0.05	0.01	0.04	0.06
18	6	-0.07	0.19	-0.08	0.02	0.08	0.13	0.00	0.02	0.02
19	1	0.01	-0.02	-0.02	-0.02	-0.09	-0.17	0.04	0.16	0.30
20	1	0.40	-0.18	0.13	-0.04	-0.18	-0.23	0.05	0.14	0.22
21	6	0.04	0.10	-0.07	-0.02	-0.06	-0.12	-0.01	-0.03	-0.07
22	1	-0.11	0.13	-0.08	-0.01	-0.02	-0.03	0.05	0.18	0.32
23	1	-0.07	0.19	-0.08	0.04	0.17	0.30	0.04	0.14	0.25
24	1	0.02	0.02	-0.04	-0.05	-0.19	-0.33	0.00	0.01	0.00
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

16				17			18		
A				A			A		
Frequencies	--	557.9918		600.1549		633.0898			
Red. masses	--	7.1076		3.2702		6.9294			
Frc consts	--	1.3039		0.6940		1.6364			
IR Inten	--	2.2454		4.3742		3.0800			

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	-0.08	0.04	-0.02	-0.07	-0.12	-0.24	-0.02	0.04
2	6	-0.23	-0.11	0.09	0.00	0.07	0.13	-0.10	0.04	-0.02
3	6	-0.17	0.01	0.00	-0.01	-0.05	-0.09	-0.02	0.24	-0.13
4	6	-0.03	-0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.03	0.21	0.03	-0.04
5	1	-0.10	0.01	-0.02	-0.02	-0.10	-0.20	-0.10	0.23	-0.11
6	6	0.14	0.08	-0.04	0.01	0.04	0.06	0.10	-0.05	0.02
7	6	0.02	-0.02	0.01	0.01	0.01	0.03	0.18	-0.11	0.04
8	6	0.09	-0.13	0.07	0.00	0.06	0.11	0.02	-0.22	0.11
9	6	0.04	0.28	-0.16	0.00	-0.09	-0.14	0.04	0.01	0.01
10	1	-0.01	-0.16	0.08	0.00	0.07	0.14	0.12	-0.19	0.09
11	1	0.01	0.10	-0.08	-0.03	-0.19	-0.33	-0.21	0.11	-0.02
12	6	-0.10	0.13	-0.05	-0.01	-0.04	-0.06	0.11	0.01	-0.02
13	6	0.16	-0.06	0.00	0.01	0.05	0.09	-0.11	-0.22	0.13
14	6	0.07	0.28	-0.16	0.03	0.09	0.14	0.03	-0.02	-0.01
15	1	-0.09	0.26	-0.12	0.01	-0.15	-0.22	0.03	0.01	0.01
16	1	-0.22	-0.11	0.10	0.02	0.15	0.28	0.13	-0.14	0.05



17	6	-0.13	-0.09	0.07	-0.02	-0.05	-0.11	0.10	0.19	-0.11
18	6	0.17	-0.19	0.09	-0.02	-0.07	-0.13	-0.11	0.00	0.02
19	1	0.10	-0.02	-0.02	0.02	0.10	0.20	-0.18	-0.17	0.11
20	1	0.18	0.21	-0.11	0.06	0.14	0.22	0.03	-0.02	-0.01
21	6	0.00	-0.09	0.04	0.01	0.08	0.12	-0.21	0.11	-0.04
22	1	-0.05	-0.15	0.09	-0.03	-0.06	-0.14	0.18	0.13	-0.09
23	1	0.17	-0.18	0.10	-0.04	-0.15	-0.28	0.17	0.08	-0.05
24	1	0.03	0.10	-0.08	0.04	0.19	0.33	-0.24	-0.02	0.02
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			19			20			21	
			A			A			A	
Frequencies	--	715.6420			723.7095				759.4334	
Red. masses	--	5.6199			5.8693				3.2907	
Frc consts	--	1.6958			1.8112				1.1182	
IR Inten	--	1.1322			1.6551				17.4334	

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.10	-0.01	0.01	-0.19	0.03	0.00	0.01	0.05	0.10
2	6	0.00	0.06	-0.04	0.11	0.07	-0.05	-0.01	-0.05	-0.07
3	6	0.03	0.24	-0.14	0.08	-0.06	0.03	0.00	0.05	0.09
4	6	0.08	0.07	-0.05	0.03	-0.06	0.02	-0.02	-0.08	-0.17
5	1	0.06	0.25	-0.13	-0.03	-0.08	0.07	0.02	0.10	0.17
6	6	0.09	-0.10	0.04	-0.08	-0.05	0.04	0.01	0.09	0.16
7	6	-0.05	0.09	-0.05	0.05	0.04	-0.02	-0.02	-0.08	-0.16
8	6	0.13	-0.21	0.10	-0.21	0.08	-0.03	0.00	-0.03	-0.06
9	6	0.00	-0.10	0.06	0.22	-0.17	0.09	0.00	0.00	0.00
10	1	0.27	-0.16	0.10	-0.16	0.09	-0.06	-0.03	-0.23	-0.40
11	1	-0.07	0.14	-0.05	-0.24	-0.20	0.13	0.01	0.00	-0.02
12	6	-0.13	-0.05	0.04	-0.05	0.08	-0.04	0.02	0.09	0.16
13	6	0.06	0.23	-0.14	0.10	0.02	-0.03	0.02	0.05	0.09
14	6	-0.04	-0.09	0.06	0.27	0.08	-0.09	0.00	0.00	0.00
15	1	-0.03	-0.13	0.06	0.22	-0.13	0.13	-0.01	-0.15	-0.19
16	1	0.20	-0.09	0.05	0.17	0.03	-0.03	-0.03	-0.15	-0.25
17	6	-0.20	-0.14	0.10	-0.22	0.01	0.03	-0.01	-0.03	-0.06
18	6	0.03	0.05	-0.03	0.08	-0.11	0.05	-0.01	-0.05	-0.07
19	1	0.04	0.26	-0.13	0.00	0.08	-0.06	0.02	0.10	0.17
20	1	-0.02	-0.13	0.06	0.26	0.04	-0.14	-0.05	-0.14	-0.18
21	6	0.08	-0.05	0.01	-0.19	0.05	0.00	0.01	0.06	0.10
22	1	-0.31	-0.05	0.10	-0.18	-0.02	0.06	-0.06	-0.22	-0.40
23	1	-0.22	-0.01	0.05	0.15	-0.09	0.03	-0.03	-0.15	-0.25
24	1	0.11	0.11	-0.06	-0.15	0.27	-0.13	-0.01	0.00	-0.02
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			22			23			24	
			A			A			A	
Frequencies	--	797.8105			802.2525				831.3161	
Red. masses	--	1.2094			1.6414				1.9360	
Frc consts	--	0.4535			0.6224				0.7883	
IR Inten	--	113.0342			0.2335				0.0126	

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.07
2	6	0.01	0.03	0.04	0.00	-0.03	-0.06	0.00	-0.01	-0.01
3	6	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.02	-0.04	0.00	0.02	0.02
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.03	-0.02	-0.08	-0.15
5	1	-0.02	-0.14	-0.25	0.04	0.22	0.39	0.02	0.08	0.13
6	6	0.00	-0.02	-0.04	0.01	0.06	0.11	0.01	0.04	0.06
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.01	0.08	0.15
8	6	0.00	0.02	0.05	0.00	-0.03	-0.05	0.00	0.02	0.03
9	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.00	-0.03	-0.02
10	1	-0.01	-0.13	-0.22	0.00	0.03	0.04	-0.03	-0.24	-0.43
11	1	-0.02	-0.20	-0.34	0.02	0.18	0.31	-0.01	-0.18	-0.32
12	6	-0.01	-0.02	-0.04	-0.02	-0.06	-0.11	-0.01	-0.04	-0.06
13	6	0.00	0.02	0.02	0.00	0.02	0.04	-0.01	-0.02	-0.02
14	6	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.02	0.03	0.01	0.02	0.02
15	1	0.00	0.14	0.18	-0.02	-0.10	-0.12	-0.01	0.00	0.02

16	1	-0.02	-0.17	-0.30	0.02	0.18	0.32	-0.01	-0.13	-0.21
17	6	0.01	0.02	0.05	0.01	0.02	0.04	0.00	-0.02	-0.03
18	6	0.01	0.03	0.04	0.01	0.03	0.06	0.00	0.01	0.01
19	1	-0.03	-0.14	-0.26	-0.05	-0.21	-0.38	-0.01	-0.09	-0.13
20	1	0.06	0.13	0.18	0.02	0.09	0.11	-0.01	0.00	-0.02
21	6	0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.07
22	1	-0.04	-0.12	-0.22	-0.01	-0.02	-0.04	0.07	0.24	0.42
23	1	-0.05	-0.17	-0.31	-0.04	-0.17	-0.31	0.03	0.12	0.20
24	1	-0.05	-0.20	-0.35	-0.05	-0.17	-0.30	0.06	0.17	0.32
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			25			26			27	
			A			A			A	
Frequencies	--		841.0028			880.2906			895.2750	
Red. masses	--		5.7693			3.9219			1.2486	
Frc consts	--		2.4042			1.7906			0.5896	
IR Inten	--		0.0481			6.4565			70.0489	

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.23	-0.05	0.01	-0.11	0.03	0.00	0.01	0.00	0.01
2	6	-0.16	-0.15	0.10	0.00	0.05	-0.03	0.00	-0.02	-0.03
3	6	-0.10	0.11	-0.05	0.02	-0.16	0.09	0.00	-0.01	-0.04
4	6	-0.05	0.12	-0.05	0.10	-0.10	0.03	0.00	0.01	0.01
5	1	0.13	0.15	-0.13	-0.18	-0.21	0.16	0.02	0.14	0.23
6	6	-0.05	0.05	-0.05	0.03	0.04	-0.01	0.00	0.02	0.04
7	6	0.09	0.10	-0.05	0.13	0.06	-0.03	0.00	0.01	0.01
8	6	0.05	0.09	-0.05	-0.01	-0.03	0.02	0.00	0.01	0.02
9	6	0.02	-0.17	0.10	-0.01	0.22	-0.10	-0.01	-0.05	-0.06
10	1	-0.11	0.05	0.00	0.03	-0.03	-0.03	-0.02	-0.11	-0.20
11	1	0.26	0.09	-0.09	-0.12	-0.01	-0.04	0.01	0.01	0.01
12	6	0.06	0.03	-0.05	0.01	-0.05	0.01	0.01	0.02	0.04
13	6	0.13	0.06	-0.05	0.08	0.14	-0.09	0.00	-0.02	-0.03
14	6	-0.08	-0.16	0.10	-0.09	-0.20	0.10	-0.01	-0.04	-0.06
15	1	0.19	-0.15	0.04	0.25	0.14	-0.38	-0.03	0.33	0.45
16	1	-0.24	-0.10	0.05	-0.06	0.08	-0.06	0.01	0.11	0.20
17	6	-0.02	0.10	-0.05	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.01	0.02
18	6	0.09	-0.19	0.10	-0.02	-0.04	0.03	0.00	-0.02	-0.03
19	1	-0.07	0.18	-0.13	-0.09	0.26	-0.15	0.03	0.13	0.23
20	1	-0.23	-0.06	0.04	0.19	-0.21	0.40	0.16	0.30	0.44
21	6	-0.23	0.04	0.01	-0.12	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01
22	1	0.12	0.00	0.01	0.04	0.02	0.03	-0.03	-0.11	-0.20
23	1	0.18	-0.18	0.05	-0.08	-0.04	0.07	0.03	0.11	0.20
24	1	-0.21	0.19	-0.09	-0.11	0.05	0.04	0.00	0.01	0.01
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			28			29			30	
			A			A			A	
Frequencies	--		926.4931			932.8142			982.7072	
Red. masses	--		1.8058			1.4409			1.3219	
Frc consts	--		0.9133			0.7387			0.7521	
IR Inten	--		0.5547			17.6018			41.0250	

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	-0.03	0.01	0.01	0.02
2	6	0.00	0.02	0.02	0.00	0.01	0.02	0.02	0.02	0.00
3	6	0.01	0.05	0.08	0.00	0.03	0.06	0.00	0.00	-0.03
4	6	-0.01	-0.05	-0.10	0.00	-0.01	-0.02	-0.03	0.02	0.01
5	1	-0.03	-0.19	-0.35	-0.03	-0.17	-0.32	0.02	0.09	0.10
6	6	0.00	0.03	0.07	0.00	0.03	0.06	-0.02	-0.03	-0.01
7	6	0.01	0.06	0.10	0.00	-0.01	-0.03	-0.04	0.00	-0.01
8	6	0.00	-0.04	-0.07	0.00	-0.03	-0.06	0.01	-0.01	0.00
9	6	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	-0.05	0.01	0.04	0.08
10	1	0.02	0.20	0.34	0.01	0.17	0.30	0.03	0.01	0.05
11	1	0.01	0.10	0.19	0.02	0.14	0.24	0.00	-0.11	-0.14
12	6	-0.01	-0.03	-0.07	0.01	0.03	0.06	0.00	0.04	0.01
13	6	-0.01	-0.05	-0.08	0.01	0.03	0.06	0.00	0.00	0.04
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.05	-0.01	-0.03	-0.08

15	1	-0.02	-0.12	-0.14	-0.04	0.21	0.29	-0.04	-0.43	-0.49
16	1	-0.01	-0.13	-0.23	-0.01	-0.07	-0.13	0.03	-0.02	-0.06
17	6	0.01	0.04	0.07	-0.01	-0.03	-0.06	0.01	0.01	0.00
18	6	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.01	0.02	0.01	-0.03	0.00
19	1	0.05	0.19	0.35	-0.04	-0.18	-0.32	-0.02	-0.09	-0.10
20	1	0.03	0.12	0.14	0.11	0.18	0.28	0.12	0.41	0.49
21	6	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.02	-0.03	0.01	-0.01	-0.02
22	1	-0.05	-0.19	-0.34	0.05	0.16	0.30	0.02	-0.03	-0.05
23	1	0.04	0.12	0.22	-0.02	-0.08	-0.14	0.04	0.01	0.06
24	1	-0.03	-0.10	-0.19	0.04	0.14	0.25	0.04	0.10	0.14
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

31

32

33

		A			A			A		
Frequencies	--	1015.9783			1019.4528			1020.9406		
Red. masses	--	2.1840			2.3704			1.3747		
Frc consts	--	1.3283			1.4515			0.8443		
IR Inten	--	1.4666			2.4896			3.2537		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.03	0.03	0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.03	0.05
2	6	-0.07	-0.05	0.10	-0.08	-0.11	0.01	0.00	0.03	0.04
3	6	0.00	-0.02	-0.06	0.00	0.04	0.04	-0.01	-0.03	-0.06
4	6	0.11	-0.01	0.02	0.12	-0.03	-0.02	0.00	0.01	0.01
5	1	0.05	0.16	0.27	0.02	-0.10	-0.24	0.02	0.18	0.33
6	6	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.02
7	6	0.11	-0.03	-0.02	0.12	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.01
8	6	-0.04	0.05	-0.11	-0.03	0.13	-0.01	0.00	-0.04	-0.07
9	6	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.05	0.00	-0.01	-0.01
10	1	-0.02	0.27	0.26	-0.04	-0.04	-0.32	0.02	0.20	0.37
11	1	-0.01	-0.09	-0.23	0.02	0.12	0.14	-0.02	-0.17	-0.30
12	6	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.02	0.01	0.00	0.01	0.02
13	6	0.01	0.03	0.06	-0.01	-0.05	-0.04	-0.01	-0.03	-0.05
14	6	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.05	0.00	-0.01	-0.01
15	1	-0.01	0.04	0.06	-0.04	-0.20	-0.22	-0.02	0.05	0.07
16	1	-0.09	-0.24	-0.21	-0.05	0.03	0.29	-0.02	-0.14	-0.25
17	6	-0.06	-0.03	0.11	-0.08	-0.11	0.00	-0.01	-0.03	-0.06
18	6	-0.05	0.07	-0.10	-0.03	0.14	-0.01	0.01	0.02	0.04
19	1	-0.02	-0.17	-0.28	0.07	0.10	0.28	0.04	0.16	0.30
20	1	-0.03	-0.03	-0.06	0.05	0.21	0.23	0.03	0.03	0.06
21	6	0.00	-0.03	-0.04	0.01	0.01	0.04	0.01	0.03	0.05
22	1	-0.13	-0.26	-0.29	-0.01	0.07	0.37	0.06	0.18	0.33
23	1	0.01	0.26	0.22	-0.06	-0.02	-0.32	-0.03	-0.12	-0.21
24	1	0.03	0.10	0.25	-0.03	-0.13	-0.18	-0.05	-0.15	-0.28
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

34

35

36

		A			A			A		
Frequencies	--	1053.2205			1056.3336			1063.4947		
Red. masses	--	1.3897			1.3726			2.6333		
Frc consts	--	0.9083			0.9024			1.7548		
IR Inten	--	0.2422			0.1576			0.1819		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.04	-0.07	0.00	0.04	0.07	0.13	-0.07	0.04
2	6	0.01	0.04	0.07	-0.01	-0.05	-0.07	0.04	0.12	-0.08
3	6	-0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.02	0.04	-0.08	0.06	-0.02
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.02
5	1	0.00	0.09	0.16	-0.01	-0.13	-0.24	-0.26	0.01	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.02
8	6	0.00	0.02	0.04	0.00	-0.02	-0.03	-0.03	-0.07	0.04
9	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.01
10	1	-0.02	-0.12	-0.20	0.02	0.11	0.18	-0.31	-0.16	0.10
11	1	0.03	0.20	0.38	-0.02	-0.20	-0.37	0.11	-0.23	0.11
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01	0.00
13	6	0.00	0.02	0.04	0.00	0.02	0.04	0.11	0.03	-0.03

14	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.01
15	1	0.00	-0.02	-0.03	0.00	0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.02
16	1	-0.03	-0.20	-0.36	0.03	0.23	0.41	-0.09	0.25	-0.11
17	6	-0.01	-0.02	-0.04	-0.01	-0.02	-0.03	0.01	-0.08	0.04
18	6	-0.01	-0.04	-0.07	-0.01	-0.04	-0.07	0.01	0.14	-0.08
19	1	-0.04	-0.09	-0.18	-0.04	-0.12	-0.23	0.30	-0.12	0.01
20	1	0.01	0.02	0.03	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.02
21	6	0.02	0.04	0.07	0.01	0.04	0.06	-0.17	-0.02	0.04
22	1	0.03	0.12	0.21	0.02	0.10	0.16	0.27	-0.29	0.11
23	1	0.06	0.22	0.40	0.06	0.21	0.38	0.20	0.22	-0.12
24	1	-0.06	-0.21	-0.40	-0.05	-0.18	-0.34	-0.22	-0.20	0.13
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

37					38			39		
A					A			A		
Frequencies	--	1066.2079			1120.8310			1173.1119		
Red. masses	--	2.1067			2.4317			1.5586		
Frc consts	--	1.4110			1.7999			1.2637		
IR Inten	--	2.6988			5.8252			14.1922		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.13	-0.07	0.04	-0.02	0.03	-0.02	-0.03	-0.03	0.02
2	6	0.01	0.07	-0.05	-0.01	0.04	-0.02	0.02	0.01	-0.01
3	6	-0.09	0.05	-0.02	0.04	-0.11	0.06	-0.03	0.02	-0.01
4	6	0.07	-0.05	0.02	-0.02	0.08	-0.04	0.00	-0.04	0.02
5	1	-0.45	-0.04	0.04	0.03	-0.12	0.07	-0.14	-0.01	0.02
6	6	-0.02	0.00	0.01	-0.03	0.09	-0.04	0.06	0.04	-0.02
7	6	0.09	0.01	-0.02	0.05	0.07	-0.04	-0.02	-0.04	0.02
8	6	-0.06	-0.01	0.01	0.03	-0.11	0.06	0.02	0.03	-0.02
9	6	0.01	0.00	0.00	0.04	-0.06	0.02	0.09	-0.04	0.00
10	1	-0.35	-0.09	0.09	-0.09	-0.16	0.10	0.08	0.06	-0.03
11	1	0.11	-0.26	0.12	0.04	0.28	-0.16	-0.08	-0.25	0.15
12	6	-0.02	0.01	-0.01	0.06	0.07	-0.04	-0.04	0.06	-0.02
13	6	-0.09	-0.02	0.02	-0.08	-0.09	0.06	0.04	0.01	-0.01
14	6	0.01	-0.01	0.00	-0.06	-0.04	0.02	-0.10	0.00	0.00
15	1	0.06	0.02	-0.01	0.41	0.08	-0.03	0.54	0.12	-0.06
16	1	-0.11	0.19	-0.07	-0.21	0.20	-0.10	0.15	-0.09	0.04
17	6	-0.05	0.03	0.00	-0.07	-0.09	0.06	0.00	0.04	-0.02
18	6	-0.02	-0.05	0.04	0.02	0.04	-0.02	-0.01	0.01	-0.01
19	1	-0.37	0.20	-0.04	-0.07	-0.10	0.07	0.13	-0.06	0.02
20	1	0.05	-0.04	0.01	-0.35	0.22	-0.03	-0.46	0.32	-0.06
21	6	0.13	0.02	-0.03	0.03	0.02	-0.02	0.02	-0.04	0.02
22	1	-0.26	0.19	-0.07	0.03	-0.18	0.10	-0.05	0.09	-0.03
23	1	-0.15	-0.11	0.06	0.27	0.10	-0.10	-0.18	-0.03	0.04
24	1	0.17	0.18	-0.11	0.07	0.27	-0.16	-0.02	-0.27	0.15
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

40					41			42		
A					A			A		
Frequencies	--	1180.6771			1221.2477			1222.2147		
Red. masses	--	1.4276			1.1680			1.0713		
Frc consts	--	1.1725			1.0264			0.9429		
IR Inten	--	10.4423			2.0177			0.0343		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.03	-0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.02	-0.01
2	6	-0.04	0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.03	-0.02	0.01
3	6	0.05	-0.04	0.02	0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00
4	6	0.04	0.03	-0.02	-0.03	0.03	-0.02	0.00	-0.02	0.01
5	1	0.22	0.00	-0.01	0.17	0.03	-0.03	-0.29	-0.06	0.06
6	6	-0.02	0.03	-0.02	-0.03	-0.02	0.01	-0.01	0.01	-0.01
7	6	0.03	-0.04	0.02	0.04	0.02	-0.02	-0.01	0.01	-0.01
8	6	-0.03	-0.05	0.03	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
9	6	0.01	-0.03	0.03	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
10	1	-0.35	-0.15	0.10	0.33	0.08	-0.07	-0.23	-0.06	0.05
11	1	0.08	0.32	-0.19	-0.06	-0.29	0.17	0.08	0.37	-0.22
12	6	-0.03	-0.02	0.02	0.02	-0.03	0.02	-0.01	0.00	0.00

13	6	0.06	0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
14	6	0.02	0.03	-0.03	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
15	1	-0.04	-0.07	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00
16	1	-0.28	0.20	-0.10	-0.27	0.20	-0.10	0.38	-0.29	0.14
17	6	-0.01	0.06	-0.03	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	-0.04	0.00	0.01	0.03	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.01
19	1	0.21	-0.08	0.01	-0.20	0.13	-0.04	-0.21	0.15	-0.05
20	1	-0.01	0.09	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00
21	6	0.01	-0.03	0.02	0.00	-0.03	0.02	0.00	-0.02	0.01
22	1	-0.27	0.27	-0.10	-0.31	0.23	-0.07	-0.13	0.10	-0.04
23	1	-0.33	-0.08	0.10	0.42	0.11	-0.12	0.38	0.10	-0.11
24	1	-0.04	-0.33	0.19	-0.06	-0.36	0.21	-0.05	-0.31	0.18
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies	--	1249.3369			1251.8325			1289.6705		
Red. masses	--	1.8317			2.1288			1.5080		
Frc consts	--	1.6845			1.9656			1.4778		
IR Inten	--	20.2512			16.5681			15.2524		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
2	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00
3	6	0.02	0.04	-0.02	-0.03	-0.04	0.03	0.07	0.03	-0.02
4	6	0.00	-0.04	0.02	0.07	0.06	-0.04	0.03	-0.08	0.04
5	1	0.15	0.07	-0.06	-0.10	-0.07	0.04	0.42	0.12	-0.10
6	6	-0.12	-0.08	0.06	0.18	0.06	-0.05	0.04	-0.03	0.02
7	6	0.01	0.05	-0.03	-0.04	0.07	-0.03	-0.05	-0.06	0.04
8	6	-0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.02	-0.01	-0.03	0.02	-0.01
9	6	0.00	0.01	-0.01	0.02	-0.06	0.04	0.04	0.01	-0.01
10	1	0.18	0.03	-0.02	-0.27	-0.04	0.04	-0.37	-0.07	0.06
11	1	0.08	0.16	-0.10	-0.11	-0.30	0.18	0.01	0.08	-0.04
12	6	-0.11	0.13	-0.07	-0.12	0.09	-0.04	-0.05	-0.02	0.02
13	6	0.00	-0.05	0.03	0.01	-0.04	0.02	-0.05	0.06	-0.02
14	6	-0.01	-0.02	0.02	-0.04	-0.05	0.04	-0.03	0.02	-0.01
15	1	0.49	0.18	-0.10	-0.43	-0.22	0.14	0.16	0.05	-0.03
16	1	-0.03	0.02	-0.01	-0.17	0.13	-0.06	-0.24	0.16	-0.07
17	6	0.00	0.02	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.04	0.01	-0.01
18	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01	0.00
19	1	0.12	-0.14	0.06	0.04	-0.07	0.03	-0.35	0.28	-0.10
20	1	0.43	-0.41	0.12	0.23	-0.29	0.12	-0.13	0.10	-0.03
21	6	0.05	-0.02	0.00	0.03	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
22	1	0.19	-0.11	0.03	0.20	-0.12	0.03	0.32	-0.20	0.06
23	1	0.00	0.01	0.00	0.21	0.05	-0.06	0.28	0.05	-0.07
24	1	0.01	-0.24	0.13	-0.01	-0.28	0.16	0.02	0.07	-0.04
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		46			47			48		
		A			A			A		
Frequencies	--	1326.0104			1339.2726			1404.2595		
Red. masses	--	1.6994			2.6613			8.3179		
Frc consts	--	1.7606			2.8124			9.6640		
IR Inten	--	0.0295			0.8458			39.8896		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.02	-0.01	0.04	0.01	-0.01	0.05	0.15	-0.09
2	6	0.00	0.02	-0.01	-0.01	-0.05	0.03	0.18	-0.13	0.06
3	6	-0.03	0.03	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.16	-0.03	0.03
4	6	-0.04	-0.08	0.05	0.23	0.02	-0.03	0.03	0.22	-0.12
5	1	0.44	0.15	-0.12	-0.42	-0.10	0.09	-0.11	-0.02	0.02
6	6	0.08	-0.07	0.03	-0.01	-0.06	0.04	0.15	-0.18	0.09
7	6	-0.02	0.10	-0.05	-0.21	0.10	-0.03	-0.07	-0.24	0.14
8	6	-0.01	0.03	-0.01	-0.08	0.00	0.00	-0.21	-0.05	0.04
9	6	0.00	0.05	-0.03	-0.05	0.02	-0.01	-0.02	0.05	-0.03
10	1	-0.43	-0.08	0.08	0.16	0.07	-0.04	0.08	0.03	-0.01
11	1	-0.02	-0.07	0.04	0.05	0.06	-0.04	0.03	0.04	-0.02

12	6	0.10	0.03	-0.03	-0.02	-0.06	0.04	0.23	0.14	-0.11
13	6	-0.04	-0.02	0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.17	0.11	-0.04
14	6	-0.01	-0.05	0.03	0.06	0.00	-0.01	-0.03	-0.05	0.03
15	1	-0.05	0.05	-0.01	0.29	0.13	-0.10	0.17	0.11	-0.06
16	1	0.12	-0.07	0.03	-0.28	0.14	-0.06	-0.23	0.19	-0.09
17	6	-0.02	-0.02	0.01	0.07	-0.02	0.00	-0.19	0.15	-0.05
18	6	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.05	0.03	0.24	0.05	-0.06
19	1	0.36	-0.31	0.12	0.32	-0.23	0.08	-0.05	0.02	0.00
20	1	-0.07	-0.01	0.00	-0.21	0.23	-0.09	0.16	-0.20	0.08
21	6	-0.01	-0.02	0.01	-0.03	0.03	-0.01	-0.01	-0.18	0.10
22	1	-0.37	0.24	-0.08	-0.10	0.11	-0.04	0.06	-0.05	0.00
23	1	0.16	0.02	-0.04	0.31	0.03	-0.06	-0.26	-0.09	0.09
24	1	0.01	0.08	-0.04	-0.02	0.07	-0.03	0.02	-0.03	0.01
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

49

50

51

Frequencies	--	1406.4618		1442.7957		1455.1816
Red. masses	--	5.2763		1.6858		2.6626
Frc consts	--	6.1494		2.0676		3.3220
IR Inten	--	36.0201		0.3027		114.9122

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	-0.15	0.09	0.00	0.05	-0.03	-0.02	-0.09	0.05
2	6	-0.13	0.05	-0.02	-0.03	0.01	0.00	0.03	-0.01	0.00
3	6	0.20	0.04	-0.04	-0.01	-0.04	0.02	0.05	0.02	-0.02
4	6	0.08	-0.16	0.08	0.02	0.04	-0.02	-0.08	0.05	-0.02
5	1	-0.35	-0.10	0.09	0.05	-0.03	0.01	-0.36	-0.08	0.07
6	6	-0.10	0.20	-0.11	0.02	0.03	-0.02	0.02	-0.08	0.04
7	6	-0.13	-0.09	0.07	0.01	-0.04	0.02	0.09	0.02	-0.02
8	6	0.14	0.05	-0.04	0.06	-0.01	0.00	-0.04	0.04	-0.02
9	6	-0.06	-0.04	0.03	-0.08	-0.07	0.06	0.20	0.01	-0.02
10	1	0.11	0.05	-0.05	-0.22	-0.09	0.07	0.06	0.08	-0.04
11	1	0.00	0.15	-0.09	-0.07	-0.28	0.16	0.06	0.34	-0.20
12	6	0.14	0.13	-0.10	0.00	-0.04	0.02	-0.04	-0.07	0.04
13	6	-0.15	0.10	-0.03	0.00	0.04	-0.02	-0.04	0.04	-0.02
14	6	0.04	-0.06	0.03	-0.05	0.10	-0.06	-0.18	0.08	-0.02
15	1	-0.29	-0.12	0.08	0.48	0.06	-0.10	-0.17	-0.10	0.08
16	1	-0.12	0.04	-0.01	0.15	-0.14	0.07	-0.18	0.17	-0.08
17	6	-0.09	0.09	-0.03	0.06	-0.01	0.00	0.05	0.02	-0.02
18	6	0.11	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00
19	1	0.29	-0.23	0.09	0.06	0.00	-0.01	0.31	-0.21	0.08
20	1	0.20	-0.19	0.07	0.42	-0.24	0.10	0.11	-0.16	0.07
21	6	0.00	-0.14	0.08	-0.02	-0.05	0.03	-0.01	-0.09	0.05
22	1	-0.08	0.09	-0.05	-0.17	0.17	-0.07	-0.01	0.09	-0.04
23	1	0.16	0.01	-0.03	0.19	0.07	-0.07	0.23	0.08	-0.08
24	1	0.05	0.14	-0.09	0.04	0.29	-0.17	0.07	0.33	-0.20
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

52

53

54

Frequencies	--	1471.6644		1494.5915		1528.1622
Red. masses	--	2.2919		2.1101		2.8028
Frc consts	--	2.9245		2.7771		3.8564
IR Inten	--	3.0976		48.3615		0.0671

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.03	0.02	-0.07	-0.04	0.03	0.00	0.10	-0.06
2	6	0.11	-0.03	0.01	0.04	-0.05	0.03	-0.06	-0.04	0.03
3	6	-0.08	0.03	-0.01	0.09	0.05	-0.04	0.11	0.01	-0.02
4	6	-0.02	-0.07	0.04	-0.08	-0.02	0.02	-0.01	0.06	-0.03
5	1	0.20	0.11	-0.08	-0.34	-0.04	0.05	-0.28	-0.09	0.07
6	6	0.06	0.09	-0.06	0.08	-0.04	0.02	-0.12	-0.09	0.06
7	6	-0.01	-0.07	0.04	-0.07	0.05	-0.02	-0.04	-0.05	0.03
8	6	-0.11	-0.03	0.02	0.05	0.06	-0.04	0.09	-0.02	0.00
9	6	-0.04	-0.03	0.02	-0.05	-0.01	0.02	0.08	0.06	-0.05
10	1	0.41	0.12	-0.10	-0.24	-0.01	0.02	-0.29	-0.13	0.09

11	1	0.07	0.29	-0.17	-0.05	0.14	-0.08	-0.09	-0.31	0.18
12	6	-0.02	0.11	-0.06	0.09	0.00	-0.02	-0.08	0.13	-0.06
13	6	0.09	0.00	-0.01	0.06	-0.08	0.04	0.09	-0.05	0.02
14	6	0.02	-0.04	0.02	-0.05	0.03	-0.02	0.05	-0.08	0.05
15	1	-0.02	-0.02	0.02	0.26	0.07	-0.06	-0.25	-0.01	0.06
16	1	-0.15	0.19	-0.10	-0.32	0.23	-0.11	-0.05	-0.07	0.04
17	6	0.09	-0.07	0.02	0.02	-0.07	0.04	0.09	-0.02	0.00
18	6	-0.11	0.02	0.01	0.06	0.03	-0.03	-0.03	0.06	-0.03
19	1	-0.15	0.18	-0.08	-0.30	0.16	-0.05	-0.23	0.19	-0.07
20	1	0.02	-0.04	0.02	0.21	-0.16	0.06	-0.23	0.10	-0.06
21	6	-0.01	-0.03	0.02	-0.05	0.06	-0.03	-0.04	-0.10	0.06
22	1	-0.34	0.27	-0.10	-0.21	0.09	-0.02	-0.22	0.23	-0.09
23	1	0.20	0.12	-0.09	-0.39	-0.09	0.11	-0.02	0.08	-0.04
24	1	0.04	0.30	-0.17	-0.10	-0.11	0.08	0.04	0.32	-0.19
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			55			56			57	
			A			A			A	
Frequencies	--	1555.7917			1602.8900			1608.6505		
Red. masses	--	2.8567			5.3983			6.7504		
Frc consts	--	4.0740			8.1718			10.2921		
IR Inten	--	38.0321			25.1816			9.7447		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.07	-0.05	0.02	0.03	0.20	-0.12	-0.02	0.19	-0.11
2	6	-0.11	0.11	-0.05	0.06	-0.12	0.07	0.18	-0.18	0.09
3	6	-0.03	-0.06	0.04	0.01	0.07	-0.04	-0.09	0.10	-0.05
4	6	0.13	0.00	-0.02	0.05	-0.11	0.06	0.02	-0.21	0.12
5	1	0.38	0.02	-0.05	-0.13	0.04	-0.01	0.00	0.14	-0.08
6	6	-0.03	0.01	0.00	-0.17	0.09	-0.04	-0.08	0.17	-0.09
7	6	-0.12	0.05	-0.02	-0.08	-0.08	0.05	0.10	0.19	-0.12
8	6	-0.09	-0.02	0.02	0.00	-0.11	0.06	0.02	-0.09	0.05
9	6	0.13	0.00	-0.01	0.23	0.00	-0.02	0.00	-0.03	0.03
10	1	0.26	0.07	-0.06	0.07	-0.11	0.06	0.06	-0.09	0.05
11	1	0.11	0.03	-0.02	-0.07	-0.29	0.17	-0.11	-0.18	0.11
12	6	0.03	0.00	0.00	0.18	0.01	-0.04	-0.15	-0.13	0.09
13	6	0.00	-0.07	0.04	0.01	0.06	-0.04	-0.12	-0.06	0.05
14	6	-0.12	0.04	-0.01	-0.21	0.08	-0.02	0.02	0.02	-0.03
15	1	-0.16	-0.09	0.07	-0.29	-0.16	0.12	-0.05	-0.06	0.01
16	1	0.31	-0.21	0.10	-0.16	0.03	0.00	-0.29	0.18	-0.08
17	6	0.07	-0.05	0.02	-0.04	-0.10	0.06	0.06	0.08	-0.05
18	6	0.14	0.06	-0.05	-0.09	-0.09	0.06	0.24	0.10	-0.09
19	1	-0.33	0.16	-0.04	0.13	-0.02	-0.01	-0.06	-0.13	0.08
20	1	0.11	-0.15	0.07	0.20	-0.25	0.11	-0.03	0.09	-0.02
21	6	-0.08	-0.02	0.02	0.04	0.19	-0.11	-0.09	-0.17	0.11
22	1	-0.21	0.16	-0.05	-0.10	-0.07	0.06	0.09	0.07	-0.05
23	1	-0.37	-0.08	0.10	0.15	-0.04	0.00	-0.35	-0.06	0.09
24	1	-0.09	0.06	-0.02	-0.05	-0.29	0.17	-0.03	0.22	-0.12
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			58			59			60	
			A			A			A	
Frequencies	--	1651.9440			1656.6455			3178.0764		
Red. masses	--	5.3838			5.8437			1.0877		
Frc consts	--	8.6563			9.4493			6.4726		
IR Inten	--	59.4552			14.8217			3.8246		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.11	-0.09	0.06	-0.13	-0.10	0.07	0.00	0.00	0.00
2	6	0.15	-0.02	0.00	0.16	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.22	-0.03	0.03	-0.22	-0.04	0.04	0.00	0.00	0.00
4	6	0.16	0.02	-0.02	0.11	0.08	-0.05	0.00	0.00	0.00
5	1	0.32	0.11	-0.09	0.25	0.07	-0.07	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.15	-0.01	0.02	-0.16	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.14	0.08	-0.03	0.07	-0.11	0.05	0.00	0.00	0.00
8	6	0.20	0.07	-0.06	0.23	0.09	-0.07	0.00	0.00	0.00
9	6	0.05	0.01	-0.01	0.03	0.01	-0.02	0.02	-0.04	0.03

10	1	-0.27	-0.05	0.04	-0.32	-0.06	0.05	0.01	-0.03	0.02
11	1	-0.08	0.16	-0.09	-0.09	0.18	-0.09	-0.01	0.00	0.00
12	6	0.14	-0.07	0.02	-0.13	0.09	-0.03	0.00	0.00	0.00
13	6	0.19	-0.11	0.03	-0.18	0.12	-0.04	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.04	0.03	-0.01	0.02	-0.02	0.02	0.04	0.04	-0.04
15	1	-0.08	-0.03	0.02	-0.09	-0.01	0.03	-0.24	0.50	-0.39
16	1	-0.07	0.18	-0.10	-0.06	0.18	-0.10	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.16	0.15	-0.06	0.18	-0.17	0.06	0.00	0.00	0.00
18	6	-0.15	0.04	0.00	0.15	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.26	0.22	-0.09	0.20	-0.15	0.06	0.00	0.00	0.00
20	1	0.07	-0.05	0.02	-0.08	0.04	-0.03	-0.44	-0.40	0.42
21	6	0.07	-0.13	0.06	-0.08	0.14	-0.07	0.00	0.00	0.00
22	1	0.24	-0.15	0.04	-0.27	0.17	-0.05	0.02	0.03	-0.02
23	1	0.14	0.14	-0.10	-0.12	-0.14	0.10	0.00	0.00	0.00
24	1	0.14	0.12	-0.09	-0.15	-0.13	0.09	-0.01	0.00	0.00
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

61

62

63

		A			A			A		
Frequencies	--	3196.5926			3200.3651			3201.2357		
Red. masses	--	1.0947			1.0903			1.0904		
Frc consts	--	6.5903			6.5795			6.5838		
IR Inten	--	2.0932			2.8548			4.1017		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.02	-0.01
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.03	-0.02	0.02	-0.06	0.03
9	6	0.02	-0.05	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.01
10	1	0.07	-0.18	0.10	0.15	-0.39	0.21	-0.26	0.65	-0.36
11	1	-0.06	0.01	0.00	-0.15	0.03	-0.01	0.26	-0.05	0.01
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.04	-0.03	0.03	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.01
15	1	-0.25	0.51	-0.39	-0.01	0.02	-0.02	-0.08	0.17	-0.13
16	1	0.01	0.01	-0.01	0.03	0.03	-0.02	-0.05	-0.05	0.03
17	6	0.01	0.01	-0.01	-0.04	-0.05	0.03	-0.02	-0.02	0.02
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.02	0.01	0.01	0.00
20	1	0.40	0.35	-0.37	0.06	0.06	-0.06	0.12	0.11	-0.11
21	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
22	1	-0.13	-0.14	0.10	0.50	0.52	-0.37	0.26	0.27	-0.19
23	1	-0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.06	0.03	0.01	-0.03	0.01
24	1	0.06	-0.01	0.00	-0.26	0.05	0.01	-0.14	0.03	0.01
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

64

65

66

		A			A			A		
Frequencies	--	3219.1451			3221.7842			3235.1836		
Red. masses	--	1.0893			1.0903			1.0947		
Frc consts	--	6.6506			6.6676			6.7507		
IR Inten	--	0.1050			4.2491			8.1727		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.00
2	6	-0.03	-0.03	0.02	-0.03	-0.03	0.02	0.01	0.00	0.00
3	6	-0.01	0.03	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.04	-0.02
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.11	-0.30	0.16	0.05	-0.13	0.07	0.15	-0.41	0.22
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01





**Table S13.** Cartesian coordinates of optimized structure for (6-C<sub>1</sub>C<sub>2</sub>)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	2.006711	0.801500	1.350888
2	6	0	1.250771	1.954718	0.978972
3	6	0	-0.075109	1.816849	0.571636
4	6	0	-0.725024	0.546134	0.493309
5	1	0	-0.627474	2.716432	0.324182
6	6	0	0.024496	-0.627438	0.864317
7	6	0	-2.116461	0.401229	0.081176
8	6	0	1.387059	-0.486755	1.286055
9	6	0	-0.603217	-1.922419	0.851344
10	1	0	1.892247	-1.349355	1.719282
11	1	0	2.971308	0.916001	1.842682
12	6	0	-2.703385	-0.911798	0.074301
13	6	0	-2.927548	1.504255	-0.314716
14	6	0	-1.917722	-2.053153	0.472811
15	1	0	-0.025886	-2.791579	1.156657
16	1	0	1.700812	2.939361	1.057229
17	6	0	-4.060867	-1.078232	-0.319850
18	6	0	-4.254475	1.318143	-0.697347
19	1	0	-2.525594	2.511957	-0.323971
20	1	0	-2.391818	-3.031480	0.472688
21	6	0	-4.828882	0.018460	-0.700892
22	1	0	-4.492704	-2.075770	-0.317340
23	1	0	-4.856373	2.172240	-0.994155
24	1	0	-5.864724	-0.113548	-0.999471
25	47	0	2.797492	-0.203898	-0.721060

**Table S14.** Vibrational frequencies for (6-C<sub>1</sub>C<sub>2</sub>)

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	23.4366			42.2506			99.1102		
Red. masses	--	8.4605			8.1443			6.6645		
Frc consts	--	0.0027			0.0086			0.0386		
IR Inten	--	0.0885			0.3491			1.2685		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.20	0.09	0.08	-0.13	0.07	-0.02	0.03	-0.06
2	6	-0.03	0.17	0.16	0.11	-0.11	0.07	-0.07	0.04	0.10
3	6	-0.02	0.12	0.14	0.11	-0.07	0.06	-0.12	0.05	0.24
4	6	0.05	0.09	0.04	0.08	-0.06	0.08	-0.10	0.04	0.20
5	1	-0.07	0.10	0.20	0.13	-0.06	0.04	-0.15	0.06	0.35
6	6	0.11	0.11	-0.02	0.03	-0.07	0.14	-0.07	0.04	0.12
7	6	0.06	0.04	0.01	0.09	-0.03	0.01	-0.09	0.03	0.16
8	6	0.11	0.16	-0.01	0.03	-0.11	0.12	-0.02	0.03	-0.03
9	6	0.18	0.08	-0.10	-0.03	-0.05	0.20	-0.07	0.04	0.15
10	1	0.14	0.17	0.00	0.03	-0.12	0.09	0.02	0.02	-0.10
11	1	0.05	0.21	0.04	0.10	-0.15	0.05	0.03	0.01	-0.16
12	6	0.14	0.01	-0.08	0.04	-0.01	0.06	-0.05	0.01	0.07
13	6	0.01	0.01	0.06	0.17	-0.03	-0.13	-0.09	0.02	0.12
14	6	0.19	0.03	-0.13	-0.02	-0.02	0.17	-0.06	0.03	0.13
15	1	0.22	0.09	-0.14	-0.07	-0.05	0.26	-0.06	0.05	0.15
16	1	-0.09	0.19	0.23	0.14	-0.12	0.06	-0.08	0.04	0.11
17	6	0.15	-0.05	-0.11	0.07	0.02	-0.02	0.01	-0.02	-0.14
18	6	0.03	-0.04	0.03	0.19	0.00	-0.22	-0.02	-0.02	-0.09
19	1	-0.05	0.04	0.13	0.21	-0.05	-0.18	-0.12	0.04	0.21
20	1	0.25	0.00	-0.19	-0.06	0.00	0.22	-0.05	0.02	0.12
21	6	0.10	-0.07	-0.06	0.14	0.02	-0.16	0.04	-0.04	-0.25
22	1	0.21	-0.07	-0.18	0.03	0.03	0.02	0.05	-0.04	-0.23
23	1	-0.02	-0.05	0.07	0.24	0.00	-0.33	-0.01	-0.03	-0.15
24	1	0.11	-0.11	-0.09	0.15	0.04	-0.23	0.10	-0.08	-0.44
25	47	-0.13	-0.10	0.00	-0.13	0.08	-0.05	0.08	-0.03	-0.08
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	103.4043			211.9718			241.1790		
Red. masses	--	3.9177			5.1488			4.3298		
Frc consts	--	0.0247			0.1363			0.1484		
IR Inten	--	0.3962			1.1941			4.9438		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.02	0.06	-0.06	0.02	0.18	-0.01	0.02	-0.04
2	6	-0.08	0.03	0.22	-0.05	0.01	0.17	0.00	0.01	-0.12
3	6	-0.06	0.02	0.16	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.01	0.08
4	6	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.00	-0.08	-0.06	0.01	0.18
5	1	-0.11	0.03	0.29	0.02	0.00	-0.07	-0.06	0.00	0.06
6	6	0.02	0.00	-0.10	-0.04	0.02	0.11	-0.06	0.02	0.22
7	6	0.01	0.00	-0.06	0.05	-0.02	-0.20	-0.01	-0.01	0.06
8	6	0.03	0.00	-0.10	-0.05	0.02	0.16	-0.08	0.04	0.23
9	6	0.02	0.00	-0.10	-0.07	0.04	0.22	0.02	-0.03	-0.07
10	1	0.04	-0.02	-0.15	-0.06	0.03	0.18	-0.05	0.07	0.26
11	1	-0.03	0.00	0.06	-0.06	0.01	0.19	0.02	0.06	-0.10
12	6	-0.03	0.01	0.08	0.05	-0.02	-0.20	0.00	-0.02	-0.03
13	6	0.05	-0.03	-0.21	0.01	-0.01	-0.11	0.05	-0.02	-0.09
14	6	-0.02	0.01	0.05	-0.01	0.01	0.00	0.07	-0.05	-0.24
15	1	0.05	-0.01	-0.16	-0.14	0.07	0.45	0.06	-0.05	-0.20
16	1	-0.14	0.04	0.37	-0.08	0.02	0.25	0.05	0.00	-0.30
17	6	-0.07	0.02	0.19	0.03	-0.02	-0.12	-0.03	0.02	0.08
18	6	0.03	-0.02	-0.15	-0.06	0.01	0.15	0.06	0.01	-0.10

19	1	0.11	-0.05	-0.40	0.02	-0.01	-0.13	0.10	-0.04	-0.18
20	1	-0.04	0.02	0.12	-0.03	0.02	0.07	0.15	-0.09	-0.51
21	6	-0.04	0.01	0.09	-0.05	0.01	0.13	-0.02	0.04	0.10
22	1	-0.11	0.04	0.33	0.04	-0.02	-0.14	-0.07	0.04	0.12
23	1	0.07	-0.04	-0.28	-0.12	0.04	0.34	0.10	0.00	-0.21
24	1	-0.06	0.02	0.17	-0.11	0.03	0.32	-0.06	0.07	0.21
25	47	0.02	-0.01	-0.02	0.03	-0.01	-0.06	0.01	-0.01	-0.02
			7			8			9	
			A			A			A	
Frequencies	--	248.2825			276.3372			406.9164		
Red. masses	--	4.5909			4.2132			6.0373		
Frc consts	--	0.1667			0.1896			0.5890		
IR Inten	--	1.3646			6.4746			0.8629		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.09	-0.15	0.09	-0.12	0.06	0.30	0.22	0.12	0.05
2	6	0.19	-0.09	0.05	-0.05	0.02	0.06	0.10	0.03	0.06
3	6	0.17	0.07	0.01	0.03	-0.03	-0.21	0.10	-0.10	0.00
4	6	0.00	0.14	0.01	0.01	-0.03	-0.05	0.05	-0.09	0.03
5	1	0.27	0.13	-0.02	0.10	-0.07	-0.46	0.10	-0.12	-0.08
6	6	-0.04	0.09	0.01	0.02	-0.01	-0.02	0.16	-0.02	0.10
7	6	-0.04	0.13	0.00	-0.03	-0.01	0.09	-0.05	-0.09	0.01
8	6	-0.05	-0.07	0.06	-0.03	0.03	0.14	0.27	0.07	-0.01
9	6	0.00	0.09	-0.05	0.04	-0.02	-0.10	0.00	0.04	0.07
10	1	-0.16	-0.15	0.01	-0.05	0.05	0.19	0.34	0.09	-0.03
11	1	0.08	-0.24	0.12	-0.19	0.09	0.43	0.26	0.18	-0.03
12	6	0.01	0.09	0.02	-0.04	0.00	0.12	-0.16	-0.05	-0.08
13	6	-0.17	0.03	-0.05	-0.01	0.01	0.13	-0.09	-0.09	0.02
14	6	0.02	0.09	-0.05	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.08
15	1	0.02	0.09	-0.10	0.06	-0.04	-0.19	-0.12	-0.03	0.10
16	1	0.29	-0.13	0.05	-0.08	0.03	0.05	-0.03	0.09	0.04
17	6	0.03	-0.06	0.06	-0.04	0.02	0.09	-0.25	0.03	-0.04
18	6	-0.16	-0.13	-0.07	0.04	0.01	-0.05	-0.10	0.00	-0.08
19	1	-0.26	0.08	-0.08	-0.03	0.02	0.24	-0.09	-0.09	0.09
20	1	0.02	0.09	-0.11	0.02	-0.02	-0.04	0.10	-0.03	-0.11
21	6	-0.08	-0.17	0.00	0.04	0.01	-0.11	-0.24	0.06	-0.07
22	1	0.15	-0.11	0.12	-0.07	0.04	0.12	-0.31	0.06	0.01
23	1	-0.22	-0.20	-0.13	0.08	0.01	-0.12	0.01	0.07	-0.12
24	1	-0.07	-0.27	0.00	0.08	0.01	-0.26	-0.25	0.13	-0.05
25	47	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01	-0.05	0.00	0.00	0.01
			10			11			12	
			A			A			A	
Frequencies	--	414.0476			444.9040			447.5767		
Red. masses	--	3.3180			3.2532			4.7859		
Frc consts	--	0.3351			0.3794			0.5649		
IR Inten	--	0.8077			9.2696			1.8419		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	0.03	0.05	-0.04	0.01	0.09	0.03	-0.05	0.00
2	6	0.06	0.00	-0.10	0.00	0.01	0.03	0.12	0.04	0.04
3	6	-0.01	-0.01	0.10	0.04	0.00	-0.14	0.09	0.17	0.02
4	6	0.01	-0.01	0.03	-0.05	0.03	0.15	-0.02	0.16	-0.05
5	1	-0.05	0.00	0.23	0.13	-0.01	-0.40	0.19	0.25	0.07
6	6	0.06	-0.01	-0.07	-0.04	0.02	0.06	-0.09	0.17	-0.06
7	6	-0.01	-0.02	-0.01	-0.05	0.01	0.17	0.00	-0.17	0.00
8	6	0.00	0.03	0.17	0.05	-0.02	-0.19	-0.12	0.05	-0.02
9	6	0.05	-0.02	-0.18	-0.01	0.01	0.01	-0.04	0.14	-0.03
10	1	-0.05	0.07	0.30	0.11	-0.08	-0.37	-0.23	-0.02	-0.04
11	1	0.01	0.07	0.09	-0.06	-0.03	0.12	0.03	-0.17	0.03
12	6	-0.07	0.00	0.10	-0.02	-0.01	0.07	-0.09	-0.20	-0.01
13	6	0.02	-0.04	-0.13	0.05	-0.03	-0.13	0.10	-0.16	0.07
14	6	-0.06	0.03	0.16	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.15	0.01
15	1	0.08	-0.06	-0.34	0.04	0.01	-0.09	0.10	0.25	0.02
16	1	0.08	0.00	-0.23	0.01	0.00	0.01	0.21	0.00	0.09
17	6	-0.01	-0.01	-0.15	0.05	-0.03	-0.16	-0.13	-0.06	-0.01

18	6	-0.06	0.02	0.12	0.01	0.00	0.02	0.12	0.00	0.03
19	1	0.09	-0.07	-0.33	0.15	-0.07	-0.39	0.21	-0.20	0.15
20	1	-0.08	0.04	0.32	0.05	-0.04	-0.12	0.14	-0.23	0.09
21	6	-0.05	0.01	-0.02	-0.02	0.02	0.11	0.00	0.05	-0.02
22	1	0.04	-0.04	-0.36	0.12	-0.06	-0.42	-0.26	0.00	-0.02
23	1	-0.08	0.05	0.25	0.03	0.00	-0.04	0.21	0.07	0.06
24	1	-0.03	0.02	-0.08	-0.05	0.04	0.20	-0.01	0.18	-0.05
25	47	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

13				14			15		
A				A			A		
Frequencies	--	505.2997		520.7981		555.1980			
Red. masses	--	5.5080		3.2160		7.1413			
Frc consts	--	0.8286		0.5139		1.2970			
IR Inten	--	1.0910		6.5305		0.3926			

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	-0.12	0.03	0.05	-0.02	-0.14	-0.02	-0.09	0.01
2	6	-0.09	-0.21	-0.02	-0.05	0.01	0.14	-0.17	-0.19	-0.05
3	6	-0.11	-0.07	-0.02	0.02	0.00	-0.08	-0.16	-0.03	-0.04
4	6	-0.14	0.00	-0.04	0.02	-0.01	-0.08	-0.01	-0.01	0.00
5	1	0.00	0.01	0.02	0.04	-0.01	-0.15	-0.11	0.00	-0.01
6	6	0.04	0.13	-0.01	-0.05	0.02	0.17	0.11	0.13	0.03
7	6	-0.14	-0.04	-0.03	0.02	-0.01	-0.07	0.04	-0.02	0.01
8	6	0.02	-0.06	0.02	-0.01	0.00	0.02	0.13	-0.12	0.05
9	6	0.26	0.11	0.07	0.01	0.00	-0.01	-0.04	0.32	-0.05
10	1	-0.11	-0.16	-0.03	0.05	-0.01	-0.07	0.05	-0.17	0.03
11	1	0.01	-0.02	0.03	0.12	-0.04	-0.27	-0.02	0.13	-0.05
12	6	0.04	-0.11	0.01	-0.05	0.02	0.19	-0.13	0.10	-0.04
13	6	-0.10	0.04	-0.03	0.02	-0.01	-0.10	0.17	-0.01	0.05
14	6	0.27	-0.03	0.09	0.03	-0.02	-0.05	-0.02	0.32	-0.06
15	1	0.38	0.21	0.11	0.09	-0.04	-0.25	-0.16	0.23	-0.09
16	1	-0.09	-0.21	-0.04	-0.11	0.02	0.32	-0.15	-0.20	-0.05
17	6	0.00	0.06	-0.01	-0.02	0.01	0.06	-0.11	-0.14	0.00
18	6	-0.11	0.18	-0.07	-0.06	0.03	0.15	0.21	-0.16	0.10
19	1	0.01	-0.01	0.01	0.06	-0.03	-0.20	0.10	0.01	0.02
20	1	0.41	-0.10	0.16	0.12	-0.06	-0.34	0.11	0.26	-0.04
21	6	0.01	0.12	0.00	0.04	-0.01	-0.13	0.02	-0.10	0.00
22	1	-0.14	0.12	-0.06	0.00	0.00	-0.04	-0.01	-0.18	0.04
23	1	-0.11	0.17	-0.08	-0.12	0.05	0.34	0.21	-0.15	0.12
24	1	0.01	0.05	0.02	0.12	-0.05	-0.40	0.01	0.13	-0.05
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

16				17			18		
A				A			A		
Frequencies	--	560.3800		607.7605		629.0114			
Red. masses	--	2.9891		3.2097		6.9412			
Frc consts	--	0.5530		0.6985		1.6181			
IR Inten	--	0.7648		1.1624		5.5607			

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.01	0.07	-0.07	0.02	0.17	0.22	0.10	0.06
2	6	0.01	0.00	-0.03	0.07	-0.01	-0.16	0.09	-0.03	0.04
3	6	0.00	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.11	0.08	-0.27	0.05
4	6	-0.07	0.03	0.21	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.10	-0.04
5	1	0.10	-0.02	-0.33	-0.08	0.02	0.30	0.16	-0.22	0.03
6	6	-0.04	0.02	0.13	0.01	-0.01	-0.07	-0.11	0.04	-0.03
7	6	0.06	-0.03	-0.20	0.00	0.00	-0.01	-0.19	0.06	-0.07
8	6	0.03	-0.01	-0.09	0.04	-0.01	-0.13	-0.08	0.23	-0.05
9	6	0.03	-0.02	-0.10	-0.04	0.02	0.14	-0.03	0.00	-0.02
10	1	0.13	-0.07	-0.32	0.00	-0.01	-0.08	-0.16	0.17	-0.06
11	1	0.00	-0.01	0.00	-0.14	0.03	0.32	0.23	-0.04	0.06
12	6	0.04	-0.02	-0.11	-0.02	0.01	0.06	-0.10	-0.05	-0.03
13	6	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.01	-0.09	0.05	0.26	-0.02
14	6	-0.03	0.01	0.10	0.04	-0.02	-0.13	-0.03	0.01	0.00
15	1	0.09	-0.04	-0.27	-0.08	0.04	0.30	-0.02	0.00	-0.03
16	1	0.09	-0.01	-0.25	0.11	-0.02	-0.30	-0.17	0.09	-0.09

17	6	-0.02	0.01	0.07	-0.03	0.01	0.11	-0.04	-0.24	0.02
18	6	-0.01	0.01	0.03	-0.04	0.02	0.12	0.10	0.04	0.02
19	1	-0.10	0.04	0.32	0.08	-0.03	-0.24	0.11	0.24	0.02
20	1	-0.08	0.03	0.27	0.09	-0.05	-0.29	-0.03	0.01	0.00
21	6	0.02	-0.01	-0.08	0.04	-0.01	-0.12	0.23	-0.06	0.08
22	1	-0.11	0.05	0.35	-0.03	0.01	0.10	-0.12	-0.20	-0.01
23	1	-0.09	0.04	0.29	-0.07	0.03	0.23	-0.13	-0.14	-0.02
24	1	0.00	0.00	-0.01	0.11	-0.05	-0.35	0.21	0.09	0.07
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		19		20		21
		A		A		A
Frequencies	--	715.3021		725.9726		744.1545
Red. masses	--	5.6156		5.7911		3.1674
Frc consts	--	1.6929		1.7983		1.0334
IR Inten	--	1.7511		3.0022		1.9954

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	-0.03	0.00	-0.18	-0.05	-0.08	-0.05	0.01	0.09
2	6	-0.01	0.06	-0.02	0.07	0.12	0.02	0.04	0.00	-0.10
3	6	-0.04	0.27	-0.04	0.10	-0.03	0.02	-0.02	-0.01	0.08
4	6	0.05	0.10	-0.01	0.05	-0.05	0.04	0.05	-0.02	-0.17
5	1	-0.02	0.30	0.01	0.00	-0.10	-0.01	-0.09	0.01	0.31
6	6	0.11	-0.07	0.04	-0.04	-0.09	-0.01	-0.06	0.02	0.18
7	6	-0.08	0.08	-0.04	0.02	0.07	0.01	0.05	-0.02	-0.15
8	6	0.20	-0.19	0.07	-0.20	0.02	-0.05	0.02	-0.01	-0.09
9	6	0.00	-0.10	0.02	0.25	-0.12	0.09	0.00	0.01	0.02
10	1	0.30	-0.11	0.11	-0.14	0.07	-0.03	0.06	-0.02	-0.17
11	1	-0.06	0.15	-0.04	-0.20	-0.29	0.00	-0.06	0.00	0.12
12	6	-0.10	-0.11	-0.01	-0.07	0.05	-0.04	-0.04	0.02	0.15
13	6	-0.02	0.27	-0.03	0.08	0.10	0.01	-0.03	0.01	0.10
14	6	-0.03	-0.13	0.01	0.22	0.16	0.04	-0.01	0.01	0.05
15	1	-0.02	-0.13	0.01	0.23	-0.13	0.11	0.17	-0.07	-0.49
16	1	0.19	-0.04	0.08	0.15	0.08	0.09	0.02	0.00	-0.04
17	6	-0.13	-0.22	-0.01	-0.22	-0.09	-0.05	0.02	-0.01	-0.09
18	6	0.00	0.07	-0.01	0.09	-0.08	0.04	0.03	-0.01	-0.10
19	1	-0.02	0.28	-0.05	-0.02	0.14	-0.04	-0.08	0.03	0.27
20	1	0.00	-0.15	0.01	0.23	0.16	0.07	0.12	-0.05	-0.36
21	6	0.11	-0.02	0.04	-0.17	-0.01	-0.06	-0.03	0.01	0.09
22	1	-0.26	-0.17	-0.07	-0.19	-0.11	-0.03	0.08	-0.03	-0.27
23	1	-0.21	-0.09	-0.07	0.12	-0.05	0.06	0.06	-0.02	-0.16
24	1	0.10	0.13	0.01	-0.20	0.25	-0.10	-0.06	0.03	0.17
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		22		23		24
		A		A		A
Frequencies	--	796.3067		814.0214		842.7926
Red. masses	--	1.2562		1.5857		5.4060
Frc consts	--	0.4693		0.6191		2.2624
IR Inten	--	79.7994		31.1694		0.4144

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.21	0.02	0.09
2	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.07	-0.09	-0.20	-0.03
3	6	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.06	-0.12	0.10	-0.04
4	6	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.02	-0.06	0.11	-0.07
5	1	0.01	0.00	-0.05	-0.13	0.03	0.45	0.05	0.23	0.07
6	6	-0.02	0.01	0.05	-0.03	0.01	0.10	-0.06	0.04	0.00
7	6	0.01	-0.01	-0.04	-0.03	0.01	0.08	0.04	0.12	0.03
8	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.03	0.01	0.11	0.00
9	6	0.01	-0.01	-0.04	0.01	0.00	-0.03	0.05	-0.20	0.03
10	1	0.06	-0.04	-0.16	-0.01	0.04	0.07	-0.03	-0.05	-0.26
11	1	0.06	-0.01	-0.10	-0.20	0.04	0.37	0.21	0.20	0.06
12	6	0.01	0.00	-0.04	0.04	-0.02	-0.12	0.05	0.06	0.00
13	6	-0.02	0.01	0.07	-0.01	0.00	0.01	0.10	0.10	0.01
14	6	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.04	-0.01	-0.17	0.02
15	1	-0.04	0.02	0.14	0.06	-0.03	-0.21	0.17	-0.11	0.11

16	1	0.04	-0.01	-0.12	-0.18	0.04	0.54	-0.16	-0.17	-0.08
17	6	-0.02	0.01	0.05	0.00	0.00	0.01	-0.04	0.09	-0.03
18	6	-0.01	0.00	0.05	-0.02	0.01	0.04	0.13	-0.18	0.06
19	1	0.12	-0.05	-0.38	0.09	-0.04	-0.28	-0.09	0.18	-0.07
20	1	-0.08	0.04	0.25	-0.02	0.01	0.07	-0.18	-0.10	0.00
21	6	-0.02	0.01	0.05	0.02	0.00	-0.03	-0.21	-0.03	-0.08
22	1	0.10	-0.04	-0.33	-0.07	0.03	0.24	0.07	0.04	0.12
23	1	0.16	-0.07	-0.51	0.02	-0.01	-0.07	0.19	-0.10	0.14
24	1	0.14	-0.06	-0.47	0.01	-0.01	-0.01	-0.26	0.15	0.00
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		25		26		27				
		A		A		A				
Frequencies	--	852.9274		871.0589		885.9133				
Red. masses	--	1.8718		1.3660		4.1665				
Frc consts	--	0.8023		0.6107		1.9266				
IR Inten	--	9.9656		63.0924		2.1915				

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.01	0.11	0.00	0.04
2	6	0.00	-0.02	-0.02	0.02	0.00	-0.04	0.02	-0.03	0.01
3	6	0.01	0.00	-0.05	0.01	0.00	-0.02	-0.06	0.17	-0.03
4	6	-0.05	0.02	0.16	0.00	0.00	-0.02	-0.12	0.06	-0.04
5	1	-0.01	0.03	0.06	-0.05	0.02	0.19	0.11	0.30	-0.01
6	6	0.03	-0.01	-0.08	-0.02	0.00	0.07	-0.02	-0.08	-0.02
7	6	0.05	-0.01	-0.14	-0.01	-0.01	0.01	-0.11	-0.10	-0.03
8	6	0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.03	0.00
9	6	-0.01	-0.01	0.04	0.03	-0.02	-0.09	0.05	-0.22	0.07
10	1	-0.14	0.11	0.36	0.11	-0.06	-0.26	-0.01	-0.01	-0.06
11	1	-0.23	0.05	0.47	-0.03	0.01	0.07	0.10	0.00	0.07
12	6	-0.02	0.01	0.06	-0.03	0.01	0.06	-0.04	0.06	-0.03
13	6	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.04	-0.04	-0.19	0.02
14	6	0.00	-0.02	-0.02	0.02	0.01	-0.07	0.03	0.26	-0.01
15	1	0.01	-0.01	-0.01	-0.19	0.06	0.57	-0.15	-0.43	-0.11
16	1	-0.15	0.01	0.41	-0.07	0.02	0.24	0.11	-0.06	0.00
17	6	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.04	0.01
18	6	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.04	0.01	0.05	0.00
19	1	-0.07	0.04	0.20	-0.07	0.01	0.29	0.18	-0.29	0.04
20	1	0.02	-0.03	-0.10	-0.14	0.09	0.43	-0.16	0.36	-0.23
21	6	-0.03	0.01	0.05	0.01	0.00	0.01	0.12	0.03	0.03
22	1	0.12	-0.05	-0.37	0.05	-0.03	-0.18	-0.03	-0.02	0.03
23	1	0.05	-0.02	-0.11	-0.08	0.04	0.24	0.09	0.09	-0.03
24	1	0.06	-0.03	-0.25	-0.01	0.00	0.07	0.12	0.01	0.03
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		28		29		30				
		A		A		A				
Frequencies	--	926.9774		934.7112		971.9353				
Red. masses	--	1.7160		1.4364		1.3681				
Frc consts	--	0.8688		0.7394		0.7615				
IR Inten	--	2.9249		35.6112		17.6013				

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.01	-0.05	0.07	-0.02	-0.07
2	6	-0.01	-0.01	0.03	-0.01	-0.01	0.04	-0.03	0.02	0.00
3	6	-0.02	0.01	0.05	-0.01	0.01	0.05	-0.03	0.02	0.06
4	6	0.01	0.00	-0.09	0.00	0.00	-0.02	0.05	-0.02	-0.03
5	1	0.08	0.00	-0.18	0.09	-0.01	-0.26	0.03	-0.05	-0.32
6	6	-0.03	0.01	0.07	-0.02	0.01	0.06	0.02	-0.01	-0.01
7	6	-0.04	0.01	0.10	0.01	0.00	-0.03	0.03	0.00	0.03
8	6	0.04	-0.01	-0.08	0.03	-0.01	-0.07	-0.05	0.02	0.06
9	6	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.05	-0.01	0.02	0.00
10	1	-0.16	0.15	0.48	-0.15	0.16	0.47	0.15	-0.15	-0.51
11	1	-0.08	-0.01	0.14	-0.17	-0.01	0.33	-0.30	0.00	0.65
12	6	0.03	-0.01	-0.09	-0.02	0.01	0.07	0.00	-0.01	-0.02
13	6	0.03	-0.02	-0.09	-0.02	0.01	0.06	0.00	0.00	-0.02
14	6	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.04	-0.01	0.01	0.02

15	1	0.06	-0.03	-0.16	-0.08	0.04	0.28	-0.01	0.00	-0.04
16	1	0.08	-0.03	-0.22	0.07	-0.02	-0.21	-0.01	0.02	-0.15
17	6	-0.02	0.02	0.08	0.02	-0.01	-0.06	-0.01	-0.02	0.00
18	6	0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.03	0.00
19	1	-0.12	0.05	0.39	0.10	-0.04	-0.30	-0.03	0.02	0.03
20	1	-0.06	0.03	0.15	-0.07	0.03	0.19	0.06	-0.02	-0.10
21	6	-0.01	0.00	0.03	0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.01
22	1	0.12	-0.05	-0.39	-0.09	0.04	0.29	-0.02	-0.02	0.00
23	1	-0.05	0.03	0.21	0.04	-0.01	-0.10	-0.03	0.02	-0.03
24	1	0.08	-0.03	-0.28	-0.08	0.04	0.27	0.02	-0.02	-0.04
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

31

32

33

		A			A			A		
Frequencies	--	1009.0423			1012.6909			1028.9736		
Red. masses	--	5.3745			1.3842			1.4416		
Frc consts	--	3.2241			0.8364			0.8993		
IR Inten	--	7.3217			1.5474			5.2031		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.09	-0.02	0.00	0.03	-0.01	0.00	0.06	-0.02	0.00
2	6	0.08	0.31	-0.01	-0.01	0.02	0.03	-0.05	0.04	0.09
3	6	-0.03	-0.03	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.00	-0.12
4	6	-0.22	-0.04	-0.07	0.00	-0.01	0.01	0.02	-0.01	0.03
5	1	-0.16	-0.13	-0.13	-0.08	-0.01	0.12	-0.28	0.02	0.61
6	6	-0.04	0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.02
7	6	-0.21	-0.02	-0.06	0.01	0.00	-0.02	0.03	0.00	0.00
8	6	0.08	-0.26	0.08	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.02
9	6	0.02	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.04	0.01	0.00	-0.03
10	1	-0.01	-0.41	-0.07	-0.02	-0.05	-0.06	-0.12	-0.06	0.02
11	1	0.00	-0.10	0.22	-0.01	-0.03	0.08	0.00	-0.09	0.15
12	6	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
13	6	0.01	0.03	-0.01	-0.03	0.01	0.09	0.01	0.00	-0.02
14	6	0.03	-0.01	0.02	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.01	0.02
15	1	0.05	0.07	0.05	0.07	-0.03	-0.23	-0.04	0.03	0.12
16	1	-0.05	0.40	-0.02	0.03	0.03	-0.17	0.10	0.03	-0.60
17	6	0.09	0.19	-0.01	-0.03	0.01	0.09	0.00	-0.03	-0.02
18	6	0.12	-0.18	0.07	0.02	-0.01	-0.08	-0.01	0.03	-0.01
19	1	-0.08	0.05	0.03	0.13	-0.05	-0.45	-0.04	0.02	0.12
20	1	0.08	-0.03	-0.04	-0.05	0.03	0.19	0.04	-0.01	-0.09
21	6	-0.03	0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.06	-0.01	0.00	0.03
22	1	0.08	0.21	0.06	0.14	-0.06	-0.46	-0.04	-0.01	0.13
23	1	0.15	-0.20	0.00	-0.14	0.06	0.45	0.00	0.03	-0.03
24	1	-0.01	0.06	-0.06	-0.10	0.04	0.33	0.04	-0.04	-0.16
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

34

35

36

		A			A			A		
Frequencies	--	1039.8237			1049.7855			1055.4732		
Red. masses	--	1.4477			2.0947			1.3959		
Frc consts	--	0.9223			1.3601			0.9162		
IR Inten	--	3.1263			5.3046			0.2155		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.01	0.02	0.14	-0.02	0.09	-0.01	0.00	0.00
2	6	-0.01	0.03	-0.01	-0.01	0.09	-0.08	0.00	-0.01	0.00
3	6	-0.02	0.01	-0.01	-0.10	0.03	0.02	0.00	0.00	0.01
4	6	0.02	-0.01	0.00	0.06	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
5	1	-0.09	-0.03	0.01	-0.21	-0.13	-0.33	0.03	0.00	-0.06
6	6	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
7	6	0.02	0.00	0.01	0.08	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.02	-0.02	0.00	-0.04	-0.07	-0.05	0.00	0.00	0.01
9	6	-0.03	0.02	0.09	0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.03
10	1	-0.09	-0.08	-0.04	-0.43	-0.20	0.17	0.03	0.00	-0.02
11	1	0.06	-0.05	-0.01	0.30	-0.18	-0.16	-0.01	0.01	0.00
12	6	-0.01	0.01	0.04	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.02
13	6	0.01	-0.01	-0.04	0.01	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.04



14	6	0.04	-0.01	-0.12	0.00	0.02	0.03	0.01	-0.01	-0.05
15	1	0.15	-0.07	-0.49	-0.02	0.05	0.16	0.05	-0.03	-0.16
16	1	-0.06	0.05	-0.02	-0.30	0.21	0.25	0.00	-0.01	0.04
17	6	0.00	-0.02	-0.03	-0.02	-0.08	0.01	0.02	0.00	-0.08
18	6	-0.03	0.03	0.05	-0.03	0.09	-0.04	0.03	-0.02	-0.09
19	1	-0.07	0.03	0.21	0.05	-0.01	-0.08	0.06	-0.03	-0.22
20	1	-0.18	0.10	0.65	0.06	-0.01	-0.16	-0.07	0.03	0.23
21	6	0.00	0.00	-0.02	-0.04	-0.02	0.00	-0.03	0.02	0.11
22	1	-0.03	-0.01	0.11	0.05	-0.13	0.03	-0.13	0.06	0.39
23	1	0.10	-0.01	-0.32	-0.01	0.17	0.10	-0.15	0.05	0.48
24	1	-0.04	0.01	0.12	-0.02	-0.06	-0.07	0.18	-0.07	-0.59
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		37			38			39		
		A			A			A		
Frequencies	--	1064.9443			1111.7186			1168.8343		
Red. masses	--	2.2066			2.5083			1.5036		
Frc consts	--	1.4745			1.8265			1.2103		
IR Inten	--	1.3149			8.9514			14.4286		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	0.02	-0.03	-0.02	0.08	-0.04	0.02	0.07	0.00
2	6	0.01	0.01	0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.00
3	6	0.03	-0.01	0.01	0.09	-0.12	0.04	0.05	0.00	0.02
4	6	-0.08	0.00	-0.03	-0.01	0.12	-0.01	0.04	0.02	0.01
5	1	0.19	0.10	0.06	0.16	-0.08	0.06	0.21	0.10	0.04
6	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.08	0.06	-0.03	-0.04	-0.02	0.00
7	6	-0.05	-0.05	-0.01	0.03	0.10	0.00	0.02	-0.05	0.01
8	6	0.04	-0.02	0.03	0.04	-0.13	0.04	-0.04	-0.06	-0.02
9	6	-0.02	0.00	0.00	0.02	-0.05	0.02	-0.01	-0.01	0.00
10	1	0.15	0.01	-0.03	-0.06	-0.23	-0.02	-0.30	-0.22	-0.03
11	1	-0.08	0.10	0.04	-0.11	0.58	0.01	-0.02	0.52	-0.04
12	6	0.04	0.00	0.01	0.03	0.07	0.00	-0.03	-0.06	0.00
13	6	0.11	0.06	0.02	-0.05	-0.12	0.00	0.05	0.06	0.01
14	6	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.03	0.06	0.00
15	1	-0.03	-0.01	-0.04	0.24	0.10	0.06	-0.18	-0.13	-0.03
16	1	0.05	0.00	-0.03	-0.27	0.11	-0.14	-0.15	0.03	-0.06
17	6	0.06	-0.06	0.02	-0.05	-0.11	0.00	0.00	0.07	-0.01
18	6	0.00	0.15	-0.02	0.00	0.03	0.00	-0.03	-0.02	-0.01
19	1	0.48	-0.08	0.16	-0.04	-0.13	0.00	0.18	0.02	0.05
20	1	-0.05	0.03	0.00	-0.21	0.06	-0.08	0.19	-0.01	0.06
21	6	-0.18	-0.10	-0.04	0.03	0.04	0.00	0.00	-0.03	0.01
22	1	0.42	-0.22	0.17	-0.01	-0.14	0.01	-0.23	0.18	-0.09
23	1	0.18	0.31	0.01	0.17	0.15	0.03	-0.28	-0.21	-0.06
24	1	-0.17	-0.34	-0.01	0.00	0.32	-0.04	0.03	-0.34	0.05
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		40			41			42		
		A			A			A		
Frequencies	--	1197.9990			1212.3894			1220.5378		
Red. masses	--	1.3580			1.1682			1.1355		
Frc consts	--	1.1483			1.0117			0.9966		
IR Inten	--	2.3966			2.1788			4.9091		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.04	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00
2	6	0.01	-0.02	0.01	0.05	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00
3	6	0.00	0.02	0.00	-0.04	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.06	0.01	-0.03	0.00	-0.01
5	1	-0.01	0.02	0.00	-0.31	-0.18	-0.08	-0.06	-0.04	-0.01
6	6	-0.02	-0.07	0.01	0.00	0.03	0.00	-0.03	-0.03	-0.01
7	6	-0.01	0.03	-0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.02	0.04	0.00
8	6	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01
9	6	-0.07	0.03	-0.03	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00
10	1	-0.06	-0.02	0.00	-0.26	-0.16	-0.06	0.09	0.05	0.01
11	1	0.00	0.23	-0.02	-0.04	0.46	-0.02	0.00	0.07	0.00
12	6	0.04	-0.04	0.02	-0.03	0.03	-0.01	0.01	-0.03	0.01

13	6	-0.04	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.01	-0.01
14	6	0.06	0.02	0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.00
15	1	-0.43	-0.22	-0.09	0.18	0.11	0.04	-0.01	0.01	0.00
16	1	0.11	-0.07	0.03	0.59	-0.26	0.18	0.07	-0.04	0.02
17	6	0.04	-0.04	0.02	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01
18	6	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.04	0.02	0.01
19	1	-0.22	0.06	-0.08	-0.03	0.02	-0.01	-0.32	0.11	-0.11
20	1	0.49	-0.18	0.17	-0.14	0.04	-0.05	0.03	0.01	0.01
21	6	-0.03	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	0.01
22	1	0.24	-0.13	0.09	0.10	-0.04	0.04	-0.36	0.15	-0.13
23	1	0.20	0.13	0.04	0.00	0.01	0.00	0.48	0.36	0.10
24	1	-0.06	0.37	-0.07	0.01	-0.02	0.00	0.05	-0.54	0.09
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies	--	1253.4773			1264.5494			1290.8472		
Red. masses	--	2.1904			1.8128			1.4713		
Frc consts	--	2.0277			1.7079			1.4444		
IR Inten	--	4.8498			4.1466			18.2213		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	-0.01	-0.02	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.01
3	6	0.00	-0.06	0.01	0.01	-0.03	0.01	0.05	0.06	0.01
4	6	0.06	0.08	0.01	-0.03	0.02	-0.01	0.03	-0.10	0.02
5	1	-0.10	-0.14	-0.01	-0.04	-0.07	-0.01	0.43	0.33	0.10
6	6	0.17	0.14	0.04	0.06	0.09	0.01	0.06	-0.04	0.03
7	6	-0.08	0.05	-0.03	0.02	-0.08	0.02	-0.03	-0.07	0.00
8	6	-0.01	0.03	-0.01	0.02	0.02	0.00	-0.03	0.01	-0.02
9	6	0.01	-0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	0.00
10	1	-0.44	-0.24	-0.08	-0.22	-0.14	-0.05	-0.29	-0.15	-0.05
11	1	-0.04	-0.23	0.00	-0.04	-0.03	-0.01	-0.01	0.07	-0.02
12	6	-0.11	0.04	-0.04	0.15	-0.11	0.06	-0.04	0.00	-0.01
13	6	0.01	-0.03	0.01	-0.02	0.06	-0.01	-0.06	0.03	-0.02
14	6	-0.01	-0.06	0.01	0.00	0.04	-0.01	-0.03	0.00	-0.01
15	1	-0.37	-0.38	-0.06	-0.35	-0.26	-0.07	0.25	0.19	0.05
16	1	-0.13	0.06	-0.05	0.05	-0.01	0.02	-0.25	0.10	-0.08
17	6	0.03	0.01	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.02	0.02	0.00
18	6	0.01	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.03	0.00	0.01
19	1	0.00	-0.02	0.00	-0.18	0.13	-0.07	-0.33	0.14	-0.12
20	1	0.11	-0.14	0.06	-0.54	0.31	-0.20	-0.18	0.07	-0.06
21	6	0.02	0.01	0.01	-0.05	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00
22	1	0.15	-0.03	0.05	-0.26	0.07	-0.09	0.28	-0.09	0.10
23	1	0.24	0.17	0.05	-0.02	-0.02	0.00	0.23	0.15	0.05
24	1	0.05	-0.30	0.06	-0.08	0.28	-0.06	0.01	0.06	0.00
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		46			47			48		
		A			A			A		
Frequencies	--	1322.1094			1347.7350			1401.2761		
Red. masses	--	1.7462			2.6557			4.5289		
Frc consts	--	1.7984			2.8421			5.2395		
IR Inten	--	2.1450			4.3587			165.2471		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.02	0.00	-0.03	-0.04	-0.01	0.00	0.27	-0.03
2	6	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.07	-0.01	0.14	-0.07	0.05
3	6	-0.03	0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.17	-0.12	-0.04
4	6	-0.05	-0.10	-0.01	-0.19	-0.08	-0.05	-0.10	0.20	-0.05
5	1	0.33	0.28	0.07	0.30	0.19	0.07	0.18	0.13	0.05
6	6	0.08	-0.05	0.03	-0.04	0.09	-0.02	0.17	-0.17	0.07
7	6	-0.01	0.12	-0.02	0.21	-0.04	0.07	0.08	-0.01	0.03
8	6	-0.01	0.02	-0.01	0.09	0.03	0.03	-0.14	-0.13	-0.02
9	6	-0.01	0.06	-0.01	0.04	-0.04	0.02	0.03	0.06	0.00
10	1	-0.33	-0.20	-0.07	-0.11	-0.12	-0.03	-0.06	-0.09	-0.02
11	1	0.00	-0.07	0.01	-0.03	-0.06	0.00	0.03	-0.43	0.08

12	6	0.09	0.08	0.02	-0.02	0.08	-0.02	-0.01	-0.04	0.00
13	6	-0.02	-0.04	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.05	-0.02	0.02
14	6	0.00	-0.06	0.01	-0.03	-0.03	-0.01	-0.04	0.00	-0.01
15	1	-0.07	0.02	-0.02	-0.21	-0.23	-0.03	0.19	0.18	0.04
16	1	0.18	-0.06	0.07	0.24	-0.05	0.09	0.22	-0.10	0.06
17	6	-0.03	-0.03	0.00	-0.08	0.01	-0.03	-0.02	0.00	-0.01
18	6	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.07	-0.01	0.01	0.03	0.00
19	1	0.44	-0.24	0.17	-0.38	0.14	-0.14	-0.31	0.13	-0.11
20	1	0.02	-0.07	0.02	0.29	-0.19	0.11	-0.14	0.05	-0.05
21	6	0.00	-0.03	0.00	0.04	-0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.01
22	1	-0.44	0.14	-0.15	0.21	-0.11	0.08	0.17	-0.09	0.06
23	1	0.07	0.04	0.02	-0.30	-0.16	-0.07	-0.23	-0.14	-0.05
24	1	-0.01	0.07	-0.01	0.05	-0.14	0.03	0.01	-0.17	0.03
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

49

50

51

Frequencies -- 1413.7158

1445.3091

1468.7991

Red. masses -- 5.4051

1.8436

2.5834

Frc consts -- 6.3647

2.2691

3.2837

IR Inten -- 7.8767

13.4679

24.8036

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.10	0.02	0.02	0.04	0.00
2	6	-0.08	0.05	-0.03	0.07	0.01	0.02	0.07	0.01	0.02
3	6	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.04	-0.01	-0.10	-0.02	-0.03
4	6	-0.02	-0.08	0.00	-0.06	-0.06	-0.01	0.04	-0.07	0.02
5	1	0.32	0.21	0.08	-0.06	0.02	-0.02	0.28	0.24	0.07
6	6	-0.07	0.02	-0.02	0.06	-0.02	0.02	0.02	0.16	-0.02
7	6	0.05	0.23	-0.01	0.01	0.08	-0.01	0.00	-0.10	0.01
8	6	0.09	0.03	0.03	-0.10	-0.01	-0.04	-0.09	-0.10	-0.02
9	6	0.01	-0.02	0.01	0.05	0.09	0.00	-0.06	-0.06	-0.01
10	1	-0.14	-0.15	-0.04	0.24	0.25	0.06	0.40	0.25	0.10
11	1	0.01	-0.25	0.03	-0.01	0.50	-0.07	0.02	0.09	0.00
12	6	-0.16	-0.25	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	-0.03	0.13	-0.03
13	6	0.21	-0.06	0.07	0.04	-0.05	0.02	0.07	0.04	0.02
14	6	0.00	0.08	-0.01	0.03	-0.08	0.02	0.06	-0.03	0.02
15	1	0.13	0.07	0.02	-0.31	-0.18	-0.07	-0.02	-0.04	0.00
16	1	0.30	-0.14	0.12	-0.26	0.19	-0.10	0.02	0.04	0.00
17	6	0.20	-0.10	0.08	-0.02	-0.02	0.00	0.09	-0.05	0.03
18	6	-0.19	-0.11	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.02	-0.03
19	1	-0.19	0.12	-0.08	-0.08	-0.01	-0.02	-0.20	0.16	-0.08
20	1	-0.25	0.20	-0.10	-0.36	0.11	-0.12	0.06	-0.03	0.02
21	6	-0.05	0.22	-0.04	0.00	0.07	-0.01	-0.01	-0.03	0.00
22	1	-0.04	-0.01	-0.01	0.12	-0.09	0.05	-0.43	0.18	-0.16
23	1	0.06	0.10	0.01	-0.15	-0.12	-0.03	0.15	0.19	0.02
24	1	-0.03	-0.06	0.00	0.02	-0.26	0.04	-0.04	0.30	-0.05
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

52

53

54

Frequencies -- 1471.8558

1487.0413

1530.2413

Red. masses -- 2.3927

2.0300

2.8211

Frc consts -- 3.0540

2.6448

3.8922

IR Inten -- 37.0607

4.3068

19.6600

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.11	0.00	0.05	0.01	0.02	-0.05	0.14	-0.04
2	6	-0.08	-0.01	-0.03	-0.06	0.05	-0.02	0.06	-0.12	0.03
3	6	0.00	-0.01	0.00	-0.03	-0.06	0.00	0.07	0.12	0.01
4	6	0.12	-0.05	0.04	0.02	0.03	0.00	-0.05	-0.06	-0.01
5	1	0.23	0.14	0.06	0.18	0.08	0.05	-0.38	-0.18	-0.10
6	6	-0.10	0.05	-0.04	-0.03	0.01	-0.01	-0.11	-0.07	-0.03
7	6	-0.10	-0.01	-0.03	0.09	0.01	0.03	0.02	-0.01	0.01
8	6	0.02	-0.05	0.02	-0.05	-0.05	-0.01	0.08	-0.01	0.04
9	6	-0.05	0.03	-0.02	0.10	0.05	0.02	0.09	0.11	0.01
10	1	0.11	-0.01	0.03	0.22	0.14	0.06	-0.16	-0.21	-0.05

11	1	0.06	-0.35	0.06	0.06	0.02	0.02	-0.04	-0.33	0.04
12	6	0.05	0.06	0.01	-0.09	-0.07	-0.02	-0.10	0.07	-0.04
13	6	-0.02	-0.03	0.00	-0.09	0.07	-0.04	0.06	-0.01	0.02
14	6	0.14	-0.06	0.05	-0.01	-0.02	0.00	0.06	-0.09	0.03
15	1	-0.27	-0.11	-0.07	-0.25	-0.21	-0.04	-0.33	-0.19	-0.07
16	1	0.26	-0.18	0.10	0.29	-0.12	0.11	-0.28	0.02	-0.09
17	6	-0.09	-0.02	-0.02	-0.03	0.08	-0.02	0.04	0.03	0.01
18	6	0.07	0.00	0.02	-0.04	-0.06	-0.01	-0.07	0.02	-0.02
19	1	-0.13	0.01	-0.04	0.40	-0.13	0.14	-0.05	0.04	-0.02
20	1	-0.29	0.15	-0.11	-0.23	0.07	-0.08	-0.29	0.06	-0.10
21	6	0.00	0.09	-0.01	0.07	-0.06	0.03	0.02	-0.10	0.02
22	1	0.19	-0.15	0.08	0.27	-0.03	0.09	-0.10	0.10	-0.04
23	1	-0.15	-0.18	-0.02	0.34	0.24	0.07	0.06	0.13	0.00
24	1	0.04	-0.44	0.07	0.06	0.19	-0.01	-0.01	0.30	-0.04
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		55			56			57		
		A			A			A		
Frequencies	--	1556.3138			1601.3255			1609.4197		
Red. masses	--	3.2416			6.5853			4.7214		
Frc consts	--	4.6260			9.9491			7.2055		
IR Inten	--	9.7820			27.9321			29.5677		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.07	-0.05	0.04	-0.01	0.18	-0.02	0.07	0.13	0.03
2	6	-0.19	0.08	-0.07	0.09	-0.10	0.04	-0.21	-0.04	-0.07
3	6	0.09	-0.05	0.03	-0.02	0.09	-0.02	0.29	0.13	0.08
4	6	0.03	0.09	0.00	0.05	-0.25	0.04	-0.17	-0.07	-0.05
5	1	0.15	-0.02	0.05	-0.07	0.08	-0.02	-0.42	-0.37	-0.10
6	6	0.03	-0.08	0.02	-0.02	0.25	-0.04	0.16	0.05	0.04
7	6	-0.09	0.02	-0.03	0.02	0.23	-0.02	0.04	-0.06	0.02
8	6	-0.05	0.00	-0.03	-0.08	-0.15	0.00	-0.16	-0.13	-0.04
9	6	0.08	0.06	0.02	0.10	-0.08	0.04	0.00	-0.02	0.00
10	1	0.07	0.10	0.03	0.28	0.10	0.07	0.23	0.16	0.08
11	1	0.09	0.04	0.01	0.01	-0.18	0.03	0.12	-0.21	0.03
12	6	-0.08	0.04	-0.03	-0.03	-0.21	0.02	0.05	0.06	0.01
13	6	0.06	-0.09	0.03	-0.14	-0.09	-0.03	0.00	0.05	-0.01
14	6	-0.03	-0.04	0.00	-0.17	0.09	-0.07	-0.06	0.01	-0.02
15	1	-0.11	-0.08	-0.02	0.03	-0.16	0.03	0.10	0.04	0.03
16	1	0.33	-0.18	0.13	-0.15	0.01	-0.05	0.14	-0.24	0.08
17	6	0.11	0.01	0.03	0.06	0.04	0.01	0.00	-0.07	0.01
18	6	0.09	0.15	0.01	0.22	0.16	0.05	-0.05	-0.09	0.00
19	1	-0.43	0.09	-0.15	0.05	-0.19	0.04	0.16	-0.01	0.05
20	1	-0.07	-0.04	-0.02	0.20	-0.10	0.08	0.11	-0.08	0.05
21	6	-0.06	-0.15	0.00	-0.08	-0.12	-0.01	0.00	0.13	-0.02
22	1	-0.27	0.19	-0.11	-0.01	0.08	-0.01	-0.06	-0.05	-0.01
23	1	-0.32	-0.14	-0.08	-0.33	-0.28	-0.06	0.10	0.02	0.03
24	1	-0.11	0.29	-0.07	-0.11	0.05	-0.04	0.02	-0.18	0.03
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		58			59			60		
		A			A			A		
Frequencies	--	1646.6457			1660.5460			3185.1624		
Red. masses	--	5.9513			5.7957			1.0887		
Frc consts	--	9.5073			9.4158			6.5075		
IR Inten	--	8.9473			7.9028			0.2292		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.02	0.00	-0.04	0.00	-0.02
2	6	0.03	0.00	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00
3	6	-0.06	-0.03	-0.02	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.11	0.03	0.03	0.05	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00
5	1	0.11	0.09	0.03	0.04	0.04	0.01	-0.01	0.02	-0.01
6	6	-0.14	-0.05	-0.04	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.08	-0.15	-0.01	-0.19	0.08	-0.07	0.00	0.00	0.00
8	6	0.03	0.00	0.02	-0.04	-0.04	-0.01	0.04	-0.06	0.03
9	6	0.34	0.11	0.09	0.07	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00





**Table S15.** Cartesian coordinates of optimized structure for (6-C<sub>3</sub>C<sub>4</sub>)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	-2.039311	1.771313	0.919152
2	6	0	-1.871188	0.414727	1.361524
3	6	0	-0.615755	-0.244177	1.163883
4	6	0	0.474890	0.409382	0.521275
5	1	0	-0.474025	-1.219694	1.619884
6	6	0	0.282070	1.773298	0.093587
7	6	0	1.769588	-0.236657	0.315233
8	6	0	-0.975422	2.421717	0.306975
9	6	0	1.362117	2.484285	-0.531677
10	1	0	-1.084716	3.456455	-0.007196
11	1	0	-2.974483	2.288194	1.111024
12	6	0	2.820043	0.515154	-0.313144
13	6	0	2.041879	-1.578673	0.703189
14	6	0	2.581393	1.875053	-0.724749
15	1	0	1.202194	3.512932	-0.842513
16	1	0	-2.600708	-0.023735	2.042461
17	6	0	4.093387	-0.086780	-0.525606
18	6	0	3.295839	-2.149511	0.485390
19	1	0	1.279000	-2.183818	1.183993
20	1	0	3.395032	2.421376	-1.195626
21	6	0	4.332271	-1.400524	-0.133144
22	1	0	4.879517	0.496055	-0.998829
23	1	0	3.484357	-3.174013	0.793609
24	1	0	5.305036	-1.855022	-0.295703
25	47	0	-2.504723	-0.841072	-0.537499

**Table S16.** Vibrational frequencies for (6-C<sub>3</sub>C<sub>4</sub>)

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	22.1675			49.1939			95.6987		
Red. masses	--	11.5864			6.4596			5.1456		
Frc consts	--	0.0034			0.0092			0.0278		
IR Inten	--	0.0030			0.1475			0.6001		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	-0.16	-0.08	0.04	0.12	-0.12	0.03	0.06	0.01
2	6	0.11	-0.16	-0.06	0.00	0.12	-0.11	-0.01	0.03	-0.06
3	6	0.14	-0.10	-0.04	-0.01	0.09	-0.09	0.01	0.05	0.01
4	6	0.12	-0.07	-0.02	0.02	0.07	-0.06	0.05	0.07	0.11
5	1	0.16	-0.12	-0.07	-0.02	0.10	-0.06	-0.03	0.02	-0.05
6	6	0.07	-0.08	-0.04	0.08	0.10	-0.01	0.08	0.08	0.13
7	6	0.16	-0.01	0.01	0.01	0.04	-0.05	0.05	0.06	0.11
8	6	0.04	-0.12	-0.07	0.08	0.11	-0.06	0.08	0.09	0.12
9	6	0.05	-0.04	-0.03	0.14	0.11	0.12	0.07	0.06	0.11
10	1	0.00	-0.13	-0.09	0.11	0.12	-0.04	0.10	0.11	0.16
11	1	0.05	-0.19	-0.08	0.04	0.13	-0.16	0.02	0.06	-0.02
12	6	0.14	0.03	0.03	0.08	0.06	0.09	0.00	-0.01	-0.05
13	6	0.21	0.01	0.04	-0.08	-0.02	-0.18	0.08	0.10	0.23
14	6	0.09	0.01	0.01	0.15	0.10	0.18	0.02	0.00	-0.03
15	1	0.01	-0.05	-0.04	0.19	0.13	0.17	0.10	0.08	0.15
16	1	0.15	-0.16	-0.03	-0.01	0.15	-0.10	-0.05	0.01	-0.13
17	6	0.17	0.09	0.07	0.07	0.03	0.11	-0.06	-0.08	-0.21
18	6	0.25	0.07	0.08	-0.09	-0.05	-0.17	0.03	0.04	0.11
19	1	0.23	-0.02	0.02	-0.14	-0.04	-0.31	0.14	0.18	0.43
20	1	0.07	0.05	0.02	0.20	0.11	0.29	0.00	-0.04	-0.11
21	6	0.23	0.11	0.10	-0.02	-0.03	-0.01	-0.05	-0.06	-0.15
22	1	0.16	0.12	0.09	0.12	0.04	0.22	-0.11	-0.15	-0.37
23	1	0.29	0.08	0.10	-0.16	-0.09	-0.28	0.05	0.08	0.21
24	1	0.26	0.15	0.13	-0.03	-0.05	0.00	-0.10	-0.12	-0.28
25	47	-0.22	0.05	0.00	-0.05	-0.10	0.04	-0.04	-0.06	-0.05
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	110.2961			200.1879			246.4930		
Red. masses	--	4.5616			5.0941			4.6052		
Frc consts	--	0.0327			0.1203			0.1649		
IR Inten	--	1.3543			4.6068			0.5491		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.10	0.12	0.24	0.05	0.05	0.12	-0.02	0.18	-0.04
2	6	0.01	0.05	0.02	0.05	0.05	0.12	-0.14	0.17	-0.04
3	6	-0.05	-0.03	-0.16	0.08	0.09	0.21	-0.18	0.02	0.02
4	6	-0.03	-0.02	-0.13	0.06	0.07	0.17	-0.06	-0.11	0.06
5	1	-0.08	-0.08	-0.25	0.09	0.11	0.25	-0.30	0.02	0.06
6	6	0.02	0.02	0.00	0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.09	0.03
7	6	-0.04	-0.03	-0.13	0.05	0.06	0.14	-0.02	-0.11	0.07
8	6	0.09	0.10	0.21	0.03	0.03	0.06	0.06	0.05	-0.02
9	6	0.00	0.00	-0.06	-0.06	-0.07	-0.22	-0.03	-0.10	0.01
10	1	0.16	0.15	0.35	0.01	0.02	0.01	0.21	0.05	-0.05
11	1	0.17	0.18	0.41	0.06	0.05	0.13	0.02	0.27	-0.08
12	6	-0.02	-0.02	-0.09	0.05	0.05	0.12	-0.05	-0.05	0.07
13	6	-0.03	-0.01	-0.06	-0.01	0.00	-0.02	0.14	-0.11	0.01
14	6	-0.02	-0.03	-0.12	-0.03	-0.04	-0.11	-0.04	-0.08	0.04
15	1	0.02	0.01	-0.02	-0.14	-0.15	-0.45	-0.06	-0.11	-0.01
16	1	0.02	0.01	0.00	0.04	0.04	0.10	-0.21	0.24	-0.08
17	6	0.02	0.02	0.06	0.05	0.05	0.14	0.00	0.08	0.00
18	6	0.02	0.04	0.11	-0.07	-0.06	-0.16	0.20	0.00	-0.09



19	1	-0.04	-0.02	-0.09	-0.04	-0.01	-0.09	0.22	-0.20	0.04
20	1	-0.02	-0.05	-0.15	-0.07	-0.09	-0.26	-0.04	-0.09	0.03
21	6	0.05	0.06	0.18	-0.01	-0.01	-0.02	0.13	0.09	-0.10
22	1	0.04	0.02	0.10	0.08	0.06	0.20	-0.09	0.20	0.00
23	1	0.04	0.07	0.19	-0.14	-0.13	-0.35	0.28	0.00	-0.15
24	1	0.10	0.10	0.32	-0.03	-0.04	-0.06	0.16	0.17	-0.17
25	47	-0.02	-0.03	-0.02	-0.03	-0.03	-0.06	0.00	0.00	0.00
			7			8			9	
			A			A			A	
Frequencies	--	252.1480			276.7033			407.7595		
Red. masses	--	4.2963			4.3315			3.7463		
Frc consts	--	0.1609			0.1954			0.3670		
IR Inten	--	0.4833			3.3368			3.9748		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	0.04	0.17	0.04	0.06	0.10	-0.11	0.01	0.02
2	6	0.02	0.01	0.04	0.09	0.13	0.28	-0.09	-0.04	-0.12
3	6	-0.06	-0.07	-0.19	0.04	0.07	0.18	0.03	0.09	0.09
4	6	-0.04	-0.04	-0.13	-0.02	-0.02	-0.04	0.00	0.04	-0.01
5	1	-0.06	-0.11	-0.27	0.08	0.13	0.29	0.07	0.15	0.21
6	6	-0.06	-0.06	-0.18	-0.03	-0.04	-0.09	-0.10	0.02	-0.08
7	6	0.03	0.04	0.08	-0.04	-0.05	-0.10	0.03	0.01	-0.04
8	6	-0.02	-0.03	-0.07	-0.03	-0.04	-0.14	-0.07	0.08	0.15
9	6	-0.03	-0.03	-0.10	0.03	0.02	0.08	-0.07	-0.06	-0.14
10	1	-0.03	-0.03	-0.05	-0.07	-0.09	-0.29	-0.01	0.15	0.36
11	1	0.14	0.12	0.38	0.06	0.09	0.13	-0.12	-0.02	0.06
12	6	0.06	0.06	0.15	-0.03	-0.03	-0.06	0.10	0.00	0.06
13	6	0.04	0.07	0.17	0.00	-0.03	-0.05	0.01	-0.02	-0.12
14	6	0.05	0.06	0.14	0.05	0.05	0.14	0.05	0.03	0.15
15	1	-0.05	-0.04	-0.15	0.07	0.07	0.21	-0.06	-0.10	-0.27
16	1	0.07	-0.02	0.07	0.14	0.19	0.37	-0.09	-0.09	-0.15
17	6	0.01	0.01	0.05	-0.04	-0.03	-0.10	0.05	-0.11	-0.11
18	6	-0.03	-0.01	-0.01	0.05	0.04	0.09	0.08	0.01	0.11
19	1	0.08	0.12	0.29	0.00	-0.04	-0.06	-0.05	-0.07	-0.27
20	1	0.10	0.11	0.26	0.12	0.11	0.34	0.07	0.13	0.30
21	6	-0.07	-0.07	-0.16	0.02	0.02	0.01	0.07	-0.08	-0.01
22	1	0.02	0.00	0.05	-0.06	-0.03	-0.15	0.01	-0.18	-0.27
23	1	-0.04	-0.02	-0.03	0.10	0.08	0.21	0.06	0.04	0.24
24	1	-0.15	-0.15	-0.37	0.04	0.05	0.06	0.05	-0.13	-0.05
25	47	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.05	0.00	0.00	0.00
			10			11			12	
			A			A			A	
Frequencies	--	411.0152			444.9978			447.5029		
Red. masses	--	5.0314			3.6961			3.8295		
Frc consts	--	0.5008			0.4312			0.4518		
IR Inten	--	0.5721			8.0225			4.9763		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.20	-0.03	-0.08	0.02	0.05	0.06	0.02	0.00	0.08
2	6	0.06	-0.06	-0.12	-0.07	0.03	0.03	0.08	-0.02	-0.01
3	6	0.06	-0.07	0.08	-0.14	-0.10	-0.07	0.06	0.03	-0.16
4	6	0.01	-0.07	0.04	0.01	-0.04	0.15	0.06	0.14	0.06
5	1	0.07	-0.03	0.17	-0.26	-0.17	-0.18	0.09	-0.06	-0.35
6	6	0.10	-0.10	-0.06	0.03	-0.09	0.09	0.00	0.15	0.00
7	6	-0.07	-0.05	0.03	0.08	0.13	0.08	-0.01	-0.05	0.16
8	6	0.23	-0.02	0.04	0.01	-0.10	-0.10	-0.10	0.04	-0.10
9	6	-0.01	-0.03	-0.12	-0.01	-0.08	0.02	0.01	0.09	-0.04
10	1	0.31	0.03	0.17	0.02	-0.16	-0.30	-0.24	-0.01	-0.24
11	1	0.22	0.01	-0.08	0.07	0.14	0.07	0.01	-0.05	0.17
12	6	-0.12	0.06	0.10	0.11	0.09	0.01	-0.08	-0.06	0.12
13	6	-0.12	-0.06	-0.04	-0.06	0.07	-0.15	-0.01	-0.16	-0.06
14	6	0.02	0.06	0.10	0.06	0.06	-0.04	-0.06	-0.08	0.05
15	1	-0.13	-0.07	-0.19	-0.14	-0.12	-0.05	0.11	0.07	-0.16
16	1	-0.03	0.02	-0.16	-0.12	0.03	-0.02	0.14	-0.11	-0.01
17	6	-0.20	0.10	-0.07	0.03	-0.05	-0.15	-0.12	-0.04	-0.08

18	6	-0.05	0.09	0.09	-0.05	0.05	0.03	0.08	-0.04	0.01	
19	1	-0.14	-0.12	-0.16	-0.18	0.05	-0.38	-0.01	-0.30	-0.24	
20	1	0.11	0.02	0.20	-0.04	0.11	-0.15	-0.01	-0.21	-0.04	
21	6	-0.15	0.15	-0.01	0.01	0.00	0.09	0.05	0.05	0.05	
22	1	-0.27	0.08	-0.21	0.01	-0.19	-0.36	-0.24	-0.03	-0.28	
23	1	0.08	0.12	0.13	-0.12	0.03	0.02	0.14	-0.05	-0.05	
24	1	-0.14	0.18	-0.07	0.00	-0.04	0.17	0.09	0.14	0.06	
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
				13				14			
				A				A			
Frequencies	--	506.9888			520.7516			553.1822			
Red. masses	--	5.4639			3.3324			7.0640			
Frc consts	--	0.8275			0.5324			1.2736			
IR Inten	--	0.6010			11.1884			2.1882			
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	-0.03	-0.12	0.04	-0.05	-0.04	-0.10	-0.05	-0.07	0.04	
2	6	-0.17	-0.12	0.11	0.06	0.06	0.16	-0.23	-0.05	0.09	
3	6	-0.12	0.01	0.04	-0.03	-0.02	-0.07	-0.15	0.06	0.03	
4	6	-0.13	0.08	0.01	-0.02	-0.02	-0.06	-0.01	0.00	0.01	
5	1	0.01	0.01	-0.01	-0.03	-0.05	-0.12	-0.08	0.07	0.03	
6	6	0.08	0.09	-0.06	0.06	0.06	0.17	0.14	0.04	-0.08	
7	6	-0.14	0.04	0.02	-0.03	-0.04	-0.09	0.03	-0.04	0.01	
8	6	-0.01	-0.06	0.03	0.01	0.01	0.04	0.06	-0.16	0.05	
9	6	0.27	-0.05	-0.08	-0.01	0.00	-0.03	0.09	0.28	-0.14	
10	1	-0.17	-0.06	0.09	-0.04	-0.03	-0.08	-0.03	-0.16	0.10	
11	1	0.00	-0.05	-0.02	-0.13	-0.10	-0.32	0.03	0.11	-0.07	
12	6	-0.01	-0.11	0.05	0.05	0.07	0.17	-0.08	0.14	-0.05	
13	6	-0.07	0.09	-0.01	-0.02	-0.04	-0.09	0.15	-0.10	0.00	
14	6	0.22	-0.17	-0.01	-0.02	0.00	-0.05	0.11	0.28	-0.12	
15	1	0.42	-0.05	-0.15	-0.09	-0.08	-0.26	-0.05	0.28	-0.09	
16	1	-0.19	-0.12	0.09	0.09	0.10	0.22	-0.25	-0.07	0.06	
17	6	0.02	0.05	-0.02	0.02	0.02	0.07	-0.16	-0.06	0.06	
18	6	-0.02	0.20	-0.06	0.06	0.04	0.16	0.11	-0.25	0.03	
19	1	0.02	-0.02	0.00	-0.05	-0.06	-0.15	0.10	-0.04	0.01	
20	1	0.33	-0.31	0.00	-0.10	-0.09	-0.30	0.21	0.18	-0.07	
21	6	0.06	0.08	-0.06	-0.05	-0.06	-0.14	-0.02	-0.08	0.06	
22	1	-0.08	0.17	-0.02	0.00	-0.01	0.01	-0.09	-0.14	0.07	
23	1	-0.02	0.21	-0.04	0.13	0.11	0.36	0.12	-0.26	0.01	
24	1	0.03	0.02	-0.04	-0.13	-0.14	-0.39	0.07	0.13	-0.01	
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
				16				17			
				A				A			
Frequencies	--	560.0705			608.5967			629.0989			
Red. masses	--	2.8886			3.3058			6.9262			
Frc consts	--	0.5339			0.7214			1.6150			
IR Inten	--	0.8708			3.4883			4.7040			
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	0.03	0.03	0.06	-0.07	-0.05	-0.15	-0.22	0.04	0.08	
2	6	-0.01	-0.01	-0.04	0.08	0.08	0.17	-0.08	0.07	-0.02	
3	6	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.11	0.05	0.26	-0.10	
4	6	0.07	0.07	0.20	0.00	-0.01	-0.03	0.22	-0.01	-0.05	
5	1	-0.13	-0.17	-0.31	-0.05	-0.08	-0.19	-0.03	0.27	-0.06	
6	6	0.04	0.04	0.11	0.01	0.02	0.05	0.09	-0.09	0.01	
7	6	-0.06	-0.06	-0.18	0.01	0.01	0.03	0.14	-0.15	0.00	
8	6	-0.02	-0.01	-0.06	0.04	0.04	0.13	-0.03	-0.23	0.08	
9	6	-0.04	-0.04	-0.11	-0.04	-0.05	-0.12	0.03	-0.02	0.00	
10	1	-0.11	-0.09	-0.31	0.05	0.05	0.16	0.05	-0.25	0.02	
11	1	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.14	-0.38	-0.17	0.17	0.01	
12	6	-0.04	-0.04	-0.12	-0.01	-0.02	-0.04	0.10	-0.02	-0.03	
13	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.09	-0.15	-0.19	0.11	
14	6	0.03	0.04	0.11	0.04	0.03	0.12	0.02	-0.03	0.00	
15	1	-0.09	-0.09	-0.27	-0.07	-0.09	-0.24	0.03	-0.02	-0.01	
16	1	-0.09	-0.09	-0.17	0.12	0.11	0.23	0.11	-0.18	0.03	

17	6	0.02	0.02	0.05	-0.03	-0.03	-0.11	0.13	0.17	-0.10
18	6	0.00	0.00	0.01	-0.05	-0.04	-0.12	-0.10	0.03	0.03
19	1	0.12	0.12	0.33	0.06	0.06	0.19	-0.20	-0.13	0.12
20	1	0.10	0.11	0.31	0.09	0.09	0.28	0.02	-0.03	0.00
21	6	-0.02	-0.02	-0.05	0.04	0.05	0.12	-0.18	0.17	-0.01
22	1	0.11	0.11	0.31	-0.04	-0.04	-0.15	0.19	0.11	-0.08
23	1	0.07	0.08	0.22	-0.09	-0.09	-0.26	0.18	0.06	-0.05
24	1	0.02	0.02	0.06	0.10	0.11	0.32	-0.23	0.04	0.05
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			19				20			21
			A				A			A
Frequencies	--		715.9853				726.9952			745.3645
Red. masses	--		5.5896				5.8253			3.3248
Frc consts	--		1.6883				1.8140			1.0883
IR Inten	--		0.0374				3.3084			11.0296

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	0.01	0.03	-0.19	0.08	0.04	0.04	0.03	0.09
2	6	0.00	0.05	-0.03	0.12	0.05	-0.06	-0.04	-0.05	-0.09
3	6	0.07	0.24	-0.11	0.07	-0.06	0.00	0.03	0.03	0.09
4	6	0.08	0.06	-0.05	0.03	-0.06	0.02	-0.06	-0.07	-0.17
5	1	0.11	0.24	-0.13	-0.04	-0.06	0.05	0.07	0.08	0.17
6	6	0.08	-0.12	0.03	-0.07	-0.05	0.04	0.05	0.06	0.17
7	6	-0.04	0.11	-0.03	0.05	0.05	-0.03	-0.05	-0.06	-0.15
8	6	0.09	-0.26	0.06	-0.17	0.10	0.02	-0.03	-0.01	-0.07
9	6	-0.05	-0.08	0.04	0.17	-0.24	0.03	0.01	0.00	0.01
10	1	0.20	-0.28	-0.03	-0.09	0.12	0.01	-0.11	-0.09	-0.30
11	1	0.02	0.16	-0.07	-0.28	-0.11	0.17	0.02	0.01	0.04
12	6	-0.13	-0.04	0.06	-0.05	0.08	-0.02	0.05	0.06	0.14
13	6	0.10	0.23	-0.11	0.11	0.04	-0.05	0.03	0.03	0.09
14	6	-0.08	-0.09	0.06	0.26	0.01	-0.09	0.02	0.02	0.04
15	1	-0.09	-0.10	0.03	0.17	-0.23	0.04	-0.15	-0.16	-0.43
16	1	0.16	-0.14	0.02	0.17	-0.06	-0.08	-0.05	-0.05	-0.10
17	6	-0.20	-0.11	0.10	-0.23	0.04	0.07	-0.03	-0.03	-0.09
18	6	0.03	0.06	-0.04	0.05	-0.12	0.03	-0.03	-0.04	-0.09
19	1	0.10	0.24	-0.10	0.03	0.13	-0.07	0.09	0.09	0.26
20	1	-0.07	-0.12	0.06	0.27	0.00	-0.08	-0.11	-0.11	-0.33
21	6	0.09	-0.08	0.00	-0.16	0.08	0.02	0.02	0.04	0.10
22	1	-0.29	0.00	0.10	-0.21	0.01	0.08	-0.09	-0.11	-0.30
23	1	-0.23	0.05	0.06	0.09	-0.11	0.02	-0.05	-0.07	-0.18
24	1	0.14	0.05	-0.05	-0.07	0.32	-0.10	0.04	0.05	0.13
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			22				23			24
			A				A			A
Frequencies	--		792.7455				830.9741			834.4318
Red. masses	--		1.2448				1.2737			2.2540
Frc consts	--		0.4609				0.5182			0.9247
IR Inten	--		76.6426				9.4388			1.4709

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.01	0.03	-0.02	-0.02	-0.05	-0.03	-0.02	-0.06
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.03	0.02	0.02	0.03
3	6	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.03	0.05	0.05	0.14
5	1	0.00	-0.01	-0.02	0.05	0.11	0.22	-0.12	-0.15	-0.29
6	6	0.01	0.01	0.04	0.02	0.02	0.05	-0.04	-0.04	-0.11
7	6	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	-0.06	-0.06	-0.16
8	6	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.02	-0.05	0.00	-0.01	0.00
9	6	-0.01	-0.01	-0.04	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02	0.04
10	1	-0.07	-0.07	-0.21	0.11	0.11	0.33	0.12	0.10	0.32
11	1	-0.07	-0.05	-0.17	0.19	0.16	0.49	0.08	0.07	0.22
12	6	-0.02	-0.02	-0.05	-0.02	-0.02	-0.06	0.04	0.04	0.12
13	6	0.02	0.02	0.06	0.01	0.01	0.03	0.00	0.00	0.01
14	6	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.02	0.04	-0.02	-0.02	-0.05
15	1	0.05	0.05	0.15	-0.11	-0.11	-0.32	0.05	0.06	0.15

16	1	-0.06	-0.06	-0.10	0.22	0.20	0.36	-0.01	0.02	0.00
17	6	0.02	0.02	0.05	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.02
18	6	0.02	0.02	0.05	0.01	0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.03
19	1	-0.13	-0.14	-0.38	-0.08	-0.07	-0.21	0.11	0.11	0.30
20	1	0.08	0.09	0.25	-0.03	-0.04	-0.10	-0.02	-0.03	-0.08
21	6	0.01	0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	0.08
22	1	-0.09	-0.10	-0.27	0.01	0.02	0.04	-0.17	-0.18	-0.50
23	1	-0.15	-0.16	-0.45	-0.07	-0.07	-0.19	-0.05	-0.04	-0.12
24	1	-0.15	-0.16	-0.44	-0.04	-0.05	-0.12	-0.09	-0.10	-0.27
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

25				26			27		
A				A			A		
Frequencies	--	842.6497		885.2452		889.1236			
Red. masses	--	5.6456		3.1541		1.5135			
Frc consts	--	2.3618		1.4563		0.7050			
IR Inten	--	0.2033		12.1063		94.1563			

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.20	0.11	0.05	-0.07	0.05	0.02	-0.02	0.01	0.00
2	6	0.18	0.11	-0.11	0.01	0.05	0.02	-0.03	-0.01	-0.05
3	6	0.06	-0.14	0.03	0.00	-0.14	0.06	-0.01	-0.06	-0.01
4	6	0.02	-0.13	0.03	0.07	-0.08	0.02	0.02	-0.04	-0.01
5	1	-0.13	-0.07	0.24	-0.18	-0.17	0.07	0.03	0.10	0.32
6	6	0.04	-0.06	0.02	0.02	0.02	-0.08	0.04	0.04	0.07
7	6	-0.10	-0.07	0.06	0.11	0.01	-0.06	0.04	0.01	0.00
8	6	-0.07	-0.08	0.05	-0.01	-0.02	0.02	-0.01	-0.01	-0.01
9	6	0.04	0.19	-0.08	0.05	0.19	-0.02	-0.02	0.03	-0.10
10	1	0.07	-0.09	-0.04	0.02	-0.01	0.04	-0.03	-0.03	-0.08
11	1	-0.26	-0.03	0.11	-0.12	0.02	-0.10	0.04	0.07	0.17
12	6	-0.07	-0.02	0.03	0.00	-0.06	0.00	0.01	0.00	0.04
13	6	-0.13	-0.03	0.06	0.10	0.12	-0.04	0.01	0.02	-0.05
14	6	0.09	0.14	-0.08	-0.10	-0.14	0.13	-0.05	-0.06	-0.03
15	1	-0.13	0.18	-0.05	0.17	0.09	-0.41	0.22	0.21	0.37
16	1	0.16	-0.05	-0.23	-0.22	-0.05	-0.28	0.19	0.19	0.32
17	6	0.00	-0.11	0.03	0.00	0.02	-0.03	0.00	0.01	0.02
18	6	-0.04	0.22	-0.06	-0.02	-0.02	0.04	-0.02	-0.02	-0.03
19	1	0.01	-0.22	0.06	-0.08	0.20	-0.24	0.07	0.17	0.21
20	1	0.20	-0.01	-0.09	-0.07	-0.43	-0.15	0.15	0.04	0.44
21	6	0.21	-0.10	-0.04	-0.09	0.03	0.01	-0.02	0.01	0.01
22	1	-0.09	0.04	0.05	0.06	0.06	0.13	-0.06	-0.07	-0.19
23	1	-0.14	0.21	-0.02	-0.12	-0.07	-0.07	0.04	0.07	0.21
24	1	0.16	-0.24	0.06	-0.08	0.05	0.03	-0.02	0.01	0.01
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

28				29			30		
A				A			A		
Frequencies	--	924.1135		930.5352		969.2561			
Red. masses	--	1.8232		1.4836		1.5136			
Frc consts	--	0.9174		0.7569		0.8378			
IR Inten	--	2.6638		17.3077		49.6762			

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	-0.02	0.05	0.01
2	6	-0.01	-0.02	-0.03	0.00	-0.01	-0.01	-0.09	-0.09	-0.03
3	6	-0.04	-0.04	-0.10	-0.02	-0.02	-0.05	0.06	0.01	0.06
4	6	0.04	0.05	0.11	0.00	0.01	0.01	0.03	-0.04	-0.01
5	1	0.15	0.28	0.51	0.10	0.18	0.34	-0.08	-0.27	-0.49
6	6	-0.03	-0.03	-0.08	-0.01	-0.01	-0.04	0.00	-0.02	-0.04
7	6	-0.04	-0.03	-0.10	0.01	0.02	0.05	0.04	-0.02	0.01
8	6	0.02	0.02	0.06	0.01	0.01	0.03	0.01	0.07	0.03
9	6	0.00	0.00	0.02	0.02	0.02	0.05	0.00	0.02	0.01
10	1	-0.10	-0.09	-0.27	-0.05	-0.04	-0.13	-0.01	-0.01	-0.25
11	1	-0.12	-0.11	-0.32	-0.10	-0.09	-0.27	-0.07	0.05	-0.17
12	6	0.02	0.03	0.07	-0.03	-0.03	-0.08	-0.01	-0.01	-0.01
13	6	0.02	0.02	0.07	-0.03	-0.03	-0.08	-0.01	0.00	-0.01
14	6	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.04	0.01	0.01	0.01

15	1	0.03	0.03	0.12	-0.11	-0.12	-0.34	-0.03	0.00	-0.03
16	1	0.19	0.09	0.26	0.07	0.01	0.08	0.31	0.22	0.60
17	6	-0.02	-0.02	-0.05	0.03	0.03	0.07	-0.03	-0.02	0.01
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.05	0.00
19	1	-0.09	-0.09	-0.24	0.13	0.14	0.39	0.02	-0.01	0.02
20	1	-0.05	-0.04	-0.15	-0.06	-0.06	-0.17	-0.02	-0.05	-0.11
21	6	0.00	-0.01	-0.02	0.02	0.02	0.04	0.00	-0.01	0.00
22	1	0.07	0.08	0.22	-0.12	-0.13	-0.35	-0.01	0.00	0.07
23	1	-0.03	-0.04	-0.11	0.04	0.04	0.13	-0.05	0.02	-0.08
24	1	0.07	0.07	0.19	-0.11	-0.12	-0.34	-0.02	-0.04	-0.02
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

31

32

33

		A			A			A		
Frequencies	--	1007.3208			1013.7211			1030.0956		
Red. masses	--	2.1966			1.6429			1.5018		
Frc consts	--	1.3132			0.9947			0.9389		
IR Inten	--	1.9849			5.4198			5.8264		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.05	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.06	0.08
2	6	-0.09	-0.08	0.10	0.05	0.03	-0.06	0.01	-0.01	-0.03
3	6	0.03	-0.03	-0.04	0.00	0.01	0.03	0.01	-0.02	0.01
4	6	0.10	-0.02	-0.01	-0.06	0.02	0.01	-0.04	0.02	0.01
5	1	0.21	0.07	0.12	-0.13	-0.10	-0.19	0.03	-0.05	-0.07
6	6	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.02
7	6	0.08	-0.05	-0.03	-0.06	0.02	0.00	-0.05	0.02	0.01
8	6	-0.01	0.09	-0.10	0.01	-0.05	0.05	-0.02	-0.07	-0.09
9	6	0.00	-0.01	0.03	0.02	0.02	0.03	0.01	0.01	0.02
10	1	0.19	0.22	0.26	-0.06	-0.11	-0.10	0.24	0.14	0.53
11	1	-0.05	0.07	-0.20	-0.01	-0.05	0.01	-0.20	-0.09	-0.52
12	6	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.03
13	6	0.01	0.01	0.07	0.03	0.04	0.07	-0.01	0.00	-0.02
14	6	-0.02	0.00	-0.04	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.05
15	1	-0.09	-0.07	-0.14	-0.05	-0.06	-0.20	-0.06	-0.05	-0.16
16	1	-0.19	-0.24	-0.09	0.16	0.16	0.13	0.16	0.03	0.16
17	6	-0.05	-0.03	0.10	0.07	0.06	0.05	0.03	0.02	-0.04
18	6	-0.03	0.08	-0.09	-0.02	-0.09	-0.05	0.01	-0.04	0.05
19	1	-0.08	-0.15	-0.28	-0.15	-0.12	-0.40	0.03	0.04	0.10
20	1	0.04	0.11	0.20	0.04	0.00	0.08	0.11	0.09	0.31
21	6	0.00	-0.02	-0.04	-0.02	-0.01	-0.05	0.00	0.00	-0.01
22	1	-0.19	-0.16	-0.27	-0.09	-0.12	-0.46	0.06	0.07	0.07
23	1	0.09	0.22	0.28	0.14	0.08	0.43	-0.07	-0.12	-0.14
24	1	0.08	0.06	0.23	0.09	0.11	0.27	0.02	0.02	0.03
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

34

35

36

		A			A			A		
Frequencies	--	1040.6775			1046.7063			1055.1350		
Red. masses	--	2.3483			1.4366			1.4133		
Frc consts	--	1.4985			0.9273			0.9270		
IR Inten	--	5.8784			0.0159			0.0908		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.13	0.14	-0.04	0.05	-0.02	0.05	0.00	-0.01	-0.01
2	6	-0.02	-0.09	0.06	0.01	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
3	6	0.08	-0.11	0.00	-0.02	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.05	0.09	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
5	1	0.45	-0.06	-0.01	-0.13	-0.01	-0.04	-0.01	-0.01	-0.02
6	6	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.01
7	6	-0.09	0.06	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.07	-0.01	-0.01	-0.04	-0.02	-0.05	0.01	0.01	0.02
9	6	-0.02	-0.03	-0.04	-0.03	-0.02	-0.08	0.02	0.02	0.06
10	1	0.36	-0.03	-0.18	0.01	0.10	0.36	-0.04	-0.04	-0.12
11	1	0.01	0.40	0.04	-0.09	-0.16	-0.24	0.03	0.02	0.07
12	6	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.03
13	6	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.02	0.03	0.01	0.01	0.03

14	6	0.01	0.02	0.05	0.03	0.03	0.08	-0.02	-0.02	-0.07
15	1	0.05	0.06	0.24	0.13	0.14	0.38	-0.09	-0.10	-0.28
16	1	0.01	-0.31	-0.03	0.04	0.10	0.06	-0.01	0.00	-0.01
17	6	0.06	0.05	-0.04	-0.01	-0.01	0.00	-0.03	-0.03	-0.07
18	6	-0.01	-0.11	0.00	-0.02	-0.01	-0.07	-0.02	-0.02	-0.07
19	1	-0.01	-0.07	-0.05	-0.07	-0.05	-0.19	-0.05	-0.06	-0.15
20	1	-0.11	-0.08	-0.26	-0.13	-0.16	-0.42	0.12	0.13	0.35
21	6	0.03	0.01	0.02	0.01	0.02	0.05	0.03	0.03	0.10
22	1	0.05	0.10	-0.01	0.02	0.01	0.08	0.13	0.13	0.38
23	1	0.03	-0.05	0.22	0.12	0.14	0.33	0.12	0.14	0.37
24	1	-0.01	-0.03	-0.18	-0.10	-0.11	-0.28	-0.17	-0.18	-0.50
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		37			38			39		
		A			A			A		
Frequencies	--	1064.9449			1113.7312			1168.5662		
Red. masses	--	2.2524			2.4677			1.4889		
Frc consts	--	1.5050			1.8034			1.1979		
IR Inten	--	2.0656			3.6294			3.7990		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.03	0.00	0.02	0.02	0.00	0.03	0.00	0.00
2	6	-0.02	-0.01	0.02	-0.03	0.07	-0.03	-0.05	0.04	0.00
3	6	-0.01	0.02	0.00	0.05	-0.14	0.04	0.06	-0.04	-0.02
4	6	0.07	-0.04	-0.01	0.02	0.10	-0.05	0.04	0.01	-0.01
5	1	-0.19	0.00	0.03	0.09	-0.16	0.00	0.33	-0.02	-0.06
6	6	0.01	-0.01	0.00	-0.04	0.09	-0.02	-0.03	0.00	0.01
7	6	0.07	0.02	-0.03	0.06	0.06	-0.04	0.00	-0.05	0.02
8	6	-0.02	0.05	-0.01	-0.01	-0.14	0.05	-0.04	-0.03	0.02
9	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.06	0.02	-0.01	-0.01	0.01
10	1	-0.07	0.05	0.00	-0.18	-0.16	0.10	-0.23	-0.03	0.08
11	1	0.00	-0.07	0.03	0.13	0.28	-0.17	0.08	0.10	-0.07
12	6	-0.04	0.02	0.01	0.06	0.04	-0.03	-0.05	-0.03	0.03
13	6	-0.13	0.01	0.04	-0.09	-0.07	0.05	0.07	0.02	-0.03
14	6	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.02	0.04	0.03	-0.03
15	1	0.04	-0.01	-0.01	0.24	-0.05	-0.06	-0.18	-0.02	0.07
16	1	-0.03	-0.01	0.01	-0.26	0.49	0.00	-0.32	0.42	-0.04
17	6	-0.02	0.08	-0.02	-0.09	-0.07	0.05	0.03	0.07	-0.03
18	6	-0.05	-0.13	0.07	0.02	0.02	-0.01	-0.04	0.00	0.02
19	1	-0.40	0.33	0.02	-0.08	-0.08	0.06	0.19	-0.11	-0.01
20	1	0.02	-0.04	0.01	-0.18	0.19	-0.01	0.12	-0.06	-0.02
21	6	0.20	-0.01	-0.06	0.04	0.02	-0.02	-0.01	-0.03	0.01
22	1	-0.28	0.42	-0.06	-0.05	-0.12	0.06	-0.15	0.30	-0.06
23	1	-0.29	-0.17	0.15	0.23	0.04	-0.09	-0.34	-0.03	0.12
24	1	0.30	0.20	-0.17	0.13	0.26	-0.13	-0.11	-0.31	0.15
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		40			41			42		
		A			A			A		
Frequencies	--	1199.4157			1208.7728			1220.4469		
Red. masses	--	1.3741			1.1142			1.1317		
Frc consts	--	1.1647			0.9592			0.9931		
IR Inten	--	2.2253			1.5029			4.1538		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.00	0.01	0.04	0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00
2	6	0.02	0.00	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.00
4	6	0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.03	0.00	-0.02	0.02	0.00
5	1	-0.16	-0.01	0.04	-0.23	-0.01	0.08	-0.03	0.00	0.01
6	6	0.04	0.05	-0.03	-0.03	0.03	0.00	-0.03	-0.01	0.01
7	6	-0.01	-0.03	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.03	0.02	-0.02
8	6	0.02	-0.01	-0.01	-0.03	-0.02	0.02	0.01	-0.01	0.00
9	6	0.05	-0.07	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00
10	1	-0.03	0.00	0.01	-0.44	-0.02	0.15	0.11	-0.01	-0.03
11	1	-0.02	0.01	0.00	0.29	0.57	-0.27	0.00	0.01	-0.01
12	6	-0.02	0.07	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01

13	6	0.04	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.00
14	6	-0.07	0.01	0.02	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.01
15	1	0.52	-0.05	-0.16	-0.10	-0.01	0.03	-0.03	0.01	0.01
16	1	0.13	-0.15	0.02	0.25	-0.38	0.01	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.01	0.04	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00
18	6	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01	-0.01
19	1	0.14	-0.15	0.00	-0.02	0.04	-0.01	-0.24	0.27	-0.01
20	1	-0.38	0.42	-0.03	0.08	-0.08	0.00	0.03	-0.01	-0.01
21	6	0.01	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.02
22	1	-0.12	0.19	-0.03	0.01	0.00	0.00	-0.26	0.32	-0.03
23	1	-0.20	0.01	0.06	0.00	0.00	0.00	0.57	0.03	-0.20
24	1	-0.09	-0.33	0.15	-0.02	-0.04	0.02	-0.17	-0.47	0.23
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies	--	1258.8268			1270.1982			1286.4655		
Red. masses	--	2.4147			1.7792			1.5574		
Frc consts	--	2.2545			1.6913			1.5186		
IR Inten	--	8.2991			3.3526			54.0690		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.02	0.00	-0.04	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.01
3	6	-0.02	-0.03	0.02	-0.02	-0.04	0.03	0.06	0.03	-0.04
4	6	0.10	0.02	-0.04	0.03	0.05	-0.03	-0.01	-0.11	0.05
5	1	-0.18	-0.04	0.05	-0.17	-0.05	0.06	0.40	0.04	-0.13
6	6	0.16	0.01	-0.06	0.16	0.04	-0.07	0.04	-0.04	0.00
7	6	-0.05	0.10	-0.02	-0.03	-0.04	0.03	-0.08	-0.06	0.04
8	6	-0.02	0.03	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.02	0.03	0.00
9	6	-0.01	-0.07	0.03	-0.01	-0.03	0.01	0.03	0.00	-0.01
10	1	-0.30	0.04	0.08	-0.29	0.03	0.09	-0.36	0.03	0.11
11	1	-0.12	-0.17	0.11	-0.11	-0.13	0.09	0.03	0.08	-0.03
12	6	-0.13	0.17	-0.02	0.05	-0.13	0.03	-0.04	0.01	0.01
13	6	0.00	-0.05	0.02	0.01	0.04	-0.02	-0.04	0.07	-0.01
14	6	-0.04	-0.06	0.03	0.00	0.01	-0.01	-0.03	0.02	0.00
15	1	-0.27	-0.10	0.13	-0.55	-0.06	0.21	0.29	0.01	-0.10
16	1	-0.09	0.12	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.13	0.14	-0.03
17	6	0.04	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.03	0.00	-0.01
18	6	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.02	-0.01
19	1	0.02	-0.09	0.02	-0.07	0.14	-0.03	-0.27	0.35	-0.03
20	1	0.19	-0.40	0.08	-0.32	0.45	-0.06	-0.18	0.22	-0.02
21	6	0.04	-0.01	-0.01	-0.04	0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00
22	1	0.24	-0.24	0.00	-0.15	0.15	-0.01	0.25	-0.26	0.01
23	1	0.27	0.01	-0.09	0.03	0.00	-0.01	0.27	0.00	-0.09
24	1	-0.08	-0.36	0.16	0.01	0.16	-0.06	0.04	0.06	-0.04
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		46			47			48		
		A			A			A		
Frequencies	--	1320.7692			1346.9807			1407.8820		
Red. masses	--	1.7285			2.3571			4.6152		
Frc consts	--	1.7765			2.5197			5.3898		
IR Inten	--	0.6797			1.2470			32.7858		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.03	-0.01	0.03	-0.02	-0.01	-0.04	-0.11	0.05
2	6	0.02	0.02	-0.02	-0.04	-0.02	0.03	-0.18	0.23	-0.02
3	6	-0.04	0.03	0.00	0.04	0.02	-0.02	0.15	-0.04	-0.03
4	6	-0.09	-0.05	0.05	0.16	-0.08	-0.03	-0.04	-0.16	0.07
5	1	0.53	0.04	-0.19	-0.32	0.02	0.10	0.17	-0.05	-0.03
6	6	0.07	-0.08	0.00	-0.03	-0.07	0.03	-0.09	0.20	-0.04
7	6	0.05	0.08	-0.05	-0.16	0.16	-0.01	0.04	0.10	-0.05
8	6	-0.01	0.02	0.00	-0.05	0.04	0.00	0.20	-0.02	-0.06
9	6	0.02	0.04	-0.02	-0.02	0.05	-0.01	-0.02	-0.05	0.02
10	1	-0.44	0.02	0.14	0.06	0.04	-0.04	-0.10	-0.01	0.06
11	1	-0.04	-0.06	0.04	0.07	0.07	-0.05	-0.13	-0.31	0.14

12	6	0.10	0.03	-0.04	0.01	-0.06	0.02	-0.11	-0.04	0.05
13	6	-0.04	-0.02	0.02	-0.02	0.02	0.00	0.06	-0.05	0.00
14	6	-0.03	-0.05	0.03	0.04	0.00	-0.01	0.03	0.02	-0.02
15	1	-0.09	0.03	0.02	0.25	0.08	-0.11	-0.19	-0.05	0.09
16	1	0.12	-0.11	-0.01	-0.14	0.11	0.00	0.35	-0.51	0.08
17	6	-0.04	-0.01	0.02	0.06	-0.05	0.00	0.07	-0.09	0.01
18	6	-0.01	-0.01	0.01	-0.03	-0.06	0.03	-0.11	0.00	0.04
19	1	0.23	-0.35	0.05	0.34	-0.42	0.04	0.04	-0.03	0.00
20	1	-0.01	-0.08	0.03	-0.13	0.23	-0.04	0.01	0.05	-0.02
21	6	0.00	-0.02	0.01	-0.03	0.02	0.00	0.02	0.08	-0.03
22	1	-0.28	0.30	-0.01	-0.19	0.26	-0.03	-0.04	0.06	-0.01
23	1	0.07	0.00	-0.02	0.35	-0.03	-0.10	0.19	0.02	-0.07
24	1	0.02	0.03	-0.02	0.02	0.15	-0.06	0.01	0.06	-0.02
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

49

50

51

Frequencies -- 1410.6890

1448.4734

1462.6325

Red. masses -- 5.0538

1.9141

2.1386

Frc consts -- 5.9256

2.3661

2.6956

IR Inten -- 65.6366

5.9386

27.4462

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	-0.09	0.05	-0.06	-0.09	0.06	0.02	-0.01	0.00
2	6	-0.08	0.06	0.01	0.07	-0.04	-0.01	-0.07	0.05	0.00
3	6	0.16	-0.01	-0.05	0.03	0.06	-0.04	0.06	-0.03	-0.01
4	6	0.01	-0.10	0.03	-0.08	-0.10	0.06	0.00	0.04	-0.02
5	1	-0.37	0.00	0.15	-0.04	0.08	-0.01	-0.14	-0.03	0.06
6	6	-0.02	0.14	-0.04	0.03	0.05	-0.03	-0.05	-0.11	0.06
7	6	-0.13	-0.12	0.09	0.02	0.05	-0.03	0.01	0.09	-0.04
8	6	0.08	0.02	-0.03	-0.04	0.04	0.00	0.02	0.02	-0.01
9	6	-0.03	-0.02	0.02	0.05	0.02	-0.03	0.09	0.05	-0.05
10	1	0.12	0.02	-0.04	0.36	0.05	-0.15	-0.18	0.02	0.06
11	1	0.01	0.06	-0.03	0.17	0.45	-0.23	-0.01	-0.09	0.03
12	6	0.21	0.12	-0.12	0.00	0.04	-0.01	0.01	-0.08	0.03
13	6	-0.16	0.15	0.00	0.03	-0.06	0.01	-0.07	-0.02	0.03
14	6	-0.01	-0.06	0.03	0.01	-0.09	0.03	0.00	-0.03	0.01
15	1	-0.31	-0.03	0.12	-0.41	0.00	0.14	-0.19	0.05	0.05
16	1	-0.06	0.01	0.01	-0.20	0.33	-0.06	0.07	-0.14	0.03
17	6	-0.11	0.16	-0.02	-0.01	-0.03	0.01	-0.09	0.08	0.00
18	6	0.17	-0.02	-0.05	-0.03	0.00	0.01	0.10	-0.04	-0.02
19	1	0.21	-0.30	0.04	-0.05	0.03	0.00	0.01	-0.12	0.04
20	1	0.20	-0.35	0.06	-0.23	0.22	0.00	-0.21	0.24	-0.02
21	6	-0.04	-0.19	0.08	0.02	0.05	-0.03	0.03	0.06	-0.03
22	1	-0.02	0.07	-0.01	-0.01	-0.03	0.02	0.30	-0.43	0.05
23	1	0.03	-0.04	0.00	-0.07	0.00	0.02	-0.31	-0.08	0.14
24	1	0.08	0.10	-0.06	-0.05	-0.13	0.06	-0.15	-0.42	0.20
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

52

53

54

Frequencies -- 1475.9169

1491.7232

1533.1580

Red. masses -- 3.1353

2.0352

2.9034

Frc consts -- 4.0240

2.6682

4.0210

IR Inten -- 66.2201

18.4277

3.8294

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.07	-0.09	0.06	-0.06	0.03	0.01	0.04	0.19	-0.08
2	6	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.07	0.03	0.02	-0.14	0.05
3	6	0.06	-0.01	-0.02	0.12	0.03	-0.06	0.05	0.05	-0.05
4	6	-0.10	0.10	0.00	-0.10	0.00	0.03	-0.05	-0.03	0.03
5	1	-0.33	0.00	0.12	-0.42	0.05	0.13	-0.30	0.07	0.10
6	6	0.02	-0.10	0.03	0.02	-0.04	0.01	-0.14	0.05	0.03
7	6	0.15	-0.02	-0.04	-0.03	0.05	-0.01	0.05	-0.04	0.00
8	6	0.03	0.07	-0.03	0.11	0.02	-0.04	0.07	-0.09	0.01
9	6	0.15	-0.05	-0.03	-0.05	0.00	0.02	0.06	0.05	-0.04
10	1	-0.13	0.08	0.02	-0.39	0.02	0.13	-0.25	-0.11	0.12



11	1	0.08	0.27	-0.14	-0.11	-0.03	0.05	-0.20	-0.35	0.21
12	6	-0.12	-0.06	0.06	0.06	-0.01	-0.02	-0.06	0.07	-0.01
13	6	-0.03	0.06	-0.01	0.04	-0.09	0.02	0.02	0.02	-0.01
14	6	-0.14	0.13	0.00	-0.03	0.05	-0.01	0.07	-0.11	0.02
15	1	-0.03	-0.08	0.04	0.28	0.01	-0.10	-0.30	0.04	0.09
16	1	-0.06	0.14	-0.01	-0.24	0.25	-0.01	-0.20	0.11	0.00
17	6	0.06	0.04	-0.04	0.02	-0.07	0.02	0.00	0.04	-0.02
18	6	-0.05	0.01	0.01	0.05	0.03	-0.03	-0.09	0.01	0.03
19	1	0.29	-0.33	0.01	-0.20	0.19	0.00	0.13	-0.11	-0.01
20	1	0.04	-0.14	0.03	0.17	-0.22	0.02	-0.23	0.29	-0.02
21	6	-0.01	-0.11	0.04	-0.04	0.05	-0.01	0.03	-0.06	0.01
22	1	0.12	-0.01	-0.04	-0.17	0.16	0.00	0.08	-0.04	-0.01
23	1	0.33	0.04	-0.12	-0.31	0.00	0.10	0.25	0.04	-0.10
24	1	0.17	0.34	-0.18	-0.08	-0.02	0.03	0.10	0.11	-0.07
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

55

56

57

		A			A			A		
Frequencies	--	1541.5303			1595.5968			1622.7498		
Red. masses	--	3.1098			5.6519			5.4075		
Frc consts	--	4.3539			8.4780			8.3898		
IR Inten	--	19.1121			19.8776			78.1535		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	0.03	0.02	-0.04	0.05	0.00	-0.18	-0.12	0.12
2	6	0.09	-0.10	0.00	0.10	-0.10	-0.01	0.09	-0.02	-0.05
3	6	-0.08	0.05	0.00	-0.17	0.05	0.04	-0.17	-0.01	0.08
4	6	-0.01	-0.08	0.03	0.14	-0.16	0.01	0.18	0.08	-0.09
5	1	0.04	0.06	-0.03	0.35	0.05	-0.15	0.28	-0.03	-0.12
6	6	0.03	0.12	-0.05	-0.11	0.16	-0.02	-0.20	-0.07	0.09
7	6	0.07	-0.01	-0.02	0.03	0.19	-0.08	-0.13	-0.04	0.06
8	6	0.08	-0.02	-0.02	0.09	-0.04	-0.02	0.30	0.07	-0.13
9	6	-0.12	-0.04	0.06	0.08	-0.06	-0.01	0.04	0.05	-0.03
10	1	-0.11	-0.01	0.04	-0.08	-0.05	0.04	-0.49	0.09	0.14
11	1	-0.06	0.07	0.00	-0.07	0.01	0.02	-0.03	0.27	-0.10
12	6	0.04	-0.15	0.04	-0.15	-0.09	0.08	0.08	0.06	-0.05
13	6	-0.07	0.12	-0.02	-0.12	-0.05	0.06	0.11	-0.05	-0.02
14	6	0.02	0.09	-0.04	-0.04	0.07	-0.01	0.02	-0.06	0.02
15	1	0.25	-0.03	-0.08	-0.17	-0.07	0.09	-0.12	0.06	0.02
16	1	-0.13	0.22	-0.04	-0.06	0.15	-0.02	0.01	0.18	-0.02
17	6	-0.10	0.05	0.01	0.10	0.02	-0.04	-0.05	0.03	0.00
18	6	-0.05	-0.09	0.05	0.28	0.05	-0.11	-0.12	0.02	0.03
19	1	0.33	-0.36	0.02	-0.19	0.00	0.06	-0.10	0.21	-0.04
20	1	0.18	-0.11	-0.02	0.01	-0.01	0.00	-0.06	0.04	0.01
21	6	0.09	0.10	-0.07	-0.15	-0.13	0.10	0.05	-0.02	-0.01
22	1	0.21	-0.35	0.06	0.02	0.14	-0.06	0.02	-0.05	0.01
23	1	0.19	-0.09	-0.03	-0.44	0.00	0.15	0.17	0.05	-0.07
24	1	-0.07	-0.35	0.15	-0.02	0.24	-0.08	0.06	0.00	-0.02
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

58

59

60

		A			A			A		
Frequencies	--	1644.4238			1662.1145			3182.9385		
Red. masses	--	5.7404			5.9245			1.0891		
Frc consts	--	9.1458			9.6433			6.5009		
IR Inten	--	67.2610			1.5219			1.9943		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	0.08	-0.05	0.06	0.05	-0.04	0.01	0.00	0.00
2	6	0.00	-0.04	0.01	-0.02	-0.01	0.01	-0.06	-0.03	0.05
3	6	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.02	-0.02	0.00	0.02	-0.01
4	6	0.07	-0.05	0.00	0.02	-0.09	0.03	0.00	0.00	0.00
5	1	0.02	0.01	-0.01	0.03	0.02	-0.02	0.03	-0.20	0.09
6	6	-0.12	0.06	0.02	0.03	0.06	-0.03	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.11	-0.08	0.07	-0.12	0.18	-0.02	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.04	-0.05	0.03	-0.09	-0.03	0.04	0.00	0.00	0.00
9	6	0.33	-0.10	-0.08	0.08	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00

10	1	0.06	-0.07	0.00	0.14	-0.04	-0.04	0.00	-0.03	0.01
11	1	-0.02	-0.12	0.05	0.01	-0.08	0.03	-0.14	0.07	0.03
12	6	0.12	0.04	-0.06	0.18	-0.19	0.01	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.02	0.08	-0.02	0.20	-0.21	0.01	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.28	0.17	0.03	-0.12	0.13	-0.01	0.00	0.00	0.00
15	1	-0.38	-0.16	0.19	-0.04	-0.07	0.04	0.00	0.00	0.00
16	1	-0.01	-0.03	0.02	-0.02	-0.03	0.01	0.64	0.38	-0.60
17	6	0.03	-0.19	0.06	-0.17	0.25	-0.03	0.00	0.00	0.00
18	6	-0.02	-0.07	0.03	-0.18	0.09	0.03	0.00	0.00	0.00
19	1	0.07	-0.03	-0.01	-0.23	0.32	-0.03	0.04	0.04	-0.03
20	1	0.10	-0.40	0.11	0.14	-0.23	0.03	0.00	0.00	0.00
21	6	0.03	0.21	-0.09	0.06	-0.18	0.05	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.23	0.12	0.04	0.26	-0.29	0.02	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.02	-0.09	0.04	0.18	0.14	-0.11	0.00	-0.02	0.01
24	1	-0.15	-0.21	0.12	0.20	0.10	-0.10	0.00	0.00	0.00
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

61

62

63

		A			A			A		
Frequencies	--	3205.5893			3206.8327			3210.8620		
Red. masses	--	1.0879			1.0885			1.0902		
Frc consts	--	6.5863			6.5951			6.6223		
IR Inten	--	2.3309			1.4127			0.1336		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.01
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.03	-0.18	0.08	-0.02	0.13	-0.06	-0.03	0.20	-0.10
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.01	0.00
10	1	0.00	-0.04	0.01	0.01	-0.09	0.03	0.00	0.00	0.00
11	1	0.01	-0.01	0.00	-0.05	0.03	0.01	-0.03	0.02	0.01
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.03	-0.03	0.02	0.02	0.02	-0.01	0.03	0.02	-0.02
14	6	0.02	0.02	-0.01	0.04	0.03	-0.02	-0.01	-0.01	0.01
15	1	-0.04	0.25	-0.08	-0.08	0.51	-0.15	0.03	-0.17	0.05
16	1	-0.06	-0.03	0.06	0.04	0.02	-0.03	0.05	0.03	-0.05
17	6	-0.03	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.03	0.03
18	6	-0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00
19	1	0.38	0.29	-0.24	-0.27	-0.21	0.17	-0.31	-0.24	0.19
20	1	-0.27	-0.18	0.16	-0.49	-0.33	0.29	0.10	0.07	-0.06
21	6	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.01
22	1	0.32	0.24	-0.19	-0.02	-0.01	0.01	0.54	0.40	-0.33
23	1	0.07	-0.38	0.11	-0.05	0.25	-0.08	-0.02	0.13	-0.04
24	1	-0.28	0.13	0.05	0.09	-0.04	-0.02	-0.31	0.14	0.05
25	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

64

65

66

		A			A			A		
Frequencies	--	3214.9024			3223.1523			3228.5101		
Red. masses	--	1.0903			1.0932			1.0981		
Frc consts	--	6.6394			6.6916			6.7438		
IR Inten	--	1.1026			5.2479			6.6089		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
2	6	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.05	0.02	0.00	0.01	-0.01
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.00	-0.01	0.01	-0.09	0.56	-0.26	0.02	-0.13	0.06
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.01	-0.07	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00



**Table S17.** Cartesian coordinates of optimized structure for (7-C<sub>1</sub>O)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	-4.959156	0.567784	-0.598892
2	6	0	-4.770191	-0.838802	-0.636075
3	6	0	-3.884496	1.395187	-0.289120
4	6	0	-2.603900	0.839752	-0.000510
5	6	0	-2.410135	-0.582435	-0.022893
6	6	0	-1.491286	1.701695	0.262463
7	1	0	-4.011488	2.474687	-0.267347
8	6	0	-3.522582	-1.400955	-0.355475
9	1	0	-3.424877	-2.480132	-0.393328
10	6	0	-1.092696	-1.119371	0.328410
11	1	0	-5.607039	-1.485564	-0.884274
12	6	0	-0.217183	1.217054	0.520707
13	1	0	-1.661273	2.772937	0.194339
14	1	0	-5.935735	0.989509	-0.816074
15	6	0	-0.016515	-0.226645	0.644086
16	6	0	-0.857144	-2.524822	0.412435
17	6	0	0.914438	2.179013	0.480055
18	6	0	1.210641	-0.782398	1.156426
19	6	0	0.366742	-3.050315	0.822749
20	1	0	-1.655483	-3.216997	0.170191
21	8	0	2.076898	1.821458	0.089343
22	6	0	0.712480	3.637296	0.834096
23	6	0	1.400719	-2.175720	1.237871
24	1	0	1.914987	-0.126249	1.665972
25	1	0	0.508945	-4.125092	0.876571
26	1	0	1.681676	4.079082	1.078652
27	1	0	0.311353	4.186531	-0.029467
28	1	0	0.021316	3.766480	1.672321
29	1	0	2.307458	-2.574695	1.685338
30	47	0	2.686310	-0.252129	-0.732886

**Table S18.** Vibrational frequencies for (7-C<sub>1</sub>O)

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	38.3850			67.2461			85.0191		
Red. masses	--	8.4799			6.1503			4.9975		
Frc consts	--	0.0074			0.0164			0.0213		
IR Inten	--	0.1017			0.5347			0.3670		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.13	0.01	0.20	0.02	-0.03	0.07	0.01	-0.02	0.01
2	6	-0.13	0.02	0.16	0.09	-0.02	-0.13	-0.03	-0.04	0.22
3	6	-0.10	0.01	0.13	-0.03	-0.02	0.18	0.04	0.00	-0.17
4	6	-0.08	0.01	0.02	0.00	0.01	0.11	0.04	0.01	-0.15
5	6	-0.08	0.01	-0.01	0.06	0.02	-0.05	0.03	0.00	-0.01
6	6	-0.06	0.00	-0.04	-0.02	0.04	0.13	0.04	0.02	-0.18
7	1	-0.10	0.01	0.15	-0.08	-0.03	0.31	0.06	0.00	-0.30
8	6	-0.11	0.01	0.06	0.12	0.01	-0.18	-0.02	-0.02	0.19
9	1	-0.11	0.01	0.04	0.18	0.02	-0.32	-0.05	-0.03	0.36
10	6	-0.06	0.01	-0.10	0.07	0.04	-0.06	0.04	0.02	-0.05
11	1	-0.15	0.02	0.22	0.13	-0.03	-0.23	-0.07	-0.05	0.39
12	6	-0.05	0.00	-0.08	0.00	0.06	0.06	0.02	0.03	-0.06
13	1	-0.07	0.00	-0.03	-0.05	0.04	0.18	0.05	0.02	-0.26
14	1	-0.15	0.02	0.29	-0.01	-0.06	0.12	0.00	-0.03	0.01
15	6	-0.06	0.00	-0.09	0.03	0.06	0.03	0.02	0.03	-0.02
16	6	-0.04	0.00	-0.17	0.13	0.05	-0.14	0.09	0.02	-0.15
17	6	-0.05	0.00	-0.12	0.00	0.06	-0.05	0.03	0.03	0.03
18	6	-0.06	-0.01	-0.09	0.02	0.08	0.06	0.01	0.04	0.01
19	6	-0.03	0.00	-0.20	0.13	0.07	-0.13	0.10	0.04	-0.17
20	1	-0.04	0.01	-0.20	0.16	0.03	-0.22	0.13	0.01	-0.23
21	8	-0.04	-0.01	-0.06	-0.03	0.03	-0.10	0.04	0.03	0.06
22	6	-0.07	0.03	-0.22	0.02	0.09	-0.13	0.02	0.01	0.11
23	6	-0.05	-0.01	-0.14	0.08	0.08	-0.01	0.06	0.05	-0.06
24	1	-0.09	-0.02	-0.04	-0.02	0.09	0.11	-0.02	0.04	0.06
25	1	-0.02	0.00	-0.26	0.17	0.07	-0.19	0.15	0.04	-0.26
26	1	-0.08	0.05	-0.26	0.03	0.10	-0.22	0.01	-0.01	0.19
27	1	-0.08	-0.04	-0.26	-0.03	0.02	-0.15	0.08	0.06	0.12
28	1	-0.07	0.08	-0.23	0.07	0.15	-0.11	-0.03	-0.04	0.07
29	1	-0.06	-0.02	-0.13	0.06	0.09	0.02	0.05	0.05	-0.04
30	47	0.15	-0.01	0.09	-0.08	-0.08	0.05	-0.07	-0.03	0.04
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	93.8083			110.0670			117.5481		
Red. masses	--	1.8956			1.5513			4.5385		
Frc consts	--	0.0098			0.0111			0.0369		
IR Inten	--	6.4560			3.8178			2.7909		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.05	-0.02	0.23
2	6	0.01	0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.06
3	6	0.03	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.12
4	6	0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.01	0.03	-0.01	-0.09
5	6	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.05	-0.01	-0.17
6	6	0.02	-0.02	0.02	-0.03	0.01	0.02	0.05	-0.01	-0.13
7	1	0.04	0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	-0.03	-0.02	0.21
8	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.15
9	1	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01	0.06	0.00	-0.27
10	6	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.04	-0.01	-0.16
11	1	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.02	-0.02	-0.03	-0.01	0.10
12	6	0.02	-0.02	0.03	-0.03	0.02	0.01	0.05	-0.01	-0.14
13	1	0.03	-0.02	0.01	-0.03	0.02	0.02	0.04	-0.01	-0.10
14	1	0.03	0.03	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.09	-0.02	0.43
15	6	0.01	-0.03	0.02	-0.01	0.02	0.00	0.04	-0.02	-0.12
16	6	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.03
17	6	0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.04	-0.01	-0.04

18	6	0.01	-0.05	0.02	0.00	0.03	-0.01	-0.02	-0.01	0.01
19	6	-0.01	-0.04	-0.03	0.01	0.03	0.00	-0.06	-0.01	0.16
20	1	-0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.04
21	8	0.04	-0.03	0.11	-0.05	0.02	-0.10	0.06	0.02	0.00
22	6	-0.02	0.03	-0.17	0.02	-0.01	0.11	0.04	-0.04	0.07
23	6	0.00	-0.05	-0.01	0.01	0.04	-0.01	-0.08	-0.01	0.17
24	1	0.02	-0.06	0.02	-0.01	0.04	-0.01	-0.04	0.01	0.02
25	1	-0.01	-0.04	-0.05	0.02	0.03	0.01	-0.11	-0.01	0.28
26	1	-0.09	-0.05	0.24	-0.03	-0.19	0.63	0.01	-0.10	0.28
27	1	0.47	-0.01	-0.43	0.56	0.15	-0.04	0.21	0.06	0.05
28	1	-0.39	0.19	-0.51	-0.37	0.01	-0.22	-0.10	-0.09	-0.03
29	1	0.00	-0.06	-0.02	0.02	0.04	-0.01	-0.13	0.01	0.29
30	47	-0.02	0.03	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.02	0.02	0.01

			7			8			9	
			A			A			A	
Frequencies	--		133.5288			179.9640			206.8942	
Red. masses	--		11.5873			4.7921			4.3127	
Frc consts	--		0.1217			0.0914			0.1088	
IR Inten	--		5.1069			10.3690			2.4537	

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.10	-0.09	0.06	-0.02	-0.03	-0.03	0.05	0.12	0.00
2	6	-0.02	-0.08	-0.01	-0.02	-0.03	0.03	-0.02	0.11	0.06
3	6	-0.13	-0.04	0.03	-0.02	-0.01	-0.04	0.09	0.06	-0.03
4	6	-0.08	0.03	-0.03	-0.02	0.00	-0.01	0.05	-0.02	-0.02
5	6	-0.02	0.04	-0.05	-0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.02	-0.04
6	6	-0.10	0.08	-0.03	-0.03	0.01	0.03	0.02	-0.04	0.06
7	1	-0.20	-0.05	0.06	-0.03	-0.01	-0.06	0.16	0.07	-0.04
8	6	0.02	-0.01	-0.06	-0.02	-0.01	0.03	-0.03	0.04	0.02
9	1	0.09	-0.01	-0.11	-0.02	-0.01	0.09	-0.10	0.03	0.06
10	6	-0.01	0.09	-0.03	-0.01	0.00	-0.02	0.04	-0.03	-0.06
11	1	0.01	-0.12	-0.01	-0.03	-0.04	0.08	-0.06	0.14	0.13
12	6	-0.09	0.11	-0.01	-0.05	0.00	0.10	0.00	-0.04	0.08
13	1	-0.14	0.07	-0.02	-0.01	0.02	0.00	0.01	-0.04	0.10
14	1	-0.13	-0.14	0.12	-0.02	-0.03	-0.05	0.06	0.16	0.00
15	6	-0.05	0.12	-0.02	-0.06	0.00	0.13	0.02	-0.04	0.02
16	6	0.03	0.10	0.02	0.06	0.00	-0.20	0.07	-0.03	-0.11
17	6	-0.04	0.05	0.19	0.01	-0.08	0.01	-0.08	0.03	0.04
18	6	-0.03	0.17	-0.01	-0.11	0.02	0.24	0.01	-0.02	0.08
19	6	0.03	0.14	0.07	0.02	0.02	-0.04	0.03	-0.02	0.05
20	1	0.05	0.07	0.03	0.15	-0.01	-0.44	0.12	-0.04	-0.25
21	8	0.04	-0.09	0.55	-0.04	-0.17	-0.06	-0.08	0.13	-0.03
22	6	-0.06	0.09	0.01	0.19	-0.04	-0.04	-0.31	0.02	0.01
23	6	0.00	0.18	0.05	-0.09	0.03	0.22	-0.02	-0.02	0.16
24	1	-0.03	0.20	-0.06	-0.12	0.04	0.23	-0.01	0.01	0.07
25	1	0.05	0.15	0.12	0.07	0.02	-0.15	0.03	-0.02	0.06
26	1	-0.08	0.13	0.01	0.26	-0.14	-0.14	-0.39	0.18	0.04
27	1	-0.05	-0.01	-0.06	0.18	-0.04	-0.03	-0.35	-0.06	-0.02
28	1	-0.10	0.18	-0.03	0.27	0.07	0.01	-0.36	-0.08	-0.02
29	1	0.01	0.22	0.08	-0.15	0.03	0.34	-0.06	-0.01	0.26
30	47	0.07	-0.10	-0.10	0.02	0.04	-0.04	0.02	-0.04	-0.03

			10			11			12	
			A			A			A	
Frequencies	--		244.0653			261.8021			279.5287	
Red. masses	--		4.7508			4.8445			4.1856	
Frc consts	--		0.1667			0.1956			0.1927	
IR Inten	--		1.5389			2.8744			5.0003	

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.15	0.03	0.04	0.01	-0.19	-0.01	0.05	-0.01
2	6	-0.08	0.15	-0.09	-0.01	0.00	-0.06	-0.07	0.03	0.13
3	6	0.02	0.05	0.07	-0.03	-0.02	0.10	0.05	0.01	-0.13
4	6	-0.01	-0.05	0.01	-0.05	-0.03	0.19	0.02	-0.03	-0.07
5	6	-0.06	-0.07	0.03	-0.05	-0.03	0.11	0.02	-0.03	-0.15
6	6	0.00	-0.06	-0.11	-0.03	-0.01	0.12	-0.06	-0.01	0.21

7	1	0.12	0.06	0.13	-0.03	-0.02	0.13	0.11	0.02	-0.19
8	6	-0.12	0.03	-0.06	-0.08	-0.02	0.19	-0.04	0.00	-0.05
9	1	-0.19	0.02	-0.12	-0.11	-0.03	0.31	-0.07	0.00	-0.05
10	6	-0.04	-0.09	0.06	0.02	-0.02	-0.13	0.03	-0.04	-0.13
11	1	-0.10	0.21	-0.18	0.01	0.01	-0.15	-0.14	0.05	0.33
12	6	-0.03	-0.07	-0.10	0.03	0.01	-0.15	-0.05	-0.01	0.13
13	1	0.01	-0.06	-0.20	-0.08	-0.01	0.24	-0.12	-0.01	0.43
14	1	-0.01	0.22	0.06	0.10	0.04	-0.43	0.00	0.07	0.02
15	6	-0.06	-0.04	0.01	0.04	0.00	-0.24	0.01	-0.02	-0.11
16	6	0.11	-0.07	0.08	0.06	-0.01	-0.14	0.04	-0.03	0.04
17	6	-0.01	-0.11	-0.05	0.04	0.01	-0.06	-0.04	-0.02	0.08
18	6	-0.02	0.10	0.04	0.01	0.03	-0.13	0.04	0.03	-0.15
19	6	0.22	0.06	-0.01	0.00	0.01	0.06	0.04	0.01	0.12
20	1	0.16	-0.16	0.14	0.09	-0.03	-0.20	0.03	-0.07	0.16
21	8	0.02	-0.11	0.04	0.09	0.02	0.05	-0.10	-0.09	-0.01
22	6	-0.02	-0.14	0.00	0.04	-0.01	0.01	0.11	0.03	-0.04
23	6	0.16	0.14	-0.01	-0.05	0.04	0.13	0.08	0.05	-0.06
24	1	-0.09	0.19	0.02	-0.04	0.08	-0.12	0.00	0.07	-0.15
25	1	0.33	0.07	-0.05	-0.01	0.02	0.17	0.02	0.02	0.30
26	1	-0.04	-0.14	0.04	0.04	-0.04	0.07	0.18	-0.06	-0.16
27	1	-0.02	-0.10	0.02	0.07	0.04	0.03	0.12	-0.03	-0.08
28	1	-0.05	-0.19	-0.01	0.02	-0.05	0.00	0.18	0.21	-0.01
29	1	0.20	0.21	-0.03	-0.12	0.09	0.31	0.11	0.10	-0.06
30	47	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.02
			13			14			15	
			A			A			A	
Frequencies	--	338.0517			387.1741			410.3202		
Red. masses	--	5.1842			5.0582			6.3788		
Frc consts	--	0.3491			0.4467			0.6328		
IR Inten	--	2.5112			2.6944			4.6494		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	0.04	0.01	0.01	-0.05	0.00	0.28	0.02	0.06
2	6	-0.14	0.03	-0.06	-0.08	-0.07	0.09	0.16	0.01	0.01
3	6	0.03	-0.06	0.02	0.04	-0.04	-0.11	0.26	-0.03	0.11
4	6	0.00	-0.13	-0.02	0.02	-0.02	0.06	0.16	-0.11	0.01
5	6	-0.09	-0.15	-0.01	-0.05	-0.02	-0.05	0.05	-0.11	0.01
6	6	0.00	-0.08	-0.04	0.03	-0.01	0.21	0.01	0.02	-0.04
7	1	0.10	-0.05	0.06	0.04	-0.04	-0.26	0.33	-0.03	0.17
8	6	-0.17	-0.07	-0.05	-0.03	-0.05	-0.12	0.07	-0.11	0.06
9	1	-0.25	-0.08	-0.07	0.03	-0.04	-0.23	0.01	-0.11	0.09
10	6	-0.04	-0.07	0.03	-0.09	0.00	0.01	-0.04	-0.07	-0.03
11	1	-0.18	0.10	-0.11	-0.13	-0.06	0.23	0.10	0.12	-0.03
12	6	0.04	0.05	0.04	0.09	-0.01	0.01	-0.05	0.05	-0.03
13	1	-0.07	-0.09	-0.11	-0.04	-0.02	0.36	-0.11	-0.01	-0.07
14	1	-0.02	0.13	0.05	0.02	-0.02	-0.01	0.30	0.07	0.06
15	6	-0.03	-0.01	0.06	-0.07	0.00	-0.01	-0.15	0.05	-0.07
16	6	0.02	-0.07	0.00	-0.08	0.02	0.05	-0.12	-0.07	0.03
17	6	0.05	0.18	0.05	0.18	-0.05	-0.03	-0.07	0.03	0.02
18	6	-0.03	-0.04	0.04	-0.12	0.09	0.09	-0.22	0.12	-0.01
19	6	0.04	-0.07	0.00	-0.01	0.09	-0.09	-0.08	0.02	-0.06
20	1	0.03	-0.07	-0.04	-0.08	-0.01	0.15	-0.15	-0.06	0.12
21	8	0.05	0.23	0.01	0.26	0.12	-0.03	-0.11	-0.05	0.02
22	6	0.19	0.26	0.02	-0.06	-0.11	-0.01	0.01	0.05	0.01
23	6	0.00	-0.04	0.02	-0.05	0.11	-0.02	-0.17	0.14	-0.09
24	1	-0.03	-0.03	0.03	-0.18	0.13	0.11	-0.24	0.13	0.01
25	1	0.07	-0.07	-0.05	0.06	0.10	-0.16	0.04	0.04	-0.04
26	1	0.27	0.13	-0.06	-0.17	0.09	0.07	0.04	-0.01	-0.01
27	1	0.22	0.26	0.01	-0.11	-0.18	-0.03	0.03	0.07	0.01
28	1	0.25	0.40	0.05	-0.15	-0.28	-0.06	0.03	0.11	0.02
29	1	0.02	-0.02	0.01	-0.05	0.11	-0.02	-0.15	0.20	-0.07
30	47	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
			16			17			18	
			A			A			A	

Frequencies	--	438.6776		460.7009		477.2970				
Red. masses	--	3.9248		3.5462		5.2244				
Frc consts	--	0.4450		0.4435		0.7012				
IR Inten	--	1.0408		4.3648		2.9753				
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.03	-0.03	-0.01	0.01	-0.12	-0.03	-0.05	0.04
2	6	-0.03	-0.03	-0.11	0.00	0.01	0.01	0.08	-0.03	-0.03
3	6	-0.02	-0.04	0.14	-0.08	0.01	0.13	-0.08	0.06	-0.03
4	6	0.05	-0.01	-0.11	-0.01	0.03	-0.07	0.01	0.18	-0.04
5	6	-0.02	-0.01	-0.10	0.06	0.04	-0.19	0.02	0.12	0.04
6	6	0.08	-0.02	-0.07	-0.01	0.02	0.04	0.02	0.17	-0.01
7	1	-0.11	-0.06	0.40	-0.15	-0.01	0.38	-0.20	0.05	-0.03
8	6	-0.09	-0.04	0.12	-0.01	0.03	0.11	0.09	0.10	0.05
9	1	-0.15	-0.06	0.40	-0.07	0.01	0.36	0.20	0.11	0.11
10	6	-0.02	0.04	-0.08	0.05	-0.02	-0.13	-0.09	-0.18	0.00
11	1	-0.03	-0.01	-0.16	-0.01	-0.03	0.12	0.15	-0.10	-0.09
12	6	0.03	-0.02	0.20	0.00	0.00	-0.05	-0.05	-0.02	0.05
13	1	0.10	-0.03	-0.17	-0.02	0.03	0.20	0.12	0.19	0.01
14	1	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.20	-0.08	-0.14	0.10
15	6	-0.04	0.01	0.10	0.03	-0.02	-0.05	-0.18	-0.09	-0.04
16	6	-0.02	0.06	-0.08	-0.03	-0.03	0.16	0.05	-0.25	-0.01
17	6	0.10	-0.06	0.13	-0.01	0.02	-0.02	0.03	-0.03	0.09
18	6	0.02	0.05	-0.07	-0.08	-0.03	0.23	-0.16	-0.01	-0.10
19	6	-0.07	0.09	0.11	0.05	-0.04	-0.07	0.11	-0.14	0.06
20	1	0.02	0.04	-0.17	-0.11	-0.03	0.43	0.14	-0.34	-0.05
21	8	0.06	0.02	-0.07	-0.01	0.01	0.01	0.06	0.14	-0.02
22	6	-0.02	-0.07	-0.02	0.00	0.03	0.01	0.02	0.00	-0.02
23	6	0.02	0.07	-0.09	0.05	-0.04	-0.04	0.00	0.02	0.01
24	1	0.05	0.06	-0.11	-0.14	-0.04	0.33	-0.21	0.07	-0.13
25	1	-0.13	0.09	0.26	0.06	-0.04	-0.13	0.23	-0.12	0.12
26	1	-0.09	0.10	-0.07	0.01	0.00	0.01	0.04	0.02	-0.10
27	1	-0.06	-0.26	-0.13	0.00	0.06	0.03	0.04	-0.11	-0.10
28	1	-0.08	-0.02	-0.08	0.01	0.02	0.02	0.04	0.14	-0.03
29	1	0.07	0.04	-0.20	0.07	-0.06	-0.10	0.05	0.19	0.06
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
			19			20			21	
			A			A			A	
Frequencies	--	517.3501		547.6380		564.7057				
Red. masses	--	3.4929		3.1956		4.3762				
Frc consts	--	0.5508		0.5647		0.8222				
IR Inten	--	4.1853		4.9927		16.4118				
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.02	-0.12	0.00	-0.01	-0.02	0.04	0.03	-0.04
2	6	-0.01	0.01	0.15	-0.01	-0.02	0.06	0.11	0.02	0.06
3	6	-0.01	0.00	0.05	-0.02	0.02	-0.01	-0.04	0.09	0.04
4	6	-0.05	-0.01	0.17	-0.05	0.01	0.16	-0.06	0.00	-0.06
5	6	0.03	-0.01	-0.05	-0.04	0.03	0.11	0.02	0.02	-0.09
6	6	-0.03	0.04	-0.06	0.08	-0.06	-0.12	-0.04	-0.14	0.03
7	1	0.03	0.01	-0.03	0.02	0.03	-0.25	-0.05	0.08	0.17
8	6	0.04	0.01	-0.08	0.02	0.01	-0.04	0.08	-0.03	0.00
9	1	0.05	0.01	-0.18	0.13	0.03	-0.34	0.03	-0.03	0.14
10	6	0.03	-0.03	-0.07	0.02	0.00	-0.17	-0.07	-0.01	0.10
11	1	-0.05	0.00	0.32	0.02	-0.02	-0.02	0.07	0.02	0.20
12	6	-0.04	0.05	-0.01	0.02	-0.09	0.04	-0.04	-0.18	-0.08
13	1	-0.02	0.02	-0.33	0.20	-0.06	-0.36	0.05	-0.12	0.18
14	1	0.09	0.03	-0.35	0.04	-0.02	-0.21	0.00	-0.08	-0.04
15	6	-0.08	0.03	0.18	0.05	-0.06	-0.10	-0.01	-0.10	0.09
16	6	0.04	-0.05	-0.09	-0.05	0.02	0.01	-0.08	0.02	-0.04
17	6	0.00	0.03	-0.12	-0.02	-0.05	0.18	-0.15	-0.07	-0.05
18	6	-0.04	0.00	0.04	-0.01	0.02	0.09	0.09	0.04	-0.02
19	6	-0.04	-0.05	0.16	-0.01	0.08	-0.02	-0.05	0.12	-0.01
20	1	0.06	-0.04	-0.18	-0.11	-0.01	0.31	0.02	-0.03	-0.22
21	8	0.05	0.00	0.03	-0.06	0.06	-0.03	-0.01	0.22	0.07



22	6	0.00	0.00	0.01	0.03	0.00	0.00	0.09	-0.08	-0.04
23	6	0.04	-0.01	-0.14	0.03	0.03	-0.02	0.00	0.05	0.02
24	1	0.04	-0.04	-0.03	-0.11	0.05	0.19	0.10	0.10	-0.11
25	1	-0.08	-0.05	0.34	-0.05	0.08	0.10	0.00	0.13	-0.10
26	1	0.00	-0.04	0.10	0.06	0.01	-0.17	0.28	-0.45	-0.15
27	1	-0.01	0.16	0.12	0.07	-0.23	-0.17	0.21	0.08	0.01
28	1	0.00	-0.16	0.03	0.04	0.29	-0.05	0.24	0.15	0.05
29	1	0.16	0.02	-0.34	-0.01	-0.02	0.02	-0.01	-0.05	-0.04
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
			22			23			24	
			A			A			A	
Frequencies	--	595.2461			613.6506			634.9893		
Red. masses	--	3.5132			5.0904			6.5900		
Frc consts	--	0.7334			1.1294			1.5655		
IR Inten	--	3.7336			6.2253			5.6028		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.07	0.02	0.16	0.11	-0.11	0.04	0.19	0.02	0.07
2	6	0.08	0.04	-0.13	-0.12	-0.13	-0.05	0.13	-0.03	0.02
3	6	0.01	0.02	-0.14	0.08	0.00	0.00	0.00	0.25	0.00
4	6	-0.03	-0.03	-0.03	0.10	0.14	0.03	-0.12	0.04	-0.02
5	6	0.01	-0.02	0.11	-0.13	0.11	-0.02	-0.17	-0.03	-0.03
6	6	-0.06	-0.04	0.07	0.20	0.03	0.06	-0.09	0.00	-0.01
7	1	0.09	0.03	-0.28	-0.10	-0.02	-0.06	-0.03	0.24	-0.04
8	6	0.00	0.00	0.12	-0.09	0.00	-0.01	-0.01	-0.28	0.00
9	1	-0.03	0.00	0.07	0.09	0.01	0.05	0.01	-0.27	-0.02
10	6	0.07	-0.01	-0.14	-0.16	-0.01	-0.04	-0.10	0.15	-0.06
11	1	0.17	0.04	-0.43	-0.16	-0.07	-0.08	-0.03	0.20	-0.05
12	6	-0.02	-0.01	0.01	0.11	-0.11	-0.03	-0.05	0.05	-0.01
13	1	-0.08	-0.04	0.12	0.36	0.05	0.12	-0.13	-0.01	-0.01
14	1	-0.13	-0.03	0.33	0.14	-0.02	0.09	0.12	-0.15	0.05
15	6	0.03	0.00	0.00	-0.04	-0.14	0.00	-0.10	0.04	-0.05
16	6	-0.01	-0.01	-0.07	-0.03	0.02	-0.05	0.17	0.21	0.05
17	6	-0.03	0.00	-0.11	-0.08	0.07	-0.15	0.03	-0.02	0.04
18	6	-0.04	0.02	0.16	-0.01	-0.05	0.04	-0.16	-0.18	-0.01
19	6	-0.06	0.01	0.09	0.01	0.12	0.05	0.08	-0.05	0.05
20	1	-0.05	0.00	0.04	0.10	-0.11	-0.09	0.19	0.19	0.06
21	8	0.04	0.04	0.03	-0.08	-0.08	0.06	0.03	0.04	-0.02
22	6	0.01	-0.03	-0.01	-0.04	0.14	0.01	0.01	-0.05	0.00
23	6	0.04	0.01	-0.13	0.13	-0.01	0.00	0.14	-0.16	0.03
24	1	-0.06	0.00	0.21	-0.07	0.08	-0.04	-0.20	-0.13	-0.01
25	1	-0.11	0.02	0.30	-0.04	0.12	0.04	-0.19	-0.09	-0.03
26	1	0.05	-0.14	0.04	0.04	-0.07	0.12	-0.01	0.02	-0.04
27	1	0.03	0.15	0.10	-0.01	0.47	0.21	0.01	-0.16	-0.07
28	1	0.06	-0.12	0.04	0.05	-0.03	0.12	-0.02	0.01	-0.04
29	1	0.08	-0.03	-0.27	0.16	-0.06	-0.09	0.20	-0.02	0.05
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			25			26			27	
			A			A			A	
Frequencies	--	657.4456			670.9555			722.3440		
Red. masses	--	5.0533			3.0634			5.4608		
Frc consts	--	1.2869			0.8125			1.6788		
IR Inten	--	9.2663			14.9151			2.5521		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.02	0.05
2	6	-0.17	-0.05	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.07	-0.02
3	6	0.15	-0.19	0.02	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.16	0.00
4	6	0.14	0.01	0.05	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.11	0.01
5	6	0.03	0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.08	-0.04	-0.03
6	6	-0.02	0.20	0.00	0.01	0.00	-0.04	-0.08	0.23	-0.01
7	1	0.13	-0.20	-0.03	-0.01	0.01	0.01	-0.11	0.15	-0.07
8	6	-0.08	0.10	-0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.11	-0.20	-0.02
9	1	-0.02	0.11	0.00	0.02	-0.01	-0.07	-0.09	-0.20	-0.07
10	6	0.04	0.07	0.00	0.03	0.00	-0.11	0.03	-0.10	-0.04

11	1	-0.15	-0.06	-0.08	0.01	0.01	-0.05	-0.20	0.14	-0.11
12	6	-0.08	0.05	-0.07	-0.04	0.01	0.28	-0.08	0.09	-0.04
13	1	-0.06	0.19	0.01	0.09	-0.01	-0.38	-0.10	0.23	0.00
14	1	0.14	0.20	0.05	0.01	-0.01	-0.04	0.14	-0.05	0.01
15	6	-0.01	0.07	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.11	0.02	0.06
16	6	0.08	0.10	0.02	-0.01	0.01	0.07	-0.12	-0.20	-0.03
17	6	-0.14	-0.10	0.02	-0.05	0.01	-0.18	0.01	-0.01	0.02
18	6	-0.03	-0.05	0.02	0.02	0.00	-0.11	0.30	0.09	0.08
19	6	0.01	-0.05	0.02	0.05	-0.01	-0.11	-0.04	-0.01	-0.05
20	1	0.03	0.17	0.00	-0.11	0.01	0.40	-0.15	-0.23	0.11
21	8	-0.06	0.18	0.05	0.04	0.03	0.05	0.01	0.02	-0.01
22	6	0.04	-0.23	-0.05	0.00	-0.05	-0.04	0.01	-0.06	0.00
23	6	0.03	-0.07	0.00	-0.04	0.00	0.09	-0.01	0.02	0.02
24	1	0.00	-0.09	0.03	-0.06	0.00	-0.01	0.34	-0.01	0.17
25	1	-0.11	-0.07	-0.02	0.02	-0.01	-0.03	0.12	0.01	0.08
26	1	0.18	-0.46	-0.20	0.06	-0.25	0.10	-0.02	0.01	-0.03
27	1	0.15	-0.22	-0.10	0.02	0.34	0.21	-0.01	-0.15	-0.06
28	1	0.14	0.06	-0.02	0.08	-0.30	0.07	-0.02	-0.03	-0.04
29	1	0.05	-0.04	-0.01	-0.16	0.03	0.34	-0.12	-0.21	0.04
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		28			29			30		
		A			A			A		
Frequencies	--	768.8319			783.0008			801.5626		
Red. masses	--	4.3747			4.5107			1.3491		
Frc consts	--	1.5236			1.6294			0.5107		
IR Inten	--	9.2660			7.9957			41.2519		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.00	0.10	0.03	0.02	-0.09	0.01	0.00	-0.02
2	6	0.06	0.04	-0.06	0.04	0.05	0.07	0.02	0.00	-0.08
3	6	0.06	-0.09	-0.05	0.04	-0.11	0.05	0.02	0.01	-0.07
4	6	-0.03	-0.06	0.16	0.04	-0.06	-0.16	-0.03	0.00	0.11
5	6	0.05	0.02	-0.17	-0.03	-0.01	0.17	0.00	0.00	-0.01
6	6	-0.10	0.04	-0.01	-0.15	0.10	-0.03	0.00	0.00	0.00
7	1	0.22	-0.07	-0.42	0.04	-0.12	0.46	-0.06	-0.01	0.22
8	6	0.02	0.08	0.10	0.06	0.06	-0.06	0.01	0.00	-0.05
9	1	0.00	0.08	0.21	0.08	0.07	-0.19	-0.13	-0.03	0.49
10	6	-0.05	-0.03	-0.14	-0.11	-0.05	0.03	0.00	0.00	0.00
11	1	0.15	0.00	-0.24	0.04	-0.01	0.25	-0.13	-0.03	0.50
12	6	-0.08	0.00	-0.10	-0.13	0.05	0.08	0.00	0.01	0.02
13	1	-0.17	0.02	-0.13	-0.29	0.08	-0.02	0.05	-0.01	-0.28
14	1	0.04	0.05	-0.06	0.00	0.05	0.10	-0.13	-0.03	0.52
15	6	-0.12	-0.07	0.17	-0.01	-0.09	-0.14	0.02	0.00	-0.04
16	6	-0.09	0.02	0.06	-0.09	0.00	-0.09	-0.01	-0.01	0.02
17	6	0.05	0.00	0.04	0.04	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
18	6	0.07	-0.07	-0.09	0.04	-0.08	0.07	0.00	0.00	0.01
19	6	0.01	0.13	-0.07	-0.04	0.18	0.01	0.00	0.00	0.01
20	1	-0.01	-0.09	0.12	-0.01	-0.13	0.04	0.02	-0.01	-0.08
21	8	0.04	-0.02	-0.03	0.07	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
22	6	0.01	0.06	0.03	0.01	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00
23	6	0.09	-0.06	0.13	0.19	-0.08	0.03	0.00	0.00	0.00
24	1	0.09	0.03	-0.24	-0.12	0.04	0.15	-0.01	0.00	0.02
25	1	-0.03	0.12	-0.23	-0.19	0.16	0.11	0.03	0.00	-0.08
26	1	-0.06	0.22	0.01	-0.05	0.13	0.06	0.00	0.01	-0.01
27	1	-0.04	-0.10	-0.06	-0.05	0.03	0.03	0.00	-0.03	-0.01
28	1	-0.07	0.08	-0.03	-0.03	-0.10	-0.01	-0.01	0.01	-0.01
29	1	0.08	-0.16	0.07	0.08	-0.25	0.11	0.02	-0.01	-0.05
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		31			32			33		
		A			A			A		
Frequencies	--	812.3718			859.6421			883.8541		
Red. masses	--	1.4530			1.9638			5.1875		
Frc consts	--	0.5650			0.8551			2.3876		
IR Inten	--	105.1002			5.8699			0.4197		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.06	-0.26	0.10	-0.06
2	6	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.02	0.13	0.11	0.03
3	6	0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.04	-0.08	-0.05	-0.02
4	6	0.01	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	0.06	0.10	0.02	0.05
5	6	-0.01	0.01	0.03	0.04	0.00	-0.13	0.05	-0.17	0.01
6	6	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.01	-0.02	0.18	0.25	0.03
7	1	-0.05	-0.01	0.19	0.12	0.02	-0.43	0.02	-0.03	-0.02
8	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.26	-0.01
9	1	0.01	0.01	0.03	-0.09	-0.02	0.31	-0.29	-0.29	-0.03
10	6	0.00	0.01	-0.01	-0.05	0.00	0.16	0.01	-0.04	0.00
11	1	-0.04	-0.02	0.14	0.02	0.01	-0.07	0.12	0.08	0.10
12	6	0.01	-0.03	-0.08	-0.01	0.01	0.06	0.11	0.03	-0.03
13	1	0.00	-0.02	0.11	0.02	0.01	-0.16	0.27	0.27	0.13
14	1	-0.03	-0.01	0.19	0.07	0.02	-0.29	-0.33	-0.05	-0.05
15	6	-0.04	0.00	0.11	0.03	-0.01	-0.11	-0.04	-0.02	0.03
16	6	0.04	0.01	-0.05	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	0.03	-0.02
17	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.01
18	6	0.01	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.02	-0.05	-0.06	-0.02
19	6	0.03	-0.01	-0.07	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.12	-0.03
20	1	-0.12	0.02	0.46	0.02	-0.02	-0.07	-0.03	0.01	0.11
21	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.01	0.02
22	6	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	-0.02
23	6	0.00	0.00	-0.04	0.05	0.00	-0.08	0.04	-0.02	0.02
24	1	-0.07	-0.05	0.14	-0.19	-0.03	0.34	-0.02	0.02	-0.16
25	1	-0.20	-0.01	0.55	-0.13	0.01	0.33	-0.13	0.11	0.06
26	1	0.00	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.05	-0.20	-0.05
27	1	0.00	-0.03	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.05	0.07	0.02
28	1	-0.01	0.06	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.06	0.05	0.04
29	1	-0.23	0.03	0.44	-0.19	0.00	0.42	0.02	-0.07	0.04
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

34

35

36

		A	A	A
Frequencies	--	921.9290	940.1399	950.1244
Red. masses	--	1.4936	2.0648	2.3663
Frc consts	--	0.7480	1.0753	1.2586
IR Inten	--	2.1348	12.5087	5.9709

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01
2	6	0.01	0.00	-0.05	-0.01	0.01	0.00	0.03	0.00	0.01
3	6	-0.02	0.00	0.09	0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00
4	6	0.01	0.00	-0.05	0.01	0.02	0.00	0.01	-0.02	-0.01
5	6	-0.03	0.00	0.09	0.01	-0.02	0.04	-0.05	0.02	0.03
6	6	0.00	0.00	-0.06	-0.02	0.07	-0.02	0.05	-0.07	-0.02
7	1	0.12	0.02	-0.50	0.00	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00
8	6	0.03	0.01	-0.10	0.00	-0.03	-0.01	0.01	0.02	0.00
9	1	-0.13	-0.02	0.50	-0.04	-0.04	-0.05	0.04	0.03	-0.01
10	6	0.02	0.00	-0.05	0.05	0.01	-0.05	-0.04	0.01	-0.09
11	1	-0.09	-0.02	0.34	-0.03	0.03	0.00	0.05	-0.04	0.04
12	6	-0.01	-0.01	0.01	-0.07	-0.11	-0.01	0.09	0.11	-0.01
13	1	-0.09	0.01	0.44	0.06	0.09	0.13	-0.12	-0.08	0.24
14	1	0.07	0.01	-0.22	0.00	0.03	0.05	-0.04	-0.04	0.03
15	6	-0.01	0.00	0.03	-0.02	-0.05	0.03	-0.04	0.07	0.06
16	6	0.01	0.01	0.00	0.02	0.06	0.10	-0.08	-0.07	0.06
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.01	0.11	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.05	0.02	-0.04	0.03	-0.01	-0.04
19	6	0.01	0.00	-0.01	-0.03	-0.03	0.04	-0.01	0.00	0.04
20	1	-0.02	0.01	0.10	0.14	0.13	-0.46	0.11	-0.13	-0.41
21	8	0.01	0.00	0.00	0.06	-0.02	-0.02	-0.09	0.02	0.03
22	6	0.00	0.01	-0.01	-0.04	0.11	0.02	0.05	-0.12	-0.03
23	6	-0.02	0.00	0.02	-0.01	0.02	-0.08	0.09	-0.02	-0.04
24	1	0.06	0.01	-0.09	-0.25	-0.05	0.47	-0.21	-0.06	0.36
25	1	0.00	0.00	0.01	0.05	-0.03	-0.31	0.11	0.00	-0.24

26	1	0.00	-0.02	0.02	0.02	-0.03	0.01	-0.03	0.02	0.01
27	1	0.00	0.05	0.03	0.02	0.20	0.05	-0.03	-0.19	-0.03
28	1	0.01	-0.03	0.01	0.04	0.18	0.08	-0.04	-0.25	-0.09
29	1	0.05	-0.01	-0.12	-0.20	0.05	0.33	-0.14	0.01	0.47
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37										
A										
Frequencies	--	985.3982			1007.9567			1021.6207		
Red. masses	--	1.6900			3.3255			1.4514		
Frc consts	--	0.9668			1.9906			0.8925		
IR Inten	--	13.9487			1.0148			4.7698		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.00	-0.05	0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.05
2	6	0.00	0.00	-0.02	-0.14	-0.11	-0.03	-0.01	0.01	0.09
3	6	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.16	0.00	0.03	-0.01	-0.10
4	6	-0.03	0.00	0.10	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.05
5	6	0.02	0.00	-0.06	0.15	-0.06	0.05	-0.02	0.00	0.01
6	6	0.02	0.00	-0.17	-0.03	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.06
7	1	0.01	0.00	-0.04	-0.04	0.16	0.01	-0.13	-0.04	0.52
8	6	-0.02	0.00	0.07	0.00	0.02	-0.01	0.02	0.01	-0.09
9	1	0.08	0.02	-0.32	0.03	0.01	0.01	-0.12	-0.02	0.43
10	6	-0.01	0.00	0.04	0.17	-0.06	0.02	-0.01	0.00	-0.01
11	1	-0.02	0.00	0.07	-0.14	-0.10	-0.07	0.12	0.05	-0.46
12	6	-0.02	0.00	0.06	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.02
13	1	-0.16	0.03	0.76	-0.06	-0.01	0.03	-0.06	0.01	0.27
14	1	-0.09	-0.02	0.40	0.03	0.04	0.03	0.07	0.01	-0.28
15	6	0.01	0.00	-0.02	0.04	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01
16	6	0.01	0.00	-0.02	-0.05	-0.03	0.06	0.00	0.00	0.03
17	6	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
18	6	0.00	0.00	0.01	-0.16	-0.13	0.00	0.01	0.01	0.02
19	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.18	-0.03	0.01	-0.01	-0.03
20	1	-0.02	0.01	0.05	0.09	-0.04	-0.32	0.05	0.00	-0.12
21	8	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	6	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02
23	6	0.00	0.00	0.01	0.04	0.00	-0.06	-0.01	0.00	0.00
24	1	0.02	0.00	-0.03	0.17	-0.08	-0.54	0.07	0.01	-0.08
25	1	-0.02	0.00	0.05	-0.04	0.19	0.12	-0.06	-0.01	0.18
26	1	0.00	-0.04	0.06	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.04
27	1	-0.02	0.13	0.06	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.06	0.03
28	1	0.03	-0.12	0.02	0.00	0.03	0.01	0.01	-0.07	0.01
29	1	0.03	-0.01	-0.06	-0.19	0.03	0.42	0.00	-0.01	-0.03
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40										
A										
Frequencies	--	1030.2947			1039.4447			1050.1820		
Red. masses	--	1.6139			1.7588			1.4239		
Frc consts	--	1.0094			1.1196			0.9252		
IR Inten	--	3.0324			26.8316			13.4117		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.02	-0.03
2	6	-0.06	-0.05	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.04	0.02
3	6	0.00	0.07	-0.03	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.04	0.02
4	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.00
5	6	0.07	-0.03	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01
6	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.03	0.02	0.00	-0.02	0.01
7	1	-0.02	0.07	0.15	0.03	-0.01	-0.10	0.08	0.05	-0.09
8	6	0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
9	1	0.00	-0.01	0.13	0.02	-0.01	-0.07	0.07	0.01	0.04
10	6	0.05	-0.03	0.04	0.01	-0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.00
11	1	-0.03	-0.06	-0.09	-0.02	0.03	0.02	0.04	-0.08	-0.12
12	6	-0.01	-0.01	-0.01	-0.05	-0.07	-0.01	0.03	0.05	0.00
13	1	0.00	0.01	0.07	0.08	0.04	-0.06	-0.06	-0.03	-0.03
14	1	0.03	0.04	-0.12	-0.02	0.02	0.09	-0.05	0.01	0.16
41										
A										
42										
A										

15	6	-0.01	-0.01	0.02	0.00	-0.08	0.00	-0.02	0.04	0.00
16	6	0.04	0.01	-0.08	0.05	0.05	0.08	-0.03	-0.02	0.04
17	6	0.01	0.02	0.00	0.01	0.05	-0.01	0.00	-0.01	0.00
18	6	-0.01	-0.03	-0.08	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.05
19	6	-0.03	0.07	0.07	0.03	0.03	-0.06	0.03	0.03	-0.07
20	1	-0.11	0.00	0.46	0.19	0.02	-0.29	0.10	-0.07	-0.25
21	8	-0.03	0.01	0.01	-0.06	0.03	0.03	0.02	-0.02	-0.01
22	6	0.04	-0.01	-0.01	0.12	-0.01	-0.02	-0.06	-0.01	0.02
23	6	-0.02	-0.01	0.03	-0.09	0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.08
24	1	-0.36	-0.09	0.48	-0.01	-0.06	0.09	-0.27	-0.06	0.42
25	1	0.12	0.07	-0.38	-0.10	0.04	0.37	-0.12	0.04	0.42
26	1	-0.05	0.13	0.06	-0.14	0.44	0.17	0.08	-0.23	-0.10
27	1	-0.06	-0.06	0.00	-0.17	-0.18	0.00	0.09	0.06	-0.02
28	1	-0.04	-0.16	-0.05	-0.12	-0.45	-0.16	0.06	0.25	0.07
29	1	0.07	-0.05	-0.21	-0.03	-0.07	-0.23	0.19	-0.09	-0.41
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

43

44

45

Frequencies	--	1055.2519	1065.7379	1067.8136
Red. masses	--	1.3879	2.3864	1.8371
Frc consts	--	0.9106	1.5969	1.2342
IR Inten	--	0.4490	0.7643	1.5672

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.00	0.11	-0.13	0.13	-0.02	0.00	0.00	-0.01
2	6	0.02	0.00	-0.11	-0.07	-0.14	-0.02	-0.02	-0.02	0.00
3	6	0.02	0.01	-0.06	0.06	0.06	0.02	-0.01	0.03	0.01
4	6	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01
5	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.01	0.03	-0.01	0.01
6	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.04
7	1	-0.06	-0.01	0.33	0.41	0.11	0.12	0.03	0.03	-0.06
8	6	-0.01	0.00	0.06	0.08	-0.09	0.01	0.00	0.01	0.00
9	1	0.10	0.02	-0.29	0.36	-0.07	0.11	-0.02	0.00	0.01
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.01	0.02	0.01	0.00
11	1	-0.14	-0.06	0.56	0.05	-0.33	-0.02	0.01	-0.04	-0.03
12	6	0.00	0.01	0.00	-0.04	-0.03	0.02	0.00	-0.01	-0.06
13	1	-0.02	0.00	0.04	-0.01	-0.01	0.06	0.03	-0.01	-0.20
14	1	0.14	0.05	-0.57	-0.06	0.35	0.00	-0.01	0.00	0.05
15	6	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.02	-0.02	0.02	0.00
16	6	-0.01	0.00	0.02	-0.04	0.01	-0.01	-0.04	0.00	-0.01
17	6	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.05	0.04	-0.03	0.16
18	6	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.08	0.03	0.00	0.04	0.00
19	6	0.01	0.01	-0.02	-0.03	-0.11	-0.02	-0.02	-0.05	-0.02
20	1	0.04	-0.01	-0.13	-0.08	0.08	-0.05	-0.11	0.09	-0.06
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.02	-0.02
22	6	-0.01	0.00	-0.01	0.03	0.01	0.04	0.00	0.02	-0.15
23	6	-0.01	0.00	0.02	0.08	0.00	0.02	0.07	-0.01	0.03
24	1	-0.04	-0.01	0.07	-0.01	0.27	-0.17	-0.07	0.15	-0.04
25	1	-0.04	0.01	0.14	-0.20	-0.15	-0.03	-0.14	-0.07	0.01
26	1	0.01	-0.05	0.01	-0.04	0.19	-0.02	-0.01	-0.17	0.25
27	1	0.01	0.06	0.02	-0.03	-0.20	-0.07	-0.09	0.56	0.27
28	1	0.02	-0.01	0.02	-0.08	0.05	-0.06	0.14	-0.52	0.06
29	1	0.04	-0.02	-0.09	0.10	0.07	0.08	0.11	0.05	0.02
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

46

47

48

Frequencies	--	1069.8992	1126.4390	1177.5175
Red. masses	--	1.9213	2.6404	1.5135
Frc consts	--	1.2958	1.9739	1.2365
IR Inten	--	3.3849	1.0874	6.2297

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	0.07	-0.02	-0.01	-0.06	0.00	0.03	0.03	0.01
2	6	-0.01	-0.05	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.04	0.03	-0.01
3	6	0.04	-0.01	0.01	-0.01	0.14	0.00	-0.04	-0.07	-0.01

4	6	0.00	-0.01	0.00	0.04	-0.07	0.01	-0.04	0.04	-0.01
5	6	-0.06	0.05	-0.02	0.00	-0.12	-0.01	0.04	0.04	0.01
6	6	-0.02	0.00	0.01	0.03	0.03	0.00	-0.01	-0.04	0.00
7	1	0.26	0.02	0.04	0.07	0.16	0.03	-0.35	-0.11	-0.09
8	6	0.05	-0.04	0.01	-0.02	0.13	0.00	0.05	-0.06	0.01
9	1	0.33	-0.01	0.09	-0.06	0.13	-0.02	0.24	-0.05	0.06
10	6	-0.08	0.00	-0.02	-0.06	-0.11	-0.02	0.03	-0.05	0.01
11	1	0.06	-0.15	-0.01	0.16	-0.24	0.03	-0.25	0.31	-0.04
12	6	0.01	0.03	-0.02	0.03	0.05	0.01	0.02	0.02	0.00
13	1	-0.09	-0.02	-0.08	-0.11	0.01	-0.03	-0.01	-0.04	-0.01
14	1	-0.03	0.20	0.03	-0.14	-0.40	-0.06	0.18	0.40	0.07
15	6	0.02	0.01	0.00	-0.09	-0.05	-0.03	-0.03	-0.02	0.00
16	6	0.08	-0.01	0.01	0.12	0.09	0.04	0.06	0.00	0.02
17	6	0.02	-0.01	0.06	0.01	0.04	0.00	0.02	0.05	0.01
18	6	0.03	-0.07	0.03	0.08	0.10	0.05	0.00	0.06	0.00
19	6	0.03	0.08	0.04	-0.04	-0.01	0.00	-0.03	0.01	-0.01
20	1	0.27	-0.27	0.14	0.16	0.06	0.05	0.16	-0.12	0.05
21	8	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
22	6	-0.03	0.00	-0.05	-0.02	-0.03	0.00	-0.02	-0.03	0.00
23	6	-0.12	0.01	-0.07	-0.04	-0.05	-0.04	0.00	-0.04	-0.01
24	1	0.28	-0.33	0.01	0.07	0.25	-0.12	-0.16	0.30	-0.09
25	1	0.27	0.12	-0.05	-0.34	-0.05	-0.17	-0.26	-0.02	-0.10
26	1	0.03	-0.19	0.04	0.03	-0.12	-0.05	0.03	-0.12	-0.04
27	1	0.01	0.24	0.09	0.05	0.00	-0.01	0.04	0.02	0.00
28	1	0.08	-0.08	0.06	0.03	0.07	0.02	0.03	0.03	0.02
29	1	-0.25	-0.13	0.03	-0.23	-0.42	0.02	-0.13	-0.33	-0.02
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

49

50

51

		A	A	A
Frequencies	--	1205.5450	1220.2760	1222.4001
Red. masses	--	2.8914	1.1234	1.1058
Frc consts	--	2.4759	0.9856	0.9735
IR Inten	--	44.7585	0.1839	1.1279

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.03	0.01
2	6	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	0.01
3	6	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
4	6	0.08	0.04	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
5	6	0.04	-0.03	0.01	-0.02	0.03	0.00	0.00	-0.03	0.00
6	6	0.04	-0.08	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
7	1	-0.25	-0.02	-0.06	0.20	0.01	0.05	-0.35	-0.03	-0.09
8	6	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00
9	1	-0.12	-0.01	-0.04	-0.04	-0.01	-0.01	-0.32	-0.01	-0.08
10	6	-0.03	0.03	-0.01	0.04	0.04	0.01	-0.02	0.00	-0.01
11	1	0.09	-0.10	0.02	-0.02	0.03	0.00	0.35	-0.46	0.06
12	6	-0.06	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
13	1	0.32	-0.05	0.06	0.07	0.01	0.02	-0.06	0.00	-0.02
14	1	0.01	0.05	0.01	-0.05	-0.12	-0.02	0.22	0.52	0.08
15	6	-0.09	0.26	-0.05	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00
16	6	0.02	-0.08	0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.00
17	6	-0.06	-0.18	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.00
18	6	0.01	0.04	0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.01
19	6	-0.02	0.04	0.00	0.04	0.00	0.02	0.02	0.00	0.01
20	1	0.22	-0.33	0.06	-0.17	0.19	-0.06	-0.11	0.16	-0.03
21	8	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	6	0.06	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
23	6	0.04	-0.07	0.02	0.00	-0.05	-0.01	-0.01	0.01	0.00
24	1	0.20	-0.15	0.01	-0.22	0.31	-0.12	0.00	0.00	-0.01
25	1	-0.13	0.03	-0.04	0.55	0.07	0.18	0.18	0.02	0.06
26	1	-0.08	0.30	0.13	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.04	-0.02
27	1	-0.13	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
28	1	-0.07	-0.07	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
29	1	-0.11	-0.47	-0.02	-0.21	-0.56	-0.03	-0.03	-0.05	-0.01

30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			52			53			54	
			A			A			A	
Frequencies	--	1264.7105			1287.1507			1297.3655		
Red. masses	--	1.5566			1.6802			2.5858		
Frc consts	--	1.4669			1.6401			2.5643		
IR Inten	--	62.2685			97.5208			21.8437		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.03	-0.02	0.01
2	6	0.02	0.01	0.00	0.04	0.00	0.01	-0.02	0.04	0.00
3	6	0.04	-0.04	0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.01
4	6	-0.14	0.03	-0.03	0.03	0.01	0.01	-0.11	-0.11	-0.03
5	6	-0.05	-0.01	-0.01	-0.07	0.06	-0.02	-0.13	-0.15	-0.04
6	6	0.01	0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.06	0.09	0.01
7	1	0.44	0.00	0.11	0.00	-0.01	0.00	-0.21	-0.01	-0.05
8	6	-0.01	0.02	0.00	-0.06	-0.01	-0.02	0.07	0.08	0.02
9	1	-0.17	0.00	-0.05	-0.12	-0.01	-0.03	0.71	0.15	0.19
10	6	0.05	-0.03	0.02	0.05	0.03	0.01	0.01	-0.05	0.01
11	1	0.20	-0.24	0.04	0.21	-0.22	0.04	0.00	0.02	0.00
12	6	-0.05	-0.01	-0.01	0.05	0.02	0.00	0.08	0.06	0.00
13	1	0.65	0.12	0.13	-0.44	-0.05	-0.07	0.18	0.12	0.05
14	1	0.08	0.11	0.03	-0.03	-0.07	-0.01	0.15	0.28	0.05
15	6	0.04	0.04	0.01	0.13	-0.03	0.06	0.06	0.02	0.02
16	6	0.02	-0.03	0.01	0.02	-0.04	0.01	-0.05	0.04	-0.01
17	6	0.03	0.06	0.01	-0.05	-0.09	0.00	-0.05	-0.14	-0.02
18	6	-0.03	0.02	-0.02	-0.05	0.00	-0.03	-0.02	0.02	-0.01
19	6	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.00	0.01
20	1	0.11	-0.15	0.03	0.26	-0.35	0.08	-0.09	0.10	-0.04
21	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.02	0.01
22	6	-0.02	-0.03	0.00	0.02	0.03	0.00	0.03	0.05	0.01
23	6	0.00	-0.02	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.00
24	1	-0.05	0.04	-0.01	-0.38	0.41	-0.12	-0.05	0.04	0.01
25	1	-0.29	-0.01	-0.10	-0.26	-0.02	-0.09	0.10	0.01	0.04
26	1	0.00	-0.05	-0.04	-0.02	0.08	0.06	-0.05	0.17	0.09
27	1	0.06	0.01	-0.01	-0.07	-0.01	0.02	-0.08	-0.02	0.01
28	1	0.03	0.02	0.03	-0.03	-0.03	-0.02	-0.03	-0.02	-0.02
29	1	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.03	0.08	0.03
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			55			56			57	
			A			A			A	
Frequencies	--	1335.9939			1351.9279			1391.0478		
Red. masses	--	2.6087			2.3416			4.9983		
Frc consts	--	2.7434			2.5216			5.6985		
IR Inten	--	28.2022			53.4969			29.1965		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	0.01	0.01	0.04	-0.03	0.01	0.01	0.01	0.00
2	6	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.06	0.00
3	6	-0.06	0.03	-0.01	-0.07	-0.02	-0.02	0.04	-0.02	0.01
4	6	-0.02	-0.12	-0.01	-0.14	-0.02	-0.03	-0.04	-0.03	-0.01
5	6	0.12	-0.10	0.03	0.09	0.06	0.03	-0.15	0.00	-0.04
6	6	-0.02	0.09	0.00	0.02	0.04	0.00	0.06	0.02	0.01
7	1	-0.07	0.03	-0.02	0.58	0.04	0.14	-0.15	-0.04	-0.04
8	6	-0.01	0.05	0.00	0.03	0.00	0.01	-0.05	0.00	-0.02
9	1	0.04	0.05	0.01	-0.47	-0.04	-0.12	0.46	0.05	0.13
10	6	-0.09	0.23	-0.03	-0.03	0.02	-0.01	0.25	0.18	0.07
11	1	-0.08	0.06	-0.02	-0.16	0.18	-0.03	0.26	-0.28	0.05
12	6	0.02	-0.09	0.00	0.17	0.07	0.02	0.01	-0.02	0.00
13	1	0.25	0.14	0.04	-0.22	0.01	-0.04	-0.20	-0.02	-0.05
14	1	0.05	0.02	0.02	0.17	0.26	0.06	-0.05	-0.14	-0.02
15	6	0.01	-0.01	0.00	-0.09	-0.04	-0.03	-0.23	-0.07	-0.08
16	6	-0.02	-0.03	0.00	0.04	-0.02	0.01	0.12	-0.19	0.04
17	6	0.03	0.07	0.00	-0.04	-0.13	-0.03	0.01	0.03	-0.01
18	6	0.04	-0.05	0.02	0.03	-0.01	0.01	0.07	-0.14	0.03

19	6	-0.04	-0.06	-0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.17	0.02	-0.06
20	1	0.40	-0.58	0.13	-0.03	0.05	0.00	-0.14	0.15	0.00
21	8	-0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00
22	6	-0.01	-0.02	0.00	0.02	0.04	0.01	0.00	0.00	0.00
23	6	-0.01	0.03	-0.01	0.00	0.04	0.00	0.07	0.20	0.04
24	1	-0.20	0.30	-0.11	0.11	-0.10	0.04	0.06	-0.11	0.00
25	1	0.27	-0.02	0.10	-0.09	-0.02	-0.03	-0.14	0.03	-0.04
26	1	0.01	-0.03	-0.05	-0.02	0.08	0.08	0.03	-0.06	-0.02
27	1	0.05	-0.01	-0.02	-0.08	-0.04	0.01	0.01	-0.03	-0.02
28	1	0.01	-0.01	0.01	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01	-0.04	0.00
29	1	0.01	0.06	-0.02	-0.04	-0.07	-0.02	-0.07	-0.25	-0.09
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		58			59			60		
		A			A			A		
Frequencies	--	1410.7184			1427.7890			1437.0057		
Red. masses	--	4.4041			1.8253			1.5489		
Frc consts	--	5.1640			2.1923			1.8844		
IR Inten	--	70.5013			8.9403			36.3276		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.10	-0.15	-0.03	0.02	0.06	0.01	0.01	0.04	0.01
2	6	-0.13	0.12	-0.03	0.04	-0.04	0.01	0.02	-0.03	0.00
3	6	0.19	0.04	0.05	-0.05	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01
4	6	-0.04	0.21	0.00	0.04	-0.07	0.01	0.03	-0.04	0.00
5	6	0.00	-0.15	-0.01	0.02	0.08	0.01	0.01	0.05	0.01
6	6	-0.01	-0.12	-0.01	0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.03	0.00
7	1	-0.14	0.01	-0.02	-0.08	-0.02	-0.02	-0.06	-0.01	-0.02
8	6	0.20	-0.02	0.05	-0.06	-0.01	-0.02	-0.04	-0.01	-0.01
9	1	-0.34	-0.08	-0.10	0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
10	6	-0.02	0.05	-0.01	0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.03	0.00
11	1	0.01	-0.09	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.02	0.17	-0.01	-0.04	0.13	-0.01	-0.04	0.11	-0.01
13	1	0.09	-0.11	0.03	0.42	0.03	0.10	0.36	0.02	0.08
14	1	-0.03	0.03	-0.01	-0.02	-0.06	-0.01	-0.02	-0.05	-0.01
15	6	-0.05	-0.07	-0.01	-0.02	-0.05	0.00	-0.02	-0.03	0.00
16	6	0.02	0.02	0.01	0.03	0.00	0.01	0.02	0.01	0.01
17	6	-0.06	-0.06	0.02	-0.03	-0.04	0.01	-0.02	-0.03	0.00
18	6	0.10	-0.08	0.04	0.05	-0.05	0.02	0.04	-0.04	0.02
19	6	-0.08	-0.01	-0.03	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.01	-0.01
20	1	0.18	-0.19	0.07	-0.02	0.08	0.00	0.01	0.04	0.00
21	8	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
22	6	0.02	0.00	-0.01	0.02	-0.09	-0.02	-0.02	0.12	0.01
23	6	-0.03	0.00	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01
24	1	-0.19	0.31	-0.08	-0.11	0.16	-0.04	-0.09	0.15	-0.04
25	1	0.29	0.05	0.11	0.05	0.03	0.02	0.08	0.03	0.03
26	1	-0.04	0.07	0.08	-0.22	0.42	0.02	0.18	-0.40	0.11
27	1	-0.10	0.05	0.07	-0.02	0.39	0.29	-0.03	-0.44	-0.32
28	1	-0.02	0.07	-0.04	0.00	0.42	-0.10	0.06	-0.45	0.15
29	1	0.11	0.39	0.03	0.04	0.18	0.01	0.05	0.19	0.02
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		61			62			63		
		A			A			A		
Frequencies	--	1467.8499			1478.0896			1481.4674		
Red. masses	--	2.2495			2.2101			2.6224		
Frc consts	--	2.8556			2.8449			3.3910		
IR Inten	--	10.3906			70.2298			27.9321		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.03	0.00	-0.03	-0.02	-0.01	-0.09	-0.13	-0.03
2	6	0.07	-0.02	0.02	0.03	-0.05	0.01	0.09	-0.06	0.02
3	6	-0.09	-0.02	-0.02	-0.01	0.02	0.00	-0.04	0.09	0.00
4	6	0.04	0.11	0.01	0.06	0.03	0.02	0.09	-0.11	0.02
5	6	-0.02	-0.06	-0.01	-0.01	-0.08	-0.01	-0.13	0.03	-0.03
6	6	-0.03	-0.01	0.00	-0.07	-0.01	-0.01	0.13	0.00	0.02
7	1	0.43	0.04	0.10	0.04	0.03	0.01	0.07	0.13	0.02



8	6	-0.07	0.03	-0.02	0.03	0.04	0.01	0.05	0.05	0.02
9	1	0.23	0.07	0.07	-0.02	0.05	0.00	-0.34	0.03	-0.09
10	6	0.01	-0.09	0.00	-0.11	0.04	-0.03	0.09	0.04	0.03
11	1	-0.02	0.12	0.00	-0.16	0.22	-0.03	-0.26	0.43	-0.04
12	6	0.03	-0.09	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.15	0.01	-0.02
13	1	-0.20	-0.04	-0.06	0.23	0.04	0.04	-0.12	-0.05	-0.01
14	1	0.11	0.22	0.04	0.02	0.14	0.01	0.18	0.56	0.08
15	6	-0.03	0.14	-0.01	0.09	0.03	0.03	-0.01	-0.04	-0.01
16	6	0.06	0.01	0.02	0.05	-0.10	0.02	-0.02	-0.01	-0.01
17	6	0.01	0.03	0.00	-0.07	0.03	0.03	-0.01	0.04	0.02
18	6	0.07	-0.07	0.03	0.00	-0.11	-0.01	-0.01	0.03	0.00
19	6	-0.10	0.04	-0.04	0.05	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00
20	1	-0.02	0.14	0.00	-0.32	0.36	-0.10	0.11	-0.18	0.04
21	8	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.02	-0.02	0.03	-0.01	-0.01
22	6	0.01	0.00	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	6	-0.02	-0.06	-0.01	0.00	0.14	0.00	-0.01	-0.04	0.00
24	1	-0.21	0.35	-0.11	-0.19	0.11	-0.05	0.05	-0.05	0.02
25	1	0.29	0.11	0.11	-0.43	-0.07	-0.15	0.01	0.01	0.00
26	1	0.03	-0.02	-0.07	0.06	-0.14	0.06	0.04	-0.07	-0.06
27	1	-0.02	0.04	0.04	-0.23	-0.06	0.07	-0.04	0.02	0.03
28	1	-0.08	0.01	-0.06	-0.13	0.02	-0.13	-0.07	-0.02	-0.06
29	1	0.15	0.39	0.05	-0.17	-0.28	-0.09	0.03	0.06	0.02
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			64			65			66	
			A			A			A	
Frequencies	--	1486.8992			1504.1318			1524.9519		
Red. masses	--	1.2168			1.0765			2.5753		
Frc consts	--	1.5851			1.4350			3.5285		
IR Inten	--	35.2605			23.2329			17.6823		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.09	0.00
2	6	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.07	-0.01
3	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.10	0.00	0.02
4	6	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.00	-0.09	-0.10	-0.02
5	6	0.02	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.05	0.07	-0.01
6	6	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.06	0.01
7	1	0.02	-0.01	0.00	0.04	0.01	0.01	-0.39	-0.07	-0.10
8	6	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.12	0.02	0.03
9	1	0.06	-0.01	0.01	0.02	0.01	0.01	-0.38	-0.03	-0.10
10	6	0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
11	1	0.06	-0.09	0.01	0.00	0.02	0.00	-0.15	0.07	-0.03
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.09	0.01
13	1	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.02	-0.08	0.04	-0.02
14	1	-0.01	-0.07	-0.01	0.02	0.04	0.01	-0.15	-0.23	-0.05
15	6	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.11	-0.02
16	6	-0.02	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.08	0.01
17	6	-0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	-0.02	0.09	-0.01	-0.03
18	6	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.06	-0.04	0.03
19	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.04	0.08	0.02
20	1	0.08	-0.09	0.02	0.02	-0.02	0.00	-0.18	0.20	-0.05
21	8	0.04	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.05	0.01	0.02
22	6	0.06	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.06	0.00	0.01	0.00
23	6	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.07	-0.09	-0.03
24	1	0.07	-0.08	0.04	0.01	-0.02	0.00	-0.14	0.30	-0.10
25	1	0.09	0.00	0.03	0.02	0.00	0.01	-0.15	0.07	-0.05
26	1	0.19	-0.37	0.06	-0.17	-0.06	0.69	0.06	-0.15	0.06
27	1	-0.59	-0.05	0.26	-0.26	-0.25	-0.06	-0.18	-0.02	0.07
28	1	-0.39	0.18	-0.38	0.40	0.37	0.23	-0.08	0.15	-0.08
29	1	0.02	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.06	0.31	0.03
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			67			68			69	
			A			A			A	
Frequencies	--	1562.6740			1566.3408			1610.9225		

Red. masses	--	3.3701			4.4450			7.0096		
Frc consts	--	4.8488			6.4254			10.7176		
IR Inten	--	91.3273			159.7190			59.2446		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.13	0.00	-0.05	0.01	-0.01	0.03	-0.16	0.00
2	6	-0.05	0.16	0.00	0.07	-0.08	0.01	-0.17	0.22	-0.03
3	6	-0.08	0.03	-0.02	0.05	0.01	0.01	-0.05	0.07	-0.01
4	6	0.04	-0.01	0.01	0.04	0.05	0.01	-0.01	-0.23	-0.01
5	6	0.10	0.01	0.03	-0.04	-0.02	-0.01	0.04	0.23	0.02
6	6	0.07	-0.03	0.01	-0.11	-0.03	-0.02	0.13	0.05	0.03
7	1	0.25	0.08	0.06	-0.11	0.00	-0.03	0.01	0.09	0.01
8	6	-0.06	-0.07	-0.02	-0.02	0.04	0.00	0.11	-0.12	0.02
9	1	0.38	-0.04	0.10	-0.08	0.04	-0.02	-0.09	-0.17	-0.04
10	6	-0.03	0.08	-0.01	0.01	-0.05	0.00	-0.17	-0.19	-0.05
11	1	0.25	-0.24	0.05	-0.13	0.20	-0.02	0.24	-0.33	0.04
12	6	-0.10	0.04	-0.01	-0.01	0.05	0.01	-0.11	-0.05	-0.02
13	1	-0.10	-0.07	0.00	0.22	0.02	0.06	-0.13	0.00	-0.01
14	1	0.15	0.16	0.05	-0.04	0.07	-0.01	0.13	0.07	0.04
15	6	-0.03	-0.02	-0.01	0.08	-0.04	0.03	0.17	0.16	0.05
16	6	-0.06	-0.05	-0.02	0.02	0.06	0.01	0.15	0.01	0.05
17	6	0.17	-0.06	-0.05	0.34	-0.14	-0.10	-0.01	0.01	0.00
18	6	0.05	-0.04	0.03	-0.06	-0.02	-0.02	-0.04	-0.09	-0.03
19	6	0.18	0.04	0.07	-0.12	-0.07	-0.04	-0.24	-0.06	-0.09
20	1	-0.20	0.12	-0.07	0.18	-0.13	0.05	0.03	0.20	0.00
21	8	-0.09	0.03	0.03	-0.19	0.07	0.07	0.02	0.00	0.00
22	6	-0.01	0.02	0.01	-0.01	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
23	6	-0.09	-0.04	-0.04	0.08	0.12	0.04	0.11	0.16	0.05
24	1	-0.09	0.20	-0.08	0.02	-0.12	-0.01	-0.14	0.01	-0.02
25	1	-0.36	-0.04	-0.13	0.21	-0.03	0.07	0.30	0.02	0.11
26	1	0.08	-0.16	-0.04	0.18	-0.32	-0.09	0.00	-0.01	0.01
27	1	-0.12	0.03	0.07	-0.27	0.06	0.15	0.01	0.00	-0.01
28	1	-0.11	0.12	-0.08	-0.25	0.22	-0.20	0.02	0.00	0.01
29	1	-0.06	0.12	-0.01	-0.04	-0.24	-0.03	0.00	-0.20	-0.03
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
		70			71			72		
		A			A			A		
Frequencies	--	1626.9113			1637.4424			1658.2091		
Red. masses	--	4.9311			5.8942			5.7240		
Frc consts	--	7.6899			9.3113			9.2732		
IR Inten	--	35.6724			17.3615			37.1828		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.09	0.17	0.03	-0.05	-0.11	-0.02	-0.18	-0.12	-0.05
2	6	-0.01	-0.09	-0.01	-0.01	0.07	0.00	0.19	-0.06	0.04
3	6	-0.07	-0.10	-0.02	0.05	0.07	0.01	0.31	0.07	0.08
4	6	-0.10	0.09	-0.02	0.08	-0.10	0.02	-0.24	-0.01	-0.06
5	6	-0.01	-0.10	-0.01	-0.07	0.14	-0.01	0.21	0.05	0.06
6	6	0.26	-0.03	0.05	-0.22	0.04	-0.04	0.11	0.02	0.02
7	1	0.12	-0.10	0.02	-0.10	0.06	-0.02	-0.42	0.00	-0.10
8	6	0.04	0.05	0.01	0.01	-0.05	0.00	-0.29	0.00	-0.07
9	1	-0.12	0.03	-0.03	-0.10	-0.06	-0.03	0.40	0.06	0.11
10	6	0.02	-0.10	0.01	0.15	-0.16	0.04	-0.06	-0.04	-0.02
11	1	-0.08	-0.02	-0.02	0.05	-0.02	0.01	-0.02	0.27	0.01
12	6	-0.20	0.04	-0.03	0.20	-0.10	0.03	-0.03	0.00	-0.01
13	1	-0.46	-0.16	-0.07	0.34	0.14	0.04	-0.21	-0.03	-0.03
14	1	-0.07	-0.25	-0.03	0.04	0.14	0.02	-0.06	0.27	0.00
15	6	0.00	0.08	-0.01	-0.16	0.12	-0.05	0.00	0.05	0.00
16	6	-0.13	0.15	-0.04	-0.20	0.20	-0.06	0.00	0.03	0.00
17	6	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.01	-0.04	0.01	0.01
18	6	0.06	-0.18	0.03	0.10	-0.17	0.05	0.02	-0.04	0.01
19	6	0.09	-0.09	0.03	0.16	-0.08	0.06	0.01	-0.02	0.00
20	1	0.19	-0.27	0.05	0.25	-0.38	0.07	-0.01	0.04	-0.01
21	8	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.01	-0.01
22	6	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

23	6	0.00	0.19	0.00	-0.03	0.14	-0.02	0.00	0.04	0.00
24	1	-0.18	0.15	-0.08	-0.14	0.19	-0.07	-0.05	0.05	-0.01
25	1	-0.11	-0.15	-0.04	-0.15	-0.15	-0.06	0.00	-0.02	0.00
26	1	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.01	-0.02	0.03	0.01
27	1	0.03	0.02	-0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.03	0.00	-0.01
28	1	0.03	0.00	0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.02
29	1	-0.15	-0.22	-0.08	-0.14	-0.14	-0.06	-0.02	-0.03	-0.02
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

73

74

75

		A			A			A		
Frequencies	--	3055.4219			3143.8327			3180.7295		
Red. masses	--	1.0412			1.0920			1.0889		
Frc consts	--	5.7270			6.3590			6.4909		
IR Inten	--	2.5459			3.9919			0.4317		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.05	-0.04
19	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	6	-0.02	0.05	-0.01	0.02	0.00	0.09	0.00	0.00	0.00
23	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.01
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.62	0.58	0.45
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00
26	1	-0.36	-0.15	-0.10	-0.40	-0.19	-0.08	0.00	0.00	0.00
27	1	0.29	-0.39	0.63	-0.22	0.30	-0.46	0.00	0.00	0.00
28	1	0.29	-0.04	-0.36	0.44	-0.08	-0.50	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.22	0.09	-0.11
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

76

77

78

		A			A			A		
Frequencies	--	3189.0389			3206.6712			3215.5836		
Red. masses	--	1.1025			1.0896			1.0911		
Frc consts	--	6.6061			6.6013			6.6472		
IR Inten	--	4.5107			1.9364			0.7362		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.08	0.00	0.00	0.01	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	1	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.88	0.02	0.01	-0.07	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
9	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.09	0.00	-0.01	0.12	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	0.00	0.00	0.00	-0.14	-0.11	-0.04	-0.11	-0.08	-0.03

12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1	0.00	0.04	0.00	0.02	-0.11	0.01	-0.01	0.03	0.00
14	1	0.00	0.00	0.00	0.35	-0.15	0.08	0.03	-0.01	0.01
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01
19	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	-0.12	-0.10	-0.04
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	6	-0.09	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.03	-0.03
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.15	0.15	0.11
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.06	0.47	-0.02
26	1	0.71	0.32	0.19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.36	-0.07	-0.45	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.67	-0.30	0.33
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

79

80

81

		A	A	A
Frequencies	--	3218.3124	3220.1623	3230.7603
Red. masses	--	1.0903	1.0913	1.0933
Frc consts	--	6.6535	6.6672	6.7234
IR Inten	--	0.6630	3.9835	6.3327

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.01
2	6	-0.05	-0.04	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.01
3	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.03	0.00	0.01	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00
7	1	-0.03	0.26	0.01	-0.03	0.19	0.00	-0.02	0.15	0.00
8	6	0.00	0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.00
9	1	0.04	-0.41	-0.01	0.01	-0.15	-0.01	-0.04	0.40	0.01
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	0.56	0.43	0.16	0.18	0.14	0.05	0.19	0.14	0.06
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1	0.05	-0.32	0.02	-0.14	0.92	-0.06	0.00	0.03	0.00
14	1	-0.23	0.09	-0.05	-0.01	0.00	0.00	-0.32	0.14	-0.07
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	0.01
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
19	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00
20	1	0.09	0.08	0.03	0.04	0.04	0.01	-0.40	-0.34	-0.12
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	6	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.01
24	1	0.04	0.03	0.03	0.01	0.01	0.01	-0.04	-0.04	-0.03
25	1	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.45	-0.02
26	1	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
28	1	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
29	1	0.18	-0.08	0.09	0.04	-0.02	0.02	-0.29	0.13	-0.14
30	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

82

83

84

		A	A	A
Frequencies	--	3237.8893	3246.4306	3257.0636
Red. masses	--	1.0948	1.1003	1.0949
Frc consts	--	6.7626	6.8326	6.8435
IR Inten	--	2.6558	8.8788	11.1313

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
------	----	---	---	---	---	---	---	---	---	---



**Table S19.** Cartesian coordinates of optimized structure for (11-C<sub>10</sub>O)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	2.688858	2.621215	-0.683111
2	6	0	0.308450	3.265765	-0.309208
3	6	0	1.340543	2.296295	-0.287859
4	6	0	-1.001849	2.919374	0.021380
5	1	0	0.539583	4.283330	-0.611297
6	6	0	3.683510	1.673504	-0.650084
7	1	0	2.902915	3.634780	-1.010515
8	6	0	3.414798	0.325358	-0.205725
9	6	0	2.084600	-0.022388	0.201688
10	6	0	4.431268	-0.658342	-0.159024
11	1	0	4.695811	1.927884	-0.953606
12	6	0	-1.346949	1.593031	0.392983
13	6	0	-0.306755	0.614342	0.525813
14	6	0	-2.785484	1.243531	0.473785
15	1	0	-1.777627	3.674612	-0.051609
16	6	0	1.034589	0.957967	0.147548
17	6	0	-0.527353	-0.713413	1.094036
18	6	0	1.819997	-1.353819	0.669987
19	8	0	-3.203700	0.064108	0.204627
20	6	0	-3.821908	2.292227	0.813383
21	6	0	4.159332	-1.962071	0.293461
22	1	0	5.437856	-0.396194	-0.475203
23	6	0	0.500587	-1.653341	1.153106
24	6	0	2.865862	-2.308880	0.711106
25	1	0	4.955734	-2.699135	0.326596
26	1	0	0.329170	-2.607936	1.646970
27	1	0	2.662318	-3.312395	1.076794
28	1	0	-1.434425	-0.892062	1.669188
29	1	0	-4.056733	2.896301	-0.074774
30	1	0	-3.477509	2.970163	1.600540
31	1	0	-4.743328	1.794483	1.124981
32	47	0	-1.950143	-1.671677	-0.662227

**Table S20.** Vibrational frequencies for (11-C<sub>10</sub>O)

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	43.7819			48.5166			93.3666		
Red. masses	--	6.5056			10.2764			4.2265		
Frc consts	--	0.0073			0.0143			0.0217		
IR Inten	--	0.1286			0.1411			6.2409		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.07	0.08	0.17	0.06	0.04	0.01	-0.03	-0.02	-0.05
2	6	0.06	0.08	0.13	0.03	-0.02	-0.07	-0.01	-0.02	0.09
3	6	0.05	0.07	0.11	0.05	0.00	-0.05	-0.01	-0.03	0.03
4	6	0.05	0.07	0.04	0.04	-0.04	-0.07	0.00	-0.04	0.11
5	1	0.08	0.10	0.19	0.02	-0.02	-0.08	-0.02	-0.02	0.10
6	6	0.05	0.07	0.12	0.10	0.08	0.08	-0.03	-0.02	-0.10
7	1	0.09	0.10	0.24	0.04	0.05	0.02	-0.06	-0.03	-0.07
8	6	0.02	0.04	0.01	0.12	0.08	0.08	0.00	-0.01	-0.05
9	6	0.02	0.03	-0.02	0.10	0.03	-0.01	0.03	-0.01	0.02
10	6	0.00	0.01	-0.06	0.16	0.13	0.17	0.02	0.01	-0.07
11	1	0.06	0.07	0.15	0.10	0.12	0.14	-0.05	-0.02	-0.16
12	6	0.02	0.05	-0.03	0.06	-0.04	-0.06	0.00	-0.05	0.08
13	6	0.02	0.05	-0.02	0.07	-0.04	-0.09	0.02	-0.04	0.07
14	6	0.02	0.05	-0.12	0.06	-0.02	0.05	0.01	-0.04	0.00
15	1	0.05	0.07	0.04	0.03	-0.05	-0.05	0.00	-0.04	0.13
16	6	0.03	0.05	0.03	0.07	-0.01	-0.06	0.01	-0.03	0.05
17	6	0.01	0.04	-0.05	0.08	-0.06	-0.13	0.05	-0.05	0.06
18	6	-0.01	0.01	-0.10	0.13	0.02	-0.02	0.06	-0.01	0.06
19	8	0.03	0.04	-0.09	0.00	-0.01	0.11	0.02	-0.08	0.14
20	6	-0.01	0.07	-0.28	0.11	0.01	0.13	-0.05	0.01	-0.32
21	6	-0.02	-0.02	-0.16	0.18	0.12	0.16	0.06	0.02	0.00
22	1	0.01	0.01	-0.05	0.17	0.17	0.25	0.00	0.01	-0.13
23	6	-0.01	0.02	-0.09	0.11	-0.03	-0.10	0.07	-0.02	0.07
24	6	-0.03	-0.02	-0.18	0.17	0.06	0.06	0.08	0.01	0.06
25	1	-0.04	-0.04	-0.22	0.21	0.16	0.24	0.07	0.03	-0.01
26	1	-0.01	0.01	-0.11	0.12	-0.05	-0.13	0.09	-0.03	0.07
27	1	-0.05	-0.04	-0.24	0.18	0.06	0.05	0.11	0.02	0.10
28	1	0.02	0.05	-0.03	0.08	-0.09	-0.14	0.04	-0.08	0.04
29	1	0.10	0.05	-0.32	0.05	0.00	0.14	0.01	-0.20	-0.48
30	1	-0.10	0.09	-0.26	0.19	0.01	0.09	-0.17	0.19	-0.43
31	1	-0.05	0.09	-0.38	0.13	0.03	0.21	-0.07	0.04	-0.30
32	47	-0.04	-0.09	0.08	-0.20	-0.04	-0.03	-0.03	0.05	-0.02
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	101.8569			127.4069			133.3372		
Red. masses	--	4.8481			1.1450			9.8453		
Frc consts	--	0.0296			0.0110			0.1031		
IR Inten	--	2.7288			2.5910			4.8030		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.02	-0.11	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.01	-0.04
2	6	0.05	0.07	0.17	-0.01	-0.01	0.00	0.04	0.08	-0.02
3	6	0.02	0.03	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.05	-0.04
4	6	0.05	0.08	0.20	-0.01	-0.02	-0.01	0.03	0.12	0.01
5	1	0.07	0.08	0.23	-0.01	-0.01	0.00	0.06	0.07	-0.03
6	6	-0.04	-0.04	-0.19	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.02	-0.01
7	1	-0.02	-0.03	-0.15	-0.01	0.00	0.00	0.06	-0.01	-0.06
8	6	-0.02	-0.02	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.01
9	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.05	0.03	-0.03
10	6	-0.02	-0.01	-0.05	0.01	0.01	0.01	-0.05	-0.02	0.08
11	1	-0.06	-0.08	-0.30	0.00	0.01	0.02	0.02	-0.04	0.00

12	6	0.03	0.05	0.08	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	0.13	0.04
13	6	0.01	0.03	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	0.10	-0.01
14	6	0.03	0.04	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.04	0.07	0.18
15	1	0.07	0.11	0.30	0.00	-0.01	0.00	0.06	0.14	0.04
16	6	0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.06	-0.03
17	6	-0.01	0.03	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.07	0.10	-0.05
18	6	0.01	0.04	0.08	0.01	-0.01	-0.02	-0.10	0.03	-0.05
19	8	0.05	0.08	-0.19	-0.02	-0.01	0.01	0.13	-0.04	0.53
20	6	0.01	0.00	0.07	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.11	-0.04
21	6	0.01	0.04	0.10	0.01	0.01	0.01	-0.09	-0.01	0.09
22	1	-0.03	-0.03	-0.12	0.01	0.02	0.03	-0.03	-0.04	0.14
23	6	0.00	0.04	0.06	0.01	-0.02	-0.02	-0.11	0.06	-0.07
24	6	0.02	0.06	0.15	0.01	-0.01	-0.01	-0.12	0.01	0.01
25	1	0.02	0.05	0.15	0.02	0.01	0.01	-0.11	-0.02	0.14
26	1	0.00	0.05	0.08	0.01	-0.02	-0.02	-0.14	0.06	-0.09
27	1	0.04	0.09	0.24	0.01	-0.01	-0.02	-0.17	0.02	0.00
28	1	-0.03	0.02	-0.04	0.01	-0.02	0.00	-0.08	0.11	-0.07
29	1	0.18	0.24	0.19	0.43	0.40	0.14	0.29	0.19	-0.06
30	1	-0.07	-0.21	0.29	-0.18	-0.35	0.37	-0.15	0.04	0.09
31	1	-0.05	-0.04	-0.19	-0.19	0.02	-0.54	-0.11	0.15	-0.30
32	47	-0.03	-0.07	-0.03	0.00	0.02	0.01	0.04	-0.10	-0.08

7

8

9

		A			A			A		
Frequencies	--	135.2533			189.3844			204.8552		
Red. masses	--	4.8870			4.7963			4.5627		
Frc consts	--	0.0527			0.1014			0.1128		
IR Inten	--	7.8729			6.8686			5.3913		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	0.04	0.09	0.05	0.05	0.21	-0.06	0.00	0.01
2	6	0.00	0.00	-0.10	0.03	0.03	0.13	-0.04	-0.06	-0.05
3	6	0.03	0.03	0.05	0.02	0.02	0.07	-0.04	-0.04	0.02
4	6	-0.01	-0.02	-0.16	-0.01	-0.01	-0.05	-0.02	-0.06	-0.02
5	1	-0.02	-0.02	-0.18	0.06	0.07	0.30	-0.05	-0.08	-0.12
6	6	0.03	0.02	0.05	0.01	0.00	0.01	-0.04	0.03	0.01
7	1	0.05	0.04	0.10	0.10	0.11	0.42	-0.11	0.00	-0.01
8	6	0.01	0.01	0.02	-0.03	-0.05	-0.15	-0.02	0.03	0.03
9	6	0.04	0.05	0.13	-0.03	-0.04	-0.12	0.00	0.00	0.08
10	6	-0.04	-0.05	-0.17	-0.04	-0.06	-0.17	-0.01	0.04	-0.07
11	1	0.03	0.01	0.03	0.02	0.01	0.05	-0.05	0.04	-0.01
12	6	0.02	0.00	-0.05	-0.04	-0.04	-0.18	-0.02	-0.04	0.05
13	6	0.03	0.04	0.07	-0.04	-0.05	-0.19	-0.03	-0.05	0.05
14	6	0.03	-0.03	-0.01	-0.04	-0.02	-0.04	-0.05	0.10	0.03
15	1	-0.03	-0.05	-0.28	0.00	0.00	-0.03	-0.02	-0.06	-0.04
16	6	0.04	0.05	0.11	-0.02	-0.03	-0.13	-0.02	-0.03	0.08
17	6	0.03	0.07	0.13	-0.03	-0.02	-0.11	-0.02	-0.10	-0.02
18	6	0.03	0.07	0.17	0.01	0.01	0.03	0.04	-0.01	0.07
19	8	0.06	-0.05	0.02	-0.09	-0.03	0.10	-0.17	0.15	0.01
20	6	0.02	-0.07	0.06	0.03	0.03	0.03	0.13	0.31	0.00
21	6	-0.05	-0.05	-0.18	0.01	0.01	0.05	0.04	0.03	-0.07
22	1	-0.07	-0.11	-0.31	-0.06	-0.09	-0.26	-0.03	0.06	-0.14
23	6	0.04	0.09	0.21	0.01	0.03	0.05	0.03	-0.06	0.01
24	6	-0.01	0.02	0.03	0.04	0.06	0.20	0.07	0.01	0.02
25	1	-0.10	-0.11	-0.34	0.02	0.03	0.12	0.05	0.04	-0.15
26	1	0.04	0.11	0.24	0.03	0.09	0.16	0.03	-0.09	-0.04
27	1	-0.01	0.03	0.05	0.09	0.12	0.40	0.11	0.00	0.01
28	1	-0.01	0.06	0.06	-0.02	0.02	-0.09	-0.03	-0.14	-0.04
29	1	0.16	0.13	0.16	-0.04	0.02	0.04	0.23	0.31	-0.03
30	1	-0.04	-0.25	0.24	0.13	0.04	-0.02	0.28	0.29	-0.05
31	1	-0.04	-0.10	-0.16	0.04	0.07	0.14	0.04	0.51	0.04
32	47	-0.04	-0.02	-0.05	0.02	0.01	0.01	0.03	-0.04	-0.02
		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies	--	261.3728			273.0259			289.9267		



Red. masses	--	4.6474		4.2840		4.2487				
Frc consts	--	0.1871		0.1882		0.2104				
IR Inten	--	4.1455		2.6153		0.9189				
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z			
1	6	0.01	-0.01	-0.05	-0.02	-0.03	-0.15	-0.03	0.03	0.06
2	6	0.03	0.04	0.08	0.03	0.03	0.16	0.00	0.02	0.08
3	6	0.06	0.07	0.19	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.02	0.11
4	6	-0.01	-0.02	-0.13	0.02	0.01	0.10	-0.02	-0.06	-0.11
5	1	0.02	0.04	0.05	0.05	0.09	0.36	0.00	0.03	0.11
6	6	-0.03	-0.06	-0.20	0.01	0.00	-0.02	-0.07	-0.01	-0.10
7	1	-0.02	-0.05	-0.22	-0.05	-0.07	-0.29	-0.03	0.05	0.12
8	6	0.01	0.01	0.03	0.04	0.04	0.14	-0.06	-0.01	-0.11
9	6	0.04	0.06	0.18	0.03	0.03	0.07	-0.05	-0.04	-0.12
10	6	-0.01	-0.01	0.00	0.03	0.03	0.13	0.00	0.06	0.10
11	1	-0.10	-0.15	-0.49	0.00	-0.01	-0.06	-0.08	-0.02	-0.16
12	6	-0.01	-0.02	-0.13	-0.03	-0.06	-0.17	0.03	-0.05	-0.05
13	6	0.01	0.03	0.03	-0.02	-0.04	-0.17	0.03	-0.01	0.09
14	6	-0.01	-0.04	-0.07	-0.03	-0.04	-0.07	0.06	-0.05	-0.05
15	1	-0.04	-0.06	-0.29	0.05	0.05	0.26	-0.06	-0.11	-0.25
16	6	0.06	0.08	0.22	0.00	-0.01	-0.08	-0.01	-0.01	0.02
17	6	-0.04	-0.04	-0.15	0.00	0.02	-0.02	0.03	0.05	0.23
18	6	0.00	0.02	0.02	0.01	0.04	0.09	-0.06	-0.04	-0.12
19	8	-0.05	-0.06	0.05	-0.09	-0.05	0.05	0.02	-0.04	-0.02
20	6	0.03	-0.04	0.02	0.07	0.02	0.01	0.20	0.05	-0.01
21	6	0.00	0.01	0.05	-0.05	-0.04	-0.12	0.00	0.06	0.10
22	1	-0.03	-0.05	-0.10	0.05	0.04	0.20	0.04	0.12	0.28
23	6	-0.05	-0.06	-0.19	0.04	0.08	0.17	0.00	0.02	0.11
24	6	-0.02	0.00	0.00	-0.04	-0.03	-0.11	-0.05	-0.02	-0.12
25	1	-0.01	0.00	0.05	-0.09	-0.10	-0.29	0.04	0.12	0.26
26	1	-0.11	-0.13	-0.35	0.06	0.14	0.29	0.06	0.05	0.19
27	1	-0.05	-0.03	-0.09	-0.09	-0.07	-0.24	-0.05	-0.04	-0.17
28	1	-0.06	-0.09	-0.20	-0.01	0.08	-0.01	0.05	0.10	0.26
29	1	-0.03	0.00	0.06	0.02	0.04	0.03	0.22	0.07	0.01
30	1	0.10	-0.07	0.01	0.19	0.00	-0.02	0.35	0.01	-0.04
31	1	0.04	-0.03	0.08	0.07	0.09	0.11	0.15	0.18	0.06
32	47	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02
			13			14			15	
			A			A			A	
Frequencies	--	316.0461		349.4268		416.2608				
Red. masses	--	5.1549		5.9322		5.8221				
Frc consts	--	0.3034		0.4268		0.5944				
IR Inten	--	2.3461		0.7816		1.4820				
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.08	0.04	-0.03	-0.11	-0.06	0.03	0.12	-0.02	-0.13
2	6	-0.06	0.01	-0.04	0.09	0.03	0.02	0.22	-0.10	0.07
3	6	-0.07	0.00	-0.08	-0.05	-0.09	0.06	0.15	-0.11	-0.07
4	6	0.00	-0.02	0.09	0.06	0.12	-0.10	0.19	-0.07	-0.01
5	1	-0.07	0.01	-0.05	0.25	0.01	0.06	0.25	-0.07	0.18
6	6	-0.06	0.07	0.09	-0.13	-0.05	0.00	0.13	0.05	0.08
7	1	-0.09	0.04	-0.04	-0.15	-0.05	0.02	0.02	-0.02	-0.18
8	6	-0.06	0.05	0.05	-0.13	-0.01	0.05	-0.06	0.10	0.04
9	6	-0.04	0.02	0.05	-0.09	-0.10	0.06	-0.06	-0.01	0.00
10	6	-0.11	0.01	-0.07	-0.02	0.14	0.01	-0.07	0.15	-0.11
11	1	-0.04	0.08	0.17	-0.14	-0.08	-0.05	0.19	-0.04	0.22
12	6	0.10	-0.05	0.02	0.03	0.12	-0.14	0.01	-0.04	-0.04
13	6	0.04	-0.05	-0.04	-0.10	-0.04	-0.07	-0.02	-0.03	0.11
14	6	0.18	-0.10	-0.02	0.07	0.15	-0.07	-0.04	-0.03	-0.04
15	1	-0.03	-0.04	0.20	0.07	0.13	-0.13	0.25	0.00	-0.04
16	6	-0.01	0.00	-0.03	-0.09	-0.10	0.01	-0.01	-0.05	0.01
17	6	-0.05	-0.06	-0.10	-0.05	-0.08	-0.03	-0.08	0.00	0.16
18	6	-0.06	0.02	0.05	0.02	-0.13	0.07	-0.12	-0.01	-0.04
19	8	0.18	-0.09	-0.04	0.26	0.07	0.04	-0.11	-0.03	0.03
20	6	0.30	-0.02	-0.05	-0.07	-0.02	0.03	-0.04	-0.04	0.01

21	6	-0.11	0.03	-0.02	0.11	0.09	-0.08	-0.05	0.20	-0.03
22	1	-0.13	-0.04	-0.18	-0.06	0.28	0.01	-0.11	0.15	-0.22
23	6	-0.08	-0.06	-0.07	-0.01	-0.08	0.08	-0.13	-0.07	-0.05
24	6	-0.07	0.05	0.11	0.14	-0.04	-0.05	-0.02	0.13	0.04
25	1	-0.12	0.01	-0.09	0.16	0.15	-0.16	-0.04	0.22	-0.02
26	1	-0.09	-0.10	-0.14	-0.06	-0.04	0.15	-0.11	-0.12	-0.14
27	1	-0.05	0.06	0.17	0.26	-0.09	-0.12	0.12	0.14	0.13
28	1	-0.07	-0.03	-0.12	-0.04	-0.09	-0.02	-0.08	0.03	0.17
29	1	0.36	-0.03	-0.07	-0.21	0.03	0.10	-0.09	-0.02	0.04
30	1	0.40	-0.04	-0.08	-0.16	-0.03	0.08	-0.01	-0.06	0.01
31	1	0.25	0.11	-0.02	0.03	-0.21	0.02	-0.01	-0.07	0.04
32	47	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00

		16				17			18	
		A				A			A	
Frequencies	--	426.2656				466.2487			483.0563	
Red. masses	--	4.7337				4.3409			5.9966	
Frc consts	--	0.5068				0.5560			0.8244	
IR Inten	--	0.0087				6.9044			0.6831	

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.10	-0.08	-0.12	-0.11	-0.02	-0.04	0.08	0.17	-0.13
2	6	-0.05	0.10	0.11	0.01	-0.02	0.13	0.01	0.17	0.04
3	6	-0.09	0.02	-0.06	-0.06	-0.07	0.05	0.06	0.22	-0.05
4	6	-0.09	0.10	-0.03	-0.01	-0.07	-0.12	0.02	-0.07	-0.08
5	1	0.02	0.13	0.25	0.07	0.00	0.25	-0.13	0.24	0.14
6	6	-0.03	-0.02	0.18	0.05	0.13	-0.01	-0.05	0.03	0.04
7	1	-0.07	-0.13	-0.26	-0.27	-0.01	-0.12	0.18	0.12	-0.22
8	6	0.03	-0.06	0.09	0.15	0.09	0.01	-0.15	0.03	0.06
9	6	0.00	-0.04	-0.01	0.09	0.07	-0.08	-0.10	-0.02	-0.03
10	6	0.04	-0.09	-0.11	0.03	-0.08	0.01	-0.21	-0.01	0.06
11	1	-0.02	0.07	0.31	0.00	0.28	-0.05	0.01	-0.12	0.09
12	6	-0.05	0.06	-0.11	0.02	-0.03	-0.05	0.07	-0.07	-0.01
13	6	0.00	0.11	0.09	-0.03	-0.10	0.05	0.11	-0.05	0.01
14	6	-0.03	-0.02	-0.11	0.03	0.11	-0.01	0.02	0.05	0.03
15	1	-0.09	0.10	-0.04	-0.05	-0.13	-0.23	-0.08	-0.18	-0.13
16	6	-0.01	0.02	0.02	-0.04	-0.08	-0.03	0.03	0.12	-0.07
17	6	0.08	0.13	0.15	-0.02	-0.11	0.08	0.19	-0.12	0.02
18	6	0.04	-0.08	-0.10	0.02	0.12	-0.06	0.03	-0.10	0.00
19	8	-0.02	-0.05	0.02	0.13	0.08	0.01	-0.05	0.09	0.01
20	6	0.05	0.02	0.01	-0.07	0.04	0.02	-0.08	0.00	0.00
21	6	0.12	-0.07	0.01	-0.12	-0.08	0.00	-0.07	-0.06	0.00
22	1	-0.01	-0.09	-0.26	0.07	-0.24	0.02	-0.21	0.02	0.06
23	6	0.00	0.00	-0.13	0.07	0.00	-0.05	0.12	-0.20	0.04
24	6	0.12	-0.03	0.09	-0.11	0.05	0.07	0.00	-0.12	0.08
25	1	0.13	-0.05	0.04	-0.19	-0.15	-0.02	0.02	0.03	-0.08
26	1	-0.08	-0.03	-0.21	0.22	-0.07	-0.13	0.13	-0.20	0.03
27	1	0.15	0.02	0.25	-0.21	0.11	0.18	-0.01	-0.09	0.16
28	1	0.11	0.09	0.18	0.01	-0.19	0.10	0.18	-0.09	0.02
29	1	-0.01	0.10	0.09	-0.15	0.06	0.05	-0.11	-0.03	-0.01
30	1	0.21	-0.06	0.01	-0.15	0.04	0.05	-0.23	0.03	0.04
31	1	0.05	0.08	0.11	-0.01	-0.09	-0.01	-0.03	-0.14	-0.07
32	47	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		19				20			21	
		A				A			A	
Frequencies	--	507.4534				514.0673			530.5448	
Red. masses	--	3.6824				5.0854			3.9766	
Frc consts	--	0.5587				0.7918			0.6595	
IR Inten	--	3.2162				2.1291			2.6365	

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.02	-0.01	-0.09	0.17	0.03	0.07	0.00	0.15
2	6	0.00	-0.01	0.12	-0.02	-0.10	0.01	-0.02	0.04	0.00
3	6	0.03	0.02	0.07	-0.01	-0.06	-0.01	-0.03	0.01	-0.15
4	6	-0.06	-0.05	-0.14	-0.02	-0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.01
5	1	-0.01	0.01	0.17	0.04	-0.10	0.06	-0.01	0.11	0.22

6	6	-0.02	-0.05	-0.03	-0.07	0.19	-0.09	-0.02	-0.11	-0.12
7	1	0.03	-0.05	-0.10	-0.21	0.22	0.09	0.20	0.06	0.41
8	6	0.01	-0.01	0.09	0.07	0.10	0.00	-0.01	-0.03	0.04
9	6	-0.03	-0.07	-0.09	0.13	-0.10	0.12	0.01	0.09	0.17
10	6	0.07	0.06	0.09	0.00	0.01	-0.06	0.01	-0.01	0.02
11	1	-0.04	-0.11	-0.14	-0.11	0.24	-0.18	-0.04	-0.16	-0.23
12	6	0.00	0.02	0.12	0.05	-0.01	-0.05	-0.02	-0.02	-0.03
13	6	0.03	0.06	0.01	0.11	0.03	-0.10	-0.02	-0.04	0.00
14	6	0.01	-0.05	0.16	0.04	0.03	0.04	-0.02	0.01	-0.01
15	1	-0.09	-0.11	-0.41	0.00	0.01	0.09	-0.01	0.00	0.13
16	6	0.00	-0.04	-0.14	0.13	-0.10	-0.06	-0.08	-0.02	-0.20
17	6	-0.03	0.09	-0.04	0.03	0.18	0.06	0.06	0.02	0.20
18	6	-0.01	-0.01	0.07	-0.02	-0.17	0.05	0.02	0.08	0.10
19	8	0.00	0.01	-0.06	-0.05	0.07	0.01	0.04	0.00	0.00
20	6	0.02	-0.01	-0.01	-0.04	-0.02	0.00	-0.01	0.03	0.01
21	6	0.00	-0.01	-0.18	-0.04	0.02	0.07	0.02	0.00	0.01
22	1	0.08	0.13	0.18	0.01	-0.15	-0.17	-0.03	0.00	-0.10
23	6	-0.09	0.02	-0.05	-0.14	-0.01	-0.03	-0.02	-0.09	-0.14
24	6	0.06	0.05	0.11	-0.02	-0.19	0.03	0.00	0.06	-0.03
25	1	-0.05	-0.09	-0.41	0.02	0.08	0.06	-0.03	-0.05	-0.08
26	1	-0.19	0.01	-0.10	-0.31	0.02	-0.04	-0.04	-0.24	-0.43
27	1	0.15	0.07	0.21	0.08	-0.24	-0.06	-0.08	0.01	-0.21
28	1	-0.05	0.12	-0.07	0.01	0.33	0.07	0.07	-0.01	0.21
29	1	0.21	-0.14	-0.15	-0.05	-0.06	-0.03	-0.02	0.05	0.02
30	1	-0.06	0.10	-0.07	-0.18	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01
31	1	-0.06	0.09	-0.10	0.00	-0.13	-0.07	-0.01	0.05	0.03
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

22

23

24

		A			A			A		
Frequencies	--	550.0285			561.3733			578.5473		
Red. masses	--	3.9875			5.2205			4.9287		
Frc consts	--	0.7108			0.9693			0.9720		
IR Inten	--	5.7774			8.6922			16.9737		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.07	-0.04	-0.05	0.00	0.00	0.14	0.10	-0.08
2	6	-0.07	0.02	0.03	-0.04	0.17	-0.03	-0.11	-0.03	0.04
3	6	0.00	0.07	0.06	-0.08	0.08	-0.07	0.06	0.10	-0.04
4	6	-0.05	-0.10	-0.02	0.01	0.04	0.00	-0.12	-0.09	0.04
5	1	-0.17	0.04	0.05	-0.05	0.19	0.03	-0.28	0.01	0.04
6	6	0.00	-0.10	0.07	-0.04	-0.02	0.03	0.12	0.05	-0.02
7	1	0.08	-0.15	-0.24	0.05	0.01	0.11	0.19	0.10	-0.08
8	6	0.03	-0.04	0.13	0.09	-0.10	-0.12	0.06	-0.01	-0.06
9	6	0.00	0.03	0.08	0.04	-0.04	-0.06	0.01	-0.05	-0.02
10	6	0.06	-0.03	-0.15	0.22	-0.01	0.01	0.10	0.01	-0.01
11	1	-0.03	-0.15	-0.04	-0.03	0.12	0.18	0.16	0.00	0.06
12	6	0.03	-0.09	-0.02	0.13	-0.03	-0.05	-0.11	-0.05	0.02
13	6	0.02	-0.08	-0.17	0.09	-0.04	0.11	-0.02	-0.01	0.02
14	6	0.05	0.03	0.15	0.11	0.05	-0.07	-0.12	0.04	-0.12
15	1	-0.11	-0.16	0.02	-0.10	-0.06	0.09	-0.12	-0.11	0.02
16	6	0.02	0.04	-0.01	0.06	0.03	0.02	0.04	0.04	0.01
17	6	-0.02	0.02	0.03	-0.14	-0.10	0.02	-0.09	-0.03	0.00
18	6	-0.10	0.00	-0.13	-0.09	0.02	0.12	-0.06	-0.09	0.07
19	8	0.05	0.09	-0.03	-0.15	0.10	0.07	0.23	-0.09	0.00
20	6	-0.03	0.01	0.00	0.02	-0.10	-0.03	-0.09	0.16	0.03
21	6	0.06	0.08	0.09	0.03	0.02	-0.06	0.03	0.01	-0.02
22	1	-0.02	-0.04	-0.41	0.27	0.02	0.18	0.13	0.00	0.06
23	6	-0.05	0.00	0.07	-0.15	-0.12	0.07	-0.13	-0.09	0.07
24	6	-0.02	0.10	-0.09	-0.01	0.10	-0.03	0.03	-0.04	0.00
25	1	0.03	0.06	0.26	-0.08	-0.11	-0.02	0.02	-0.01	-0.01
26	1	0.03	0.09	0.27	-0.15	-0.18	-0.03	-0.19	-0.08	0.08
27	1	0.01	0.10	-0.08	0.05	0.07	-0.07	0.13	-0.06	-0.01
28	1	0.01	0.18	0.12	-0.22	-0.02	-0.08	-0.14	0.03	-0.06
29	1	0.10	-0.14	-0.14	-0.15	-0.08	0.04	-0.18	0.34	0.18

30	1	-0.26	0.15	-0.02	-0.16	-0.11	0.06	0.22	0.00	0.05
31	1	-0.05	-0.03	-0.14	0.16	-0.39	-0.08	-0.09	0.29	0.21
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
			25			26			27	
			A			A			A	
Frequencies	--	586.7653			606.2778			658.0350		
Red. masses	--	3.1880			4.7009			3.4373		
Frc consts	--	0.6467			1.0181			0.8769		
IR Inten	--	1.8192			1.8271			23.1903		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.02	0.07	0.03	0.07	-0.01	0.01	0.01	0.02
2	6	-0.03	-0.01	-0.15	0.07	0.17	-0.05	0.00	0.01	0.04
3	6	0.02	0.05	0.13	0.00	0.05	0.01	0.00	0.01	0.01
4	6	0.03	0.03	0.12	0.03	0.19	-0.06	-0.01	-0.02	-0.04
5	1	-0.08	-0.07	-0.39	0.16	0.15	-0.07	-0.02	0.00	-0.03
6	6	-0.02	-0.02	-0.08	0.09	0.11	-0.07	0.00	-0.01	-0.02
7	1	-0.02	-0.03	-0.10	-0.05	0.07	-0.08	0.00	-0.01	-0.04
8	6	0.05	0.03	0.14	0.11	0.08	0.05	0.03	0.04	0.14
9	6	-0.01	-0.02	-0.07	0.03	0.01	0.02	0.00	0.00	0.02
10	6	0.03	0.01	0.05	0.05	-0.05	-0.05	-0.02	-0.02	-0.07
11	1	-0.10	-0.10	-0.40	0.05	0.13	-0.20	-0.04	-0.06	-0.18
12	6	0.01	-0.01	-0.02	-0.04	0.12	0.03	0.03	0.05	0.25
13	6	-0.01	-0.05	-0.08	-0.15	-0.06	-0.02	0.02	0.01	0.06
14	6	0.00	0.03	-0.11	-0.04	-0.11	0.15	0.02	0.04	-0.20
15	1	0.03	0.04	0.24	0.06	0.21	-0.11	-0.07	-0.11	-0.36
16	6	0.01	0.01	0.02	-0.09	-0.02	-0.05	-0.04	-0.05	-0.17
17	6	0.02	0.00	0.10	-0.13	-0.15	0.07	-0.04	-0.02	-0.09
18	6	-0.05	-0.04	-0.15	-0.02	-0.08	-0.04	-0.01	-0.01	-0.03
19	8	-0.02	-0.01	0.04	-0.04	-0.08	-0.07	-0.05	0.00	0.07
20	6	-0.01	0.00	-0.01	0.05	-0.04	0.01	0.03	-0.04	-0.04
21	6	-0.03	-0.03	-0.11	0.04	-0.04	0.05	0.02	0.02	0.08
22	1	0.04	0.00	0.05	0.04	-0.16	-0.18	-0.08	-0.09	-0.34
23	6	-0.01	-0.04	-0.03	-0.03	-0.10	0.08	0.01	0.04	0.06
24	6	0.02	0.06	0.13	0.02	-0.08	0.00	-0.01	-0.02	-0.05
25	1	-0.08	-0.08	-0.22	0.05	-0.03	0.07	0.02	0.02	0.07
26	1	0.06	0.01	0.10	0.06	-0.07	0.17	0.03	0.09	0.17
27	1	0.09	0.14	0.40	0.04	-0.09	-0.01	-0.03	-0.05	-0.16
28	1	0.07	0.08	0.20	-0.07	-0.16	0.18	-0.03	0.01	-0.07
29	1	-0.14	0.10	0.10	0.35	-0.19	-0.19	-0.29	0.21	0.23
30	1	0.05	-0.09	0.04	0.08	0.09	-0.12	0.20	-0.26	0.08
31	1	0.06	-0.08	0.06	-0.12	0.25	-0.06	0.18	-0.21	0.11
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			28			29			30	
			A			A			A	
Frequencies	--	682.6976			704.7389			719.5368		
Red. masses	--	4.9937			6.9690			3.7462		
Frc consts	--	1.3713			2.0393			1.1427		
IR Inten	--	9.9752			1.1963			12.4849		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.15	-0.01	0.01	-0.10	0.20	-0.02	-0.02	-0.02	-0.10
2	6	0.12	0.07	-0.03	0.15	0.02	-0.04	0.01	0.00	-0.02
3	6	-0.01	0.00	0.04	0.03	0.06	-0.06	0.05	0.06	0.23
4	6	0.13	0.05	-0.03	0.28	-0.24	0.01	0.02	0.00	0.04
5	1	0.20	0.02	-0.14	0.02	0.06	0.03	-0.09	-0.10	-0.45
6	6	-0.19	-0.02	0.07	-0.23	0.07	0.01	0.04	0.05	0.10
7	1	-0.12	-0.04	-0.03	-0.08	0.21	0.03	-0.10	-0.09	-0.37
8	6	0.04	-0.06	0.00	-0.05	-0.04	0.04	-0.03	-0.02	-0.12
9	6	0.04	-0.04	0.00	-0.07	0.06	0.01	-0.03	0.01	-0.05
10	6	0.11	0.00	-0.04	0.03	-0.12	0.03	-0.02	-0.02	-0.02
11	1	-0.22	0.08	0.06	-0.23	0.08	0.01	0.05	0.07	0.17
12	6	0.02	0.03	0.07	0.03	-0.12	0.02	-0.01	0.02	0.08
13	6	0.13	0.01	-0.05	-0.05	-0.03	0.04	-0.07	-0.08	-0.18
14	6	-0.14	-0.08	0.00	-0.03	-0.01	0.01	0.01	0.02	-0.04

15	1	0.15	0.05	-0.15	0.27	-0.24	0.07	-0.01	-0.06	-0.20
16	6	0.10	-0.01	-0.05	-0.07	0.07	0.01	-0.05	-0.01	-0.06
17	6	0.17	-0.01	-0.05	-0.19	0.05	0.01	0.02	0.06	0.13
18	6	-0.06	0.03	0.05	0.01	0.05	-0.05	0.06	0.07	0.20
19	8	0.02	-0.16	-0.04	0.04	-0.03	-0.01	-0.02	0.01	0.02
20	6	-0.14	0.13	0.04	-0.05	0.03	0.02	0.03	-0.03	-0.02
21	6	-0.09	0.08	0.02	0.24	-0.23	0.00	0.04	-0.02	0.04
22	1	0.13	-0.07	-0.05	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.02	0.05
23	6	0.02	-0.12	0.04	-0.08	0.17	-0.04	-0.04	-0.03	-0.08
24	6	-0.11	0.11	-0.03	0.11	0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.04
25	1	-0.21	-0.04	0.09	0.22	-0.25	0.01	0.05	-0.02	0.01
26	1	0.01	-0.13	0.03	-0.07	0.19	0.00	-0.11	-0.13	-0.31
27	1	-0.10	0.09	-0.09	-0.03	0.05	0.03	-0.08	-0.10	-0.32
28	1	0.12	0.08	-0.11	-0.17	0.06	0.05	0.02	0.08	0.14
29	1	-0.02	0.19	0.05	-0.02	0.04	0.01	-0.05	0.02	0.04
30	1	0.13	0.06	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.04	-0.07	0.01
31	1	-0.25	0.41	0.16	-0.06	0.07	0.03	0.07	-0.09	0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		31			32			33		
		A			A			A		
Frequencies	--	773.7132			775.8323			817.7513		
Red. masses	--	3.7214			3.9818			1.2889		
Frc consts	--	1.3126			1.4121			0.5078		
IR Inten	--	13.8505			9.6413			12.0837		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.12	-0.07	-0.04	-0.17	0.01	-0.01	-0.01	-0.03
2	6	0.02	-0.13	0.09	0.02	0.20	0.00	0.01	0.01	0.03
3	6	0.04	-0.05	-0.06	-0.09	0.03	-0.04	-0.01	-0.01	-0.02
4	6	-0.06	0.05	-0.04	0.07	-0.07	-0.04	0.00	0.00	0.00
5	1	0.07	-0.16	0.04	-0.05	0.21	-0.03	-0.02	-0.03	-0.10
6	6	-0.05	0.03	-0.01	0.08	-0.03	-0.02	-0.01	-0.01	-0.05
7	1	0.04	0.20	0.20	0.03	-0.10	0.27	0.07	0.08	0.32
8	6	-0.04	-0.06	-0.08	0.01	0.02	-0.12	0.00	0.00	0.01
9	6	-0.01	0.05	0.18	0.08	0.05	0.15	-0.01	-0.01	-0.05
10	6	0.06	-0.05	0.03	-0.03	0.07	0.02	0.01	0.01	0.06
11	1	0.02	0.05	0.26	0.11	0.14	0.23	0.07	0.09	0.28
12	6	-0.06	0.09	0.12	0.06	-0.04	0.15	0.00	0.00	0.01
13	6	-0.06	0.00	-0.14	-0.01	-0.10	-0.12	-0.01	-0.01	-0.03
14	6	0.01	0.02	-0.03	-0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
15	1	0.02	0.10	-0.33	-0.08	-0.24	-0.16	-0.01	-0.03	-0.12
16	6	0.00	0.03	0.06	-0.01	0.01	0.06	0.01	0.02	0.06
17	6	0.07	-0.02	0.01	-0.05	0.04	0.02	0.01	0.00	0.00
18	6	-0.07	0.00	-0.09	0.02	-0.07	-0.08	0.00	-0.01	-0.02
19	8	-0.02	0.03	0.02	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00
20	6	0.06	-0.06	-0.03	-0.04	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00
21	6	0.03	-0.09	-0.07	-0.07	0.05	-0.08	0.01	0.01	0.05
22	1	0.12	0.07	0.32	0.04	0.10	0.30	-0.10	-0.13	-0.41
23	6	0.00	-0.11	0.02	-0.02	0.09	-0.05	-0.01	-0.02	-0.03
24	6	0.00	0.12	0.00	0.02	-0.12	0.07	0.01	0.02	0.06
25	1	-0.01	-0.13	0.19	0.07	0.21	0.05	-0.12	-0.15	-0.50
26	1	0.08	-0.03	0.20	-0.01	0.17	0.12	0.05	0.08	0.19
27	1	0.00	0.24	0.32	0.17	-0.06	0.31	-0.10	-0.12	-0.40
28	1	0.13	0.08	0.14	0.05	0.14	0.19	0.07	0.06	0.12
29	1	0.00	-0.02	0.02	-0.11	0.12	0.07	0.00	0.00	0.00
30	1	0.08	-0.09	-0.01	0.05	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.00
31	1	0.09	-0.10	-0.01	-0.02	0.04	0.06	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		34			35			36		
		A			A			A		
Frequencies	--	832.7294			854.4769			859.3717		
Red. masses	--	4.6412			2.7019			2.4821		
Frc consts	--	1.8962			1.1623			1.0800		
IR Inten	--	4.3271			0.1473			2.6346		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.08	-0.16	0.09	0.01	0.03	0.05	0.02	0.02	0.04
2	6	0.02	0.01	-0.02	0.02	0.00	-0.05	-0.03	-0.02	-0.04
3	6	-0.08	-0.05	0.00	0.00	0.02	-0.07	0.00	-0.04	-0.02
4	6	0.05	-0.06	-0.01	0.04	-0.09	-0.08	-0.08	0.08	-0.09
5	1	0.06	0.05	0.15	0.06	0.18	0.58	0.20	0.09	0.51
6	6	0.20	0.11	-0.08	-0.03	0.00	0.04	0.02	0.01	0.04
7	1	-0.35	-0.12	0.05	-0.03	-0.07	-0.30	-0.08	-0.07	-0.31
8	6	0.02	0.09	0.01	0.04	-0.02	0.00	-0.05	0.00	-0.03
9	6	-0.13	0.09	-0.05	-0.04	-0.04	-0.07	0.03	0.00	-0.03
10	6	-0.07	-0.06	0.02	0.12	0.02	-0.04	-0.11	-0.02	0.04
11	1	0.11	0.29	-0.23	-0.11	-0.07	-0.28	-0.02	-0.11	-0.21
12	6	0.00	-0.03	0.02	-0.08	0.01	0.10	0.10	0.03	0.08
13	6	0.04	0.07	-0.02	-0.12	0.00	-0.07	0.08	-0.06	-0.07
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.01	0.02	-0.03	-0.01
15	1	0.05	-0.06	0.11	0.14	0.05	0.36	-0.05	0.15	0.34
16	6	-0.09	0.10	0.03	-0.05	0.06	0.12	0.10	-0.03	0.06
17	6	0.16	0.10	-0.08	0.07	0.03	0.00	-0.09	-0.04	0.03
18	6	-0.08	-0.01	0.03	0.01	-0.03	0.05	0.01	0.05	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.01	-0.02	-0.05	-0.01
20	6	0.00	0.01	0.00	0.06	-0.06	-0.03	-0.05	0.06	0.00
21	6	0.12	-0.11	0.01	-0.08	0.07	0.02	0.07	-0.05	0.01
22	1	-0.08	0.00	0.01	0.14	-0.08	-0.04	-0.14	0.08	0.03
23	6	-0.10	-0.19	0.10	0.03	0.00	-0.03	-0.04	0.00	-0.04
24	6	0.05	0.06	-0.05	-0.04	-0.05	0.03	0.04	0.06	0.00
25	1	0.14	-0.09	0.05	-0.14	-0.01	-0.06	0.08	-0.05	-0.15
26	1	-0.32	-0.14	0.14	-0.03	0.03	-0.01	0.12	0.06	0.14
27	1	0.01	0.09	0.01	0.01	-0.12	-0.13	-0.10	0.02	-0.19
28	1	0.02	0.29	-0.26	0.10	-0.05	0.01	0.00	0.13	0.23
29	1	-0.03	0.02	0.01	0.02	-0.02	0.01	-0.12	0.12	0.07
30	1	-0.01	0.00	0.01	0.10	-0.10	-0.02	0.01	-0.02	0.04
31	1	0.01	-0.02	0.01	0.08	-0.08	0.00	-0.03	0.05	0.06
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies	-- 879.0161	908.9000	925.8249
Red. masses	-- 2.8060	1.5020	1.5968
Frc consts	-- 1.2774	0.7311	0.8064
IR Inten	-- 0.7182	10.2637	136.9528

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.07	-0.01	-0.02	-0.06
2	6	-0.01	-0.02	-0.06	-0.01	-0.01	-0.06	-0.01	-0.02	-0.03
3	6	0.02	0.03	0.11	0.03	0.02	0.11	0.02	0.02	0.06
4	6	0.02	-0.03	0.00	-0.01	-0.01	-0.07	0.00	-0.01	-0.04
5	1	0.00	0.03	0.12	0.07	0.08	0.29	0.02	0.02	0.11
6	6	0.02	0.03	0.06	-0.01	-0.01	-0.05	-0.02	-0.02	-0.05
7	1	-0.11	-0.11	-0.37	0.05	0.07	0.22	0.08	0.09	0.33
8	6	-0.03	-0.05	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.08
9	6	0.02	0.05	0.17	0.01	0.00	0.03	-0.01	-0.01	-0.04
10	6	0.04	0.01	0.03	0.00	0.01	0.04	0.00	-0.01	-0.04
11	1	0.00	0.03	-0.02	0.09	0.11	0.40	0.06	0.08	0.28
12	6	-0.02	-0.02	-0.05	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.07	0.13	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.03	0.04
14	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
15	1	0.07	0.04	0.27	0.06	0.12	0.46	0.05	0.07	0.29
16	6	-0.07	-0.02	-0.16	0.00	-0.02	-0.04	-0.01	0.00	-0.01
17	6	0.02	-0.01	-0.07	0.01	0.01	0.02	-0.01	-0.02	-0.03
18	6	-0.03	-0.04	-0.07	-0.02	-0.01	-0.05	0.03	0.03	0.10
19	8	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
20	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01
21	6	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.03
22	1	0.05	-0.01	0.03	-0.06	-0.06	-0.21	0.04	0.03	0.13
23	6	-0.01	-0.03	-0.03	0.02	0.03	0.07	-0.02	-0.04	-0.09

24	6	0.01	0.02	0.08	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	-0.04
25	1	-0.11	-0.11	-0.32	-0.01	-0.03	-0.08	0.07	0.11	0.35
26	1	0.10	0.22	0.48	-0.10	-0.18	-0.37	0.11	0.21	0.44
27	1	-0.06	-0.10	-0.28	0.04	0.05	0.15	0.02	0.03	0.09
28	1	0.17	0.07	0.19	-0.16	-0.11	-0.28	0.22	0.14	0.38
29	1	0.02	-0.02	-0.01	-0.04	0.03	0.03	0.00	0.01	0.01
30	1	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.04	0.01	0.02	-0.02	0.00
31	1	0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.03	0.01	0.00	0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		40			41			42		
		A			A			A		
Frequencies	--	977.4014			983.0969			1006.8858		
Red. masses	--	3.4201			1.5185			3.0941		
Frc consts	--	1.9250			0.8647			1.8482		
IR Inten	--	10.2247			2.9194			45.0235		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	-0.10	0.06	-0.02	-0.03	-0.03	-0.01	-0.03	0.01
2	6	0.01	-0.11	0.02	0.00	-0.02	0.01	0.01	-0.14	0.02
3	6	0.03	0.05	-0.03	0.01	0.01	0.01	0.04	0.01	0.00
4	6	0.02	-0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.05	0.00
5	1	-0.06	-0.09	0.06	-0.02	-0.02	-0.03	0.08	-0.13	0.11
6	6	-0.09	-0.05	0.04	-0.02	-0.01	0.00	-0.04	-0.03	0.01
7	1	0.06	-0.19	-0.10	0.07	0.03	0.23	0.04	-0.04	0.02
8	6	0.04	0.03	-0.05	0.02	0.02	0.04	0.02	0.01	0.00
9	6	0.10	0.12	-0.06	0.02	0.02	-0.01	-0.07	0.13	-0.02
10	6	-0.06	0.03	0.07	-0.05	-0.03	-0.10	0.09	0.03	-0.05
11	1	-0.15	0.12	0.02	-0.04	0.02	-0.03	-0.06	0.05	0.03
12	6	-0.07	0.04	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.05	0.01	0.00
13	6	0.05	0.06	-0.03	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.03	-0.02
14	6	-0.09	0.05	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.13	-0.07	0.01
15	1	0.18	0.13	-0.10	0.05	0.06	0.09	0.05	0.10	-0.10
16	6	0.10	0.14	-0.06	0.03	0.02	-0.02	-0.07	0.14	-0.02
17	6	-0.11	-0.07	0.03	-0.02	0.00	0.02	-0.04	-0.03	0.01
18	6	0.04	0.05	-0.01	-0.01	-0.01	-0.06	0.01	0.01	-0.02
19	8	0.03	0.07	0.02	0.01	0.02	0.01	-0.04	-0.11	-0.03
20	6	0.02	-0.11	-0.01	0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.17	0.02
21	6	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.00
22	1	-0.14	-0.10	-0.27	0.12	0.17	0.59	0.13	0.02	0.05
23	6	-0.04	-0.09	0.05	0.00	-0.01	0.04	0.00	-0.03	0.03
24	6	0.01	-0.12	-0.02	0.03	0.02	0.11	-0.01	-0.14	0.06
25	1	0.16	0.18	-0.15	0.05	0.05	0.02	0.04	0.07	-0.05
26	1	0.10	-0.18	-0.04	0.01	-0.08	-0.10	0.01	-0.10	-0.11
27	1	0.08	-0.01	0.32	-0.14	-0.20	-0.58	-0.01	-0.18	0.00
28	1	-0.06	0.18	0.20	-0.13	-0.05	-0.16	0.00	0.06	0.10
29	1	0.24	-0.09	-0.05	0.06	-0.01	-0.01	-0.37	0.09	0.06
30	1	0.27	-0.11	-0.13	0.09	-0.04	-0.03	-0.48	0.20	0.20
31	1	-0.11	0.17	0.04	-0.03	0.05	0.02	0.23	-0.35	-0.11
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies	--	1021.1156			1037.3552			1043.4718		
Red. masses	--	1.3910			1.2911			1.3857		
Frc consts	--	0.8545			0.8186			0.8890		
IR Inten	--	1.4332			6.2766			1.8399		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.03	-0.02	-0.02	-0.08
2	6	-0.02	-0.02	-0.11	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	-0.05
3	6	0.00	0.01	0.03	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.01	0.03
4	6	0.02	0.02	0.11	0.01	0.00	0.03	0.01	0.01	0.03
5	1	0.11	0.16	0.59	0.02	0.05	0.15	0.04	0.06	0.22
6	6	-0.01	-0.02	-0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.08
7	1	-0.03	-0.05	-0.18	-0.01	0.06	0.15	0.13	0.11	0.44
8	6	0.01	0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01





		49			50			51		
		A			A			A		
Frequencies	--	1113.1379			1142.1957			1176.8440		
Red. masses	--	2.1445			2.5421			2.1863		
Frc consts	--	1.5656			1.9540			1.7840		
IR Inten	--	3.6700			0.7617			9.0909		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.02	0.00	0.07	0.08	-0.04	-0.01	0.01	0.00
2	6	0.02	0.06	-0.02	0.03	0.03	-0.01	0.08	0.04	-0.02
3	6	0.01	-0.02	0.00	-0.03	-0.06	0.02	0.01	-0.03	0.01
4	6	-0.01	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.00	-0.10	0.05	0.01
5	1	0.05	0.06	-0.03	0.30	-0.04	-0.06	0.63	-0.10	-0.11
6	6	-0.01	0.00	0.00	-0.09	-0.07	0.04	0.02	0.02	-0.01
7	1	0.02	-0.03	0.00	0.33	0.02	-0.08	-0.25	0.08	0.04
8	6	-0.04	0.04	0.00	0.07	0.04	-0.03	-0.03	-0.05	0.02
9	6	0.04	-0.02	0.00	0.09	0.12	-0.06	-0.07	0.03	0.01
10	6	0.06	0.13	-0.05	-0.03	-0.02	0.01	0.03	-0.02	0.00
11	1	0.01	-0.07	0.01	-0.03	-0.29	0.09	0.05	-0.05	0.00
12	6	-0.09	-0.03	0.01	0.01	-0.04	0.00	-0.08	-0.11	0.03
13	6	0.01	0.00	0.01	-0.04	-0.08	0.06	0.10	-0.07	0.01
14	6	-0.06	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.04	0.00
15	1	-0.03	-0.01	0.00	-0.18	-0.10	0.06	-0.19	-0.03	0.03
16	6	0.05	-0.06	0.01	-0.10	-0.09	0.05	0.02	0.06	-0.02
17	6	0.02	-0.01	-0.02	0.07	0.06	-0.07	-0.03	0.00	0.01
18	6	-0.03	0.05	-0.01	0.03	0.06	-0.04	-0.01	0.01	0.00
19	8	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.03	0.02	0.00
20	6	0.06	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.08	-0.01	0.00
21	6	0.10	-0.10	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.04	0.02	0.00
22	1	-0.08	0.58	-0.15	0.03	-0.24	0.06	0.05	-0.09	0.01
23	6	-0.01	-0.01	0.01	-0.06	-0.06	0.06	0.01	0.03	-0.03
24	6	-0.12	-0.07	0.05	0.01	-0.03	0.01	0.04	-0.03	0.00
25	1	0.13	-0.09	0.00	0.22	0.25	-0.13	-0.12	-0.06	0.05
26	1	0.05	-0.04	-0.02	-0.36	-0.04	0.02	0.22	0.00	-0.02
27	1	-0.62	0.04	0.13	-0.07	-0.02	0.01	0.34	-0.10	-0.04
28	1	0.04	0.09	0.05	0.05	0.41	0.00	-0.13	0.25	-0.07
29	1	-0.07	-0.05	-0.01	0.03	-0.01	-0.01	-0.03	-0.10	-0.03
30	1	-0.12	0.03	0.05	0.03	-0.01	-0.01	-0.08	0.01	0.04
31	1	0.14	-0.18	-0.08	-0.03	0.04	0.01	0.12	-0.17	-0.10
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
		52			53			54		
		A			A			A		
Frequencies	--	1185.6555			1206.1332			1228.5401		
Red. masses	--	1.6408			1.3373			1.3520		
Frc consts	--	1.3590			1.1462			1.2023		
IR Inten	--	1.9135			8.8423			0.5668		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.06	-0.01	0.04	-0.04	0.00	0.01	-0.02	0.00
2	6	-0.03	0.03	0.00	0.03	0.00	0.00	0.04	0.03	-0.01
3	6	-0.05	-0.04	0.02	0.01	0.01	-0.01	0.06	-0.02	-0.01
4	6	0.05	-0.05	0.00	-0.03	-0.02	0.01	-0.04	-0.03	0.02
5	1	-0.19	0.07	0.03	0.08	-0.01	-0.01	0.22	-0.02	-0.04
6	6	0.04	-0.02	0.00	-0.05	0.03	0.01	-0.01	0.02	0.00
7	1	-0.31	0.14	0.03	0.48	-0.16	-0.07	0.05	-0.03	0.00
8	6	-0.03	-0.03	0.01	0.01	0.04	-0.01	0.02	-0.03	0.01
9	6	0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.01	-0.05	-0.06	0.03
10	6	0.03	0.00	-0.01	0.00	0.04	-0.01	0.00	-0.02	0.01
11	1	0.17	-0.41	0.08	-0.17	0.38	-0.07	-0.11	0.32	-0.07
12	6	0.01	0.05	-0.01	0.01	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00
13	6	0.01	0.09	-0.03	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.08	-0.03
14	6	0.01	-0.01	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.03	-0.02	-0.01
15	1	0.01	-0.10	0.02	-0.13	-0.12	0.06	-0.34	-0.32	0.13
16	6	-0.03	-0.04	0.02	-0.04	-0.04	0.02	0.00	0.01	0.00
17	6	-0.07	0.03	0.01	-0.03	0.04	0.00	-0.02	0.00	0.01

18	6	0.07	0.04	-0.03	0.03	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.01
19	8	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
20	6	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
21	6	-0.03	0.02	0.00	-0.04	-0.05	0.02	0.03	0.03	-0.01
22	1	0.04	-0.05	0.00	-0.05	0.18	-0.04	0.07	-0.25	0.06
23	6	0.03	-0.09	0.01	0.03	-0.04	0.00	0.02	-0.01	0.00
24	6	0.00	-0.02	0.01	0.04	0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00
25	1	-0.03	0.02	0.00	-0.31	-0.34	0.17	0.36	0.38	-0.20
26	1	0.50	-0.19	0.00	0.25	-0.09	0.00	0.25	-0.07	-0.03
27	1	-0.05	-0.01	0.02	0.16	-0.01	-0.03	-0.30	0.07	0.05
28	1	-0.26	0.43	-0.16	-0.14	0.29	-0.09	-0.01	-0.09	0.00
29	1	-0.01	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
30	1	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01
31	1	-0.01	0.01	0.01	-0.03	0.04	0.02	-0.04	0.06	0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		55			56			57		
		A			A			A		
Frequencies	--	1240.3303			1266.9214			1283.4040		
Red. masses	--	1.5110			2.0347			2.2003		
Frc consts	--	1.3696			1.9242			2.1353		
IR Inten	--	32.0205			3.1276			131.5097		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.01	0.00	0.02	0.07	-0.02	-0.01	-0.02	0.01
2	6	-0.02	-0.03	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.02	0.06	-0.02
3	6	-0.04	0.05	0.00	-0.13	0.01	0.03	0.19	-0.05	-0.03
4	6	0.02	0.03	-0.02	0.03	-0.05	0.01	-0.05	0.05	0.00
5	1	-0.25	0.03	0.04	0.29	-0.11	-0.03	-0.45	0.20	0.04
6	6	0.02	0.02	-0.01	0.04	0.00	-0.01	-0.05	-0.03	0.02
7	1	0.22	-0.05	-0.04	0.07	0.07	-0.03	-0.45	0.08	0.08
8	6	0.02	-0.05	0.01	0.08	-0.15	0.03	0.03	0.02	-0.01
9	6	-0.06	-0.04	0.03	0.08	0.02	-0.02	0.00	0.05	-0.02
10	6	0.00	-0.01	0.00	-0.05	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00
11	1	-0.06	0.30	-0.07	0.02	0.10	-0.03	-0.09	0.07	0.00
12	6	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.05	-0.01	-0.05	-0.04	0.01
13	6	0.06	-0.11	0.04	-0.02	0.03	-0.01	-0.07	-0.05	0.04
14	6	-0.03	0.02	0.02	0.02	-0.01	0.00	0.10	-0.02	-0.02
15	1	0.38	0.39	-0.14	-0.03	-0.12	0.04	-0.09	0.02	0.01
16	6	-0.03	-0.04	0.02	-0.01	0.02	0.00	0.03	-0.04	0.01
17	6	0.02	0.02	-0.02	0.03	0.00	-0.01	0.04	0.03	-0.03
18	6	-0.05	0.03	0.01	-0.12	0.06	0.01	-0.12	0.05	0.02
19	8	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00
20	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.01
21	6	0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.03	0.00
22	1	0.03	-0.11	0.03	-0.26	0.59	-0.12	-0.05	0.12	-0.02
23	6	0.02	0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
24	6	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.01	-0.01	-0.04	0.01
25	1	0.26	0.28	-0.15	0.11	0.12	-0.06	0.05	0.00	-0.01
26	1	0.26	-0.02	-0.05	0.22	-0.05	-0.03	0.30	-0.06	-0.04
27	1	-0.08	0.01	0.02	0.42	-0.15	-0.05	0.47	-0.17	-0.06
28	1	-0.09	0.38	-0.09	0.11	-0.20	0.05	0.04	0.12	-0.02
29	1	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.06	0.03	0.00
30	1	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.01	-0.03
31	1	0.04	-0.06	-0.01	0.00	0.01	0.01	-0.08	0.10	0.06
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		58			59			60		
		A			A			A		
Frequencies	--	1290.1869			1308.3743			1362.7380		
Red. masses	--	1.8466			2.4886			2.9391		
Frc consts	--	1.8110			2.5100			3.2158		
IR Inten	--	4.9848			259.8884			9.8475		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.02	0.01	-0.03	0.00	0.01	-0.06	-0.04	0.02
2	6	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.03	-0.11	0.02

3	6	-0.06	-0.01	0.01	-0.07	0.05	0.00	0.03	0.17	-0.05
4	6	0.03	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.03	-0.02	0.00	0.53	-0.13	-0.08	0.19	-0.16	0.00
6	6	-0.02	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01
7	1	0.36	-0.11	-0.05	0.12	-0.04	-0.02	-0.36	0.04	0.07
8	6	-0.02	0.15	-0.04	0.00	0.05	-0.01	0.09	0.05	-0.04
9	6	-0.03	0.02	0.00	0.04	-0.07	0.01	0.07	-0.08	0.01
10	6	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.00	-0.06	0.04	0.00
11	1	0.09	-0.39	0.09	0.10	-0.27	0.05	0.10	-0.35	0.08
12	6	0.03	0.04	-0.01	-0.15	-0.14	0.04	0.07	0.11	-0.03
13	6	0.03	0.03	-0.02	-0.04	0.02	0.01	-0.10	-0.14	0.07
14	6	-0.06	0.01	0.01	0.22	-0.06	-0.05	-0.03	0.03	0.03
15	1	-0.02	-0.07	0.02	0.34	0.36	-0.13	-0.28	-0.28	0.12
16	6	0.03	-0.04	0.01	0.02	0.05	-0.02	-0.03	0.09	-0.02
17	6	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.03	-0.02
18	6	-0.15	0.01	0.04	-0.02	-0.04	0.02	-0.06	-0.10	0.05
19	8	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.04	0.01	-0.01	-0.04	-0.01
20	6	0.02	0.00	0.00	-0.09	0.01	0.02	0.02	-0.01	-0.01
21	6	0.06	-0.05	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.02	-0.03	0.01
22	1	0.18	-0.41	0.08	0.02	-0.08	0.02	-0.06	0.04	0.00
23	6	0.00	0.03	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.05	0.03	-0.03
24	6	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.00	0.05	-0.02
25	1	0.08	-0.04	-0.01	0.00	-0.03	0.01	0.02	-0.02	0.00
26	1	0.40	-0.06	-0.06	0.24	-0.05	-0.04	0.18	0.01	-0.04
27	1	0.33	-0.12	-0.04	-0.12	0.06	0.01	-0.24	0.12	0.02
28	1	0.12	-0.27	0.05	-0.03	0.07	-0.01	-0.10	0.42	-0.11
29	1	-0.03	-0.02	0.00	0.12	0.10	0.02	-0.06	0.00	0.01
30	1	-0.02	0.00	0.02	0.06	0.04	-0.06	-0.02	-0.01	0.02
31	1	0.04	-0.05	-0.03	-0.13	0.16	0.13	0.00	0.02	-0.02
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

61

62

63

		A			A			A		
Frequencies	--	1386.5064			1416.1766			1427.6322		
Red. masses	--	5.1991			3.1493			6.2180		
Frc consts	--	5.8888			3.7214			7.4668		
IR Inten	--	14.4471			100.8251			15.8532		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.03	0.01	-0.06	0.00	0.01	-0.04	0.07	-0.01
2	6	0.16	-0.01	-0.03	-0.02	-0.01	0.01	-0.16	0.02	0.03
3	6	-0.02	0.14	-0.03	-0.03	0.03	0.00	-0.02	-0.03	0.01
4	6	-0.11	-0.13	0.05	0.06	-0.04	0.00	0.10	0.04	-0.03
5	1	-0.05	0.05	0.00	0.13	-0.05	-0.01	0.32	-0.11	-0.04
6	6	-0.01	0.00	0.00	0.07	0.03	-0.02	0.05	-0.11	0.02
7	1	-0.32	0.05	0.06	0.27	-0.08	-0.04	-0.04	0.08	-0.02
8	6	0.09	-0.03	-0.01	-0.16	-0.02	0.04	0.15	-0.05	-0.02
9	6	-0.09	-0.06	0.04	-0.03	0.12	-0.03	-0.24	0.06	0.04
10	6	-0.02	0.15	-0.04	0.07	-0.08	0.01	-0.05	0.15	-0.03
11	1	0.06	-0.23	0.05	0.05	0.11	-0.04	-0.02	0.16	-0.04
12	6	-0.19	0.21	-0.03	-0.13	0.13	-0.02	0.07	-0.06	0.01
13	6	0.22	-0.05	-0.02	-0.05	-0.08	0.04	-0.21	-0.05	0.06
14	6	0.12	-0.02	0.00	0.10	0.02	0.01	-0.03	0.02	0.01
15	1	-0.04	-0.05	0.06	-0.21	-0.31	0.12	0.09	0.02	-0.03
16	6	-0.05	-0.11	0.05	0.19	-0.07	-0.02	0.30	-0.05	-0.05
17	6	0.00	-0.06	0.01	-0.01	-0.03	0.01	-0.06	0.18	-0.05
18	6	-0.03	0.19	-0.06	0.00	-0.02	0.01	-0.05	0.10	-0.02
19	8	-0.02	0.00	0.00	-0.02	-0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.00
20	6	-0.02	0.00	-0.01	0.01	-0.03	-0.01	0.01	-0.01	0.00
21	6	-0.09	-0.09	0.05	0.04	0.05	-0.02	-0.11	-0.06	0.04
22	1	0.13	-0.31	0.06	0.06	-0.04	0.00	0.05	-0.15	0.04
23	6	-0.03	0.01	0.01	0.09	0.00	-0.03	0.07	-0.11	0.02
24	6	0.16	-0.06	-0.02	-0.08	-0.01	0.02	0.21	-0.07	-0.03
25	1	0.00	0.00	0.00	0.06	0.06	-0.03	-0.14	-0.08	0.05
26	1	-0.46	0.12	0.08	-0.37	0.13	0.06	-0.06	-0.08	0.07

27	1	-0.06	0.00	0.02	0.21	-0.08	-0.03	-0.42	0.10	0.08
28	1	0.08	-0.21	0.10	-0.15	0.39	-0.08	0.11	-0.27	0.10
29	1	0.03	0.06	0.02	-0.05	0.16	0.13	-0.02	0.02	0.03
30	1	-0.03	0.01	0.00	-0.13	0.12	-0.06	-0.01	0.04	-0.03
31	1	-0.04	0.11	0.09	-0.09	0.20	0.07	-0.01	-0.01	-0.03
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			64			65			66	
			A			A			A	
Frequencies	--	1433.3070			1450.4180			1458.5727		
Red. masses	--	1.2453			3.0960			2.0823		
Frc consts	--	1.5073			3.8374			2.6101		
IR Inten	--	71.3401			0.2774			2.0377		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.11	-0.01	-0.02
2	6	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.01
3	6	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.14	-0.04	-0.05	-0.02	0.02
4	6	0.00	0.01	0.00	-0.08	-0.07	0.03	0.03	0.00	-0.01
5	1	-0.03	0.01	0.00	0.20	-0.04	-0.03	0.05	-0.03	0.00
6	6	-0.01	0.00	0.00	0.03	-0.08	0.02	0.00	-0.02	0.01
7	1	-0.01	0.01	0.00	-0.27	0.09	0.04	-0.27	0.09	0.04
8	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.00	-0.12	-0.05	0.04
9	6	0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.16	-0.05	0.11	-0.02	-0.02
10	6	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.09	0.02	-0.03	0.07	-0.01
11	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.07	0.22	-0.05	-0.14	0.39	-0.08
12	6	0.01	-0.03	0.00	0.01	0.05	-0.01	-0.02	0.04	-0.01
13	6	0.01	0.01	-0.01	0.06	-0.03	0.00	-0.03	-0.05	0.03
14	6	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	0.02	0.03	0.01
15	1	0.03	0.05	-0.01	0.19	0.20	-0.06	-0.03	-0.07	0.02
16	6	-0.03	0.02	0.00	-0.02	-0.17	0.06	0.00	0.06	-0.02
17	6	0.01	0.00	0.00	-0.06	0.15	-0.04	0.06	0.00	-0.02
18	6	0.00	0.01	0.00	0.03	-0.14	0.04	-0.03	0.05	-0.01
19	8	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.03	-0.01
20	6	0.09	-0.10	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
21	6	0.00	0.00	0.00	0.05	0.09	-0.04	0.08	0.05	-0.03
22	1	0.00	-0.01	0.00	-0.06	0.10	-0.01	0.16	-0.53	0.12
23	6	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.02	-0.09	0.02	0.02
24	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.03	-0.06	0.01
25	1	-0.01	-0.01	0.01	-0.14	-0.10	0.06	-0.27	-0.32	0.16
26	1	0.04	-0.01	-0.01	0.38	-0.15	-0.03	0.22	-0.06	-0.05
27	1	-0.02	0.01	0.00	-0.24	0.06	0.04	-0.16	-0.02	0.04
28	1	0.02	-0.04	0.01	0.16	-0.47	0.13	0.10	-0.03	0.02
29	1	-0.39	0.32	0.37	-0.06	0.01	0.03	0.08	0.04	0.00
30	1	-0.40	0.35	-0.17	-0.06	0.03	0.00	0.03	0.02	-0.03
31	1	-0.25	0.46	-0.09	-0.02	0.05	-0.01	0.03	-0.04	0.04
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			67			68			69	
			A			A			A	
Frequencies	--	1477.1769			1483.8449			1492.1537		
Red. masses	--	1.7736			1.4915			3.6383		
Frc consts	--	2.2802			1.9349			4.7728		
IR Inten	--	13.6541			77.8331			1.0409		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.01	-0.01	-0.02	0.02	0.00	-0.12	-0.07	0.05
2	6	-0.08	0.02	0.01	0.03	0.01	-0.01	0.05	-0.04	0.00
3	6	0.04	0.07	-0.03	0.00	-0.06	0.02	0.08	0.11	-0.05
4	6	-0.01	-0.05	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.04	0.03	0.00
5	1	0.42	-0.11	-0.06	-0.15	0.06	0.02	-0.05	-0.02	0.01
6	6	0.00	-0.06	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.03	0.17	-0.05
7	1	-0.31	0.08	0.05	0.14	-0.02	-0.03	0.31	-0.19	-0.02
8	6	-0.02	0.07	-0.01	0.06	-0.01	-0.01	-0.14	-0.08	0.05
9	6	0.00	-0.05	0.02	-0.02	0.04	-0.01	0.06	-0.08	0.01
10	6	0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	0.06	-0.03	-0.01
11	1	-0.09	0.20	-0.03	0.03	-0.10	0.02	0.20	-0.34	0.05

12	6	0.06	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.05	-0.03	0.00
13	6	-0.03	0.06	-0.02	0.05	-0.01	-0.01	-0.09	-0.08	0.05
14	6	-0.02	0.07	0.02	0.02	0.09	0.02	-0.01	0.03	0.01
15	1	0.20	0.14	-0.07	-0.10	-0.08	0.04	-0.06	0.02	0.01
16	6	-0.02	-0.06	0.02	-0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.01	0.00
17	6	0.01	-0.04	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.13	-0.07
18	6	0.03	0.06	-0.03	-0.02	-0.06	0.03	0.12	0.14	-0.08
19	8	-0.01	-0.05	-0.01	-0.02	-0.06	-0.02	0.00	-0.02	0.00
20	6	-0.02	-0.03	0.01	-0.04	-0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.01
21	6	0.00	-0.05	0.02	0.00	0.03	-0.01	-0.05	-0.01	0.02
22	1	0.03	0.00	-0.01	-0.06	0.10	-0.01	0.05	0.03	-0.02
23	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.13	-0.06	0.07
24	6	-0.07	0.02	0.01	0.04	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.00
25	1	0.14	0.09	-0.06	-0.07	-0.04	0.03	0.07	0.13	-0.06
26	1	-0.18	0.04	0.03	0.10	-0.01	-0.02	0.24	-0.19	-0.01
27	1	0.33	-0.08	-0.06	-0.21	0.06	0.03	0.16	-0.05	-0.02
28	1	-0.05	0.11	-0.03	0.02	-0.06	0.03	0.22	-0.34	0.11
29	1	0.19	0.26	0.13	0.41	0.41	0.18	0.10	0.15	0.08
30	1	0.10	0.24	-0.26	0.08	0.35	-0.36	0.10	0.15	-0.18
31	1	0.10	-0.24	-0.03	0.18	-0.33	0.11	0.05	-0.16	-0.06
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

70

71

72

		A			A			A		
Frequencies	--	1503.0682			1514.1196			1533.9376		
Red. masses	--	1.0792			4.6198			3.1197		
Frc consts	--	1.4365			6.2402			4.3249		
IR Inten	--	20.1810			9.5927			102.1895		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	0.00	0.20	-0.08	-0.02	0.06	0.00	-0.02
2	6	0.01	0.00	0.00	0.07	0.04	-0.03	-0.08	0.00	0.02
3	6	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.11	0.05	-0.02	-0.04	0.02
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.07	0.03	0.09	0.04	-0.03
5	1	-0.02	0.01	0.00	-0.17	0.11	0.01	0.07	-0.05	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.10	0.00	-0.02	-0.06	0.02
7	1	0.02	0.00	0.00	-0.24	0.03	0.05	-0.13	0.05	0.01
8	6	0.01	-0.01	0.00	-0.10	-0.02	0.03	-0.01	0.10	-0.03
9	6	0.00	0.01	0.00	0.10	0.05	-0.04	-0.03	-0.02	0.01
10	6	-0.01	0.00	0.00	0.07	0.07	-0.04	0.06	-0.04	0.00
11	1	0.01	-0.01	0.00	-0.09	0.02	0.02	-0.08	0.13	-0.02
12	6	-0.02	0.00	0.00	0.04	0.06	-0.02	-0.11	0.01	0.00
13	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.09	0.03	0.09	-0.07	0.01
14	6	0.03	0.01	0.02	-0.02	-0.07	-0.01	0.09	0.20	0.04
15	1	-0.01	-0.01	0.02	0.18	0.20	-0.06	-0.12	-0.17	0.05
16	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.12	-0.04	-0.01	0.05	-0.01
17	6	0.00	-0.01	0.00	-0.12	0.16	-0.02	0.00	0.05	-0.03
18	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.04	-0.10	0.04	0.11	-0.05	-0.01
19	8	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.03	0.01	-0.04	-0.11	-0.03
20	6	-0.01	0.02	0.06	-0.01	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.01
21	6	0.01	0.01	-0.01	-0.10	-0.15	0.07	-0.10	-0.08	0.05
22	1	0.00	-0.01	0.00	0.13	-0.06	-0.01	-0.02	0.25	-0.07
23	6	0.00	0.01	0.00	0.17	-0.09	-0.02	-0.10	0.01	0.03
24	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.09	-0.03	0.01	0.06	-0.02
25	1	-0.03	-0.03	0.02	0.36	0.33	-0.19	0.21	0.26	-0.13
26	1	-0.01	0.01	0.00	-0.16	0.01	0.08	0.27	-0.10	-0.05
27	1	-0.04	0.00	0.01	0.12	0.07	-0.05	0.09	0.06	-0.04
28	1	-0.01	0.02	0.00	-0.02	-0.17	0.05	0.15	-0.25	0.11
29	1	-0.37	-0.08	0.06	0.04	0.12	0.07	-0.16	-0.25	-0.12
30	1	0.52	0.06	-0.24	0.04	0.14	-0.13	0.06	-0.28	0.19
31	1	-0.19	-0.12	-0.68	0.05	-0.15	-0.07	-0.15	0.29	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

73

74

75

		A			A			A		
Frequencies	--	1552.9265			1576.8399			1622.9911		

Red. masses	--	3.1919			4.5565			6.5513		
Frc consts	--	4.5353			6.6751			10.1674		
IR Inten	--	44.8012			103.6188			19.8649		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.05	0.02	-0.07	0.05	0.00	0.02	-0.03	0.00
2	6	-0.05	0.10	-0.01	0.15	-0.08	-0.01	0.09	-0.07	0.00
3	6	0.12	-0.08	0.00	-0.07	0.08	-0.01	-0.06	0.15	-0.03
4	6	-0.11	-0.15	0.05	-0.02	0.11	-0.02	-0.01	0.07	-0.01
5	1	0.27	0.04	-0.06	-0.34	0.04	0.06	-0.13	-0.02	0.03
6	6	-0.05	0.13	-0.02	0.07	-0.06	0.00	0.02	0.01	-0.01
7	1	0.13	-0.10	0.00	0.07	0.03	-0.02	-0.12	0.01	0.03
8	6	0.02	-0.07	0.02	0.01	-0.07	0.02	-0.18	-0.01	0.05
9	6	0.02	0.03	-0.01	0.06	-0.01	-0.01	0.13	0.17	-0.08
10	6	-0.02	-0.03	0.01	-0.06	0.14	-0.03	0.10	0.00	-0.03
11	1	0.07	-0.26	0.06	0.03	0.12	-0.04	-0.01	0.09	-0.02
12	6	0.08	0.05	-0.02	0.00	-0.19	0.03	0.06	-0.16	0.03
13	6	-0.03	0.02	0.00	0.02	0.08	-0.03	-0.10	0.20	-0.04
14	6	0.04	0.20	0.04	0.04	0.22	0.03	0.00	0.09	0.01
15	1	0.38	0.34	-0.15	-0.22	-0.06	0.04	-0.10	0.00	0.01
16	6	-0.01	0.02	0.00	-0.06	-0.03	0.02	0.03	-0.17	0.04
17	6	0.00	-0.02	0.01	-0.12	0.10	0.00	0.10	-0.17	0.04
18	6	-0.08	0.01	0.02	-0.03	0.01	0.00	-0.15	-0.08	0.07
19	8	-0.04	-0.12	-0.03	-0.03	-0.11	-0.02	-0.01	-0.04	-0.01
20	6	0.02	-0.01	-0.02	0.01	-0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.00
21	6	0.03	0.06	-0.02	0.10	-0.03	-0.01	-0.21	-0.10	0.08
22	1	-0.04	0.00	0.01	0.10	-0.36	0.08	0.09	0.10	-0.05
23	6	0.05	0.00	-0.01	0.19	-0.11	-0.02	-0.06	0.09	-0.02
24	6	0.04	-0.04	0.00	-0.13	0.01	0.03	0.28	0.00	-0.07
25	1	-0.13	-0.09	0.06	0.02	-0.14	0.04	0.11	0.26	-0.11
26	1	-0.08	0.04	0.01	-0.31	0.03	0.10	0.10	0.06	-0.06
27	1	-0.18	0.01	0.04	0.26	-0.10	-0.03	-0.40	0.19	0.04
28	1	-0.02	0.06	0.00	-0.05	-0.16	0.07	-0.08	0.30	-0.11
29	1	-0.13	-0.22	-0.11	-0.01	-0.12	-0.06	0.01	-0.03	-0.02
30	1	-0.03	-0.26	0.21	0.02	-0.15	0.09	0.00	-0.04	0.02
31	1	-0.10	0.26	0.07	-0.08	0.18	0.06	-0.02	0.06	0.03
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			76			77			78	
			A			A			A	
Frequencies	--	1633.6899			1639.2167			1667.7177		
Red. masses	--	5.5305			6.6961			6.7663		
Frc consts	--	8.6967			10.6009			11.0878		
IR Inten	--	40.6152			145.6612			45.7013		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.17	0.13	0.00	0.13	-0.01	-0.03	0.25	-0.18	-0.01
2	6	0.14	0.05	-0.04	0.30	-0.04	-0.05	-0.02	-0.05	0.02
3	6	-0.01	-0.09	0.03	-0.26	0.02	0.05	-0.09	0.12	-0.01
4	6	-0.16	-0.12	0.06	-0.18	-0.05	0.04	0.06	0.07	-0.03
5	1	-0.13	0.14	0.00	-0.41	0.15	0.05	0.00	-0.06	0.02
6	6	0.12	-0.14	0.01	-0.04	-0.06	0.03	-0.19	0.27	-0.03
7	1	0.28	0.03	-0.07	-0.21	0.09	0.02	-0.35	-0.05	0.09
8	6	0.03	-0.08	0.02	0.03	0.20	-0.07	0.18	-0.17	0.01
9	6	-0.04	0.09	-0.02	-0.13	-0.14	0.07	-0.19	0.14	0.00
10	6	-0.04	0.21	-0.05	0.04	-0.22	0.06	-0.09	0.10	-0.01
11	1	0.05	0.17	-0.06	-0.09	0.08	0.00	0.00	-0.42	0.12
12	6	0.07	0.07	-0.02	0.08	-0.03	0.00	-0.02	-0.07	0.02
13	6	-0.10	0.00	0.02	-0.17	0.02	0.03	-0.04	0.06	-0.01
14	6	0.00	0.01	0.00	0.02	0.08	0.01	0.02	0.03	0.00
15	1	0.18	0.22	-0.07	0.03	0.18	-0.04	-0.09	-0.09	0.03
16	6	0.09	0.05	-0.03	0.20	0.06	-0.06	0.12	-0.15	0.02
17	6	0.10	-0.10	0.00	0.04	-0.03	-0.01	0.05	-0.06	0.01
18	6	0.18	-0.15	0.00	0.03	0.13	-0.05	0.16	-0.11	0.00
19	8	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.05	-0.01	0.00	-0.01	0.00
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00

21	6	-0.01	-0.14	0.05	0.05	0.14	-0.05	0.09	0.00	-0.02
22	1	0.13	-0.29	0.05	-0.14	0.33	-0.06	-0.02	-0.17	0.05
23	6	-0.18	0.09	0.02	-0.04	0.00	0.01	-0.10	0.05	0.01
24	6	-0.11	0.10	0.00	0.00	-0.06	0.02	-0.16	0.05	0.02
25	1	0.19	0.04	-0.06	-0.14	-0.05	0.05	0.01	-0.10	0.03
26	1	0.31	-0.06	-0.10	-0.03	-0.01	0.00	0.18	-0.04	-0.06
27	1	0.26	0.02	-0.07	-0.03	-0.06	0.03	0.20	-0.04	-0.04
28	1	0.03	0.15	-0.04	0.00	0.12	-0.03	0.00	0.09	-0.02
29	1	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
30	1	-0.01	-0.02	0.02	0.00	-0.05	0.03	0.01	-0.01	0.00
31	1	0.00	0.01	0.01	-0.02	0.05	0.02	-0.01	0.02	0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

79				80				81			
A				A				A			
Frequencies	--	3053.4022		3140.8753		3181.5946					
Red. masses	--	1.0415		1.0917		1.0877					
Frc consts	--	5.7212		6.3456		6.4871					
IR Inten	--	2.8122		4.3510		0.3078					

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	1	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.01	0.04
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	6	-0.03	0.04	-0.01	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.00
21	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.02
24	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.40	0.21
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.01
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.74	0.14	-0.47
29	1	0.16	-0.43	0.65	0.12	-0.33	0.46	0.00	0.00	0.00
30	1	-0.15	-0.27	-0.34	0.23	0.44	0.49	0.00	0.00	0.00
31	1	0.32	0.19	-0.12	-0.35	-0.19	0.09	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

82				83				84			
A				A				A			
Frequencies	--	3189.5713		3206.0058		3207.7571					
Red. masses	--	1.1022		1.0938		1.0894					
Frc consts	--	6.6065		6.6237		6.6043					
IR Inten	--	5.9881		0.5659		0.6644					

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.01
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.07	-0.02

6	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.05	-0.01	0.01
7	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.05	-0.02	-0.10	-0.48	0.16
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.01
11	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.02	0.02	0.57	0.14	-0.17
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	1	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.01
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	6	0.07	0.06	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	0.17	0.04	-0.05	-0.27	-0.07	0.08
23	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.06	0.03	0.00	-0.03	0.01
24	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.01	0.00	-0.02	0.01
25	1	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.16	-0.01	0.16	-0.14	0.01
26	1	0.00	0.00	0.00	0.11	0.63	-0.33	0.05	0.30	-0.15
27	1	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.45	0.16	0.05	0.26	-0.09
28	1	0.00	0.00	0.00	0.32	0.06	-0.20	0.14	0.03	-0.09
29	1	0.04	-0.03	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	-0.17	-0.33	-0.40	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	1	-0.70	-0.38	0.24	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

85

86

87

		A	A	A
Frequencies	--	3208.4381	3214.4616	3216.8525
Red. masses	--	1.0899	1.0925	1.0898
Frc consts	--	6.6105	6.6508	6.6446
IR Inten	--	1.1423	3.9695	0.9473

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.03	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.07	0.02
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	0.00
5	1	0.01	0.04	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.19	0.83	-0.24
6	6	-0.03	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
7	1	-0.08	-0.36	0.12	-0.03	-0.13	0.04	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.02	0.00	0.01	-0.07	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
11	1	0.39	0.10	-0.12	0.07	0.02	-0.02	-0.11	-0.03	0.03
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	1	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	-0.31	0.03
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	6	0.02	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.20	0.05	-0.06	0.77	0.20	-0.24	0.00	0.00	0.00
23	6	0.00	0.03	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
24	6	0.01	0.05	-0.02	-0.01	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.23	0.21	-0.01	-0.12	0.11	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	-0.06	-0.34	0.18	0.01	0.06	-0.03	0.00	-0.01	0.00
27	1	-0.11	-0.54	0.20	0.09	0.45	-0.17	0.00	-0.01	0.00
28	1	-0.15	-0.03	0.10	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01





**Table S21.** Cartesian coordinates of optimized structure for (12-C<sub>4</sub>C<sub>5</sub>)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	-1.271200	-1.099866	1.283916
2	6	0	1.021780	-2.052926	1.063492
3	6	0	0.127224	-0.973529	0.904000
4	6	0	2.362758	-1.912127	0.697029
5	1	0	0.671589	-2.995703	1.475111
6	6	0	-2.144230	0.009893	1.205486
7	1	0	-1.576993	-1.986062	1.840350
8	6	0	-1.678147	1.283011	0.719008
9	6	0	-0.302754	1.403715	0.304409
10	6	0	-2.535113	2.409326	0.669960
11	1	0	-3.138969	-0.053594	1.645324
12	6	0	2.819801	-0.700300	0.153374
13	6	0	1.977981	0.438061	-0.011801
14	7	0	4.255423	-0.691531	-0.233670
15	1	0	3.067114	-2.725956	0.825358
16	6	0	0.598151	0.285844	0.389425
17	6	0	2.416422	1.728762	-0.500519
18	6	0	0.168955	2.670443	-0.166720
19	8	0	5.024402	-1.521028	0.358773
20	8	0	4.646004	0.112082	-1.148057
21	6	0	-2.056858	3.644686	0.206913
22	1	0	-3.567597	2.314261	0.997951
23	6	0	1.547930	2.791134	-0.565622
24	6	0	-0.721402	3.771659	-0.211973
25	1	0	-2.718018	4.504971	0.175694
26	1	0	1.902461	3.754339	-0.922800
27	1	0	-0.356792	4.731590	-0.568605
28	1	0	3.441535	1.848059	-0.820101
29	47	0	-2.529007	-1.605667	-0.713629

**Table S22.** Vibrational frequencies for (12-C<sub>4</sub>C<sub>5</sub>)

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	32.7889			39.0447			47.8038		
Red. masses	--	13.7262			14.4674			13.1152		
Frc consts	--	0.0087			0.0130			0.0177		
IR Inten	--	1.1608			0.9323			0.2671		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.15	-0.15	-0.01	0.02	0.07	-0.14	-0.02	0.03	-0.09
2	6	0.17	-0.07	-0.03	-0.01	0.02	-0.21	-0.03	0.00	-0.08
3	6	0.13	-0.10	-0.03	0.02	0.05	-0.15	-0.02	0.01	-0.08
4	6	0.17	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.16	-0.01	0.00	-0.04
5	1	0.20	-0.09	-0.04	-0.04	0.00	-0.27	-0.04	-0.01	-0.11
6	6	0.10	-0.18	-0.01	0.04	0.09	-0.10	0.01	0.06	-0.06
7	1	0.17	-0.18	-0.05	0.02	0.08	-0.11	-0.04	0.04	-0.09
8	6	0.05	-0.16	-0.03	0.06	0.08	-0.08	0.04	0.06	-0.01
9	6	0.04	-0.12	-0.05	0.07	0.08	-0.05	0.04	0.05	0.00
10	6	0.01	-0.19	-0.03	0.07	0.10	-0.07	0.07	0.09	0.05
11	1	0.13	-0.20	0.06	0.04	0.10	-0.09	0.00	0.07	-0.07
12	6	0.13	0.01	0.02	0.06	0.05	-0.04	-0.01	0.00	-0.02
13	6	0.08	-0.03	-0.02	0.08	0.07	-0.01	0.01	0.00	-0.02
14	7	0.15	0.10	0.09	0.09	0.05	0.06	-0.01	0.05	0.01
15	1	0.21	0.02	0.03	-0.02	-0.01	-0.19	-0.01	0.00	-0.02
16	6	0.08	-0.08	-0.03	0.05	0.07	-0.08	0.01	0.02	-0.04
17	6	0.03	-0.02	-0.04	0.10	0.10	0.08	0.06	0.00	0.02
18	6	-0.01	-0.11	-0.07	0.10	0.10	0.03	0.09	0.05	0.07
19	8	0.18	0.20	0.20	-0.01	-0.16	-0.09	0.10	0.43	0.40
20	8	0.14	0.06	0.06	0.23	0.25	0.31	-0.14	-0.29	-0.35
21	6	-0.04	-0.18	-0.06	0.09	0.11	-0.01	0.12	0.11	0.13
22	1	0.02	-0.22	-0.02	0.06	0.10	-0.09	0.07	0.11	0.04
23	6	-0.01	-0.06	-0.07	0.11	0.11	0.09	0.09	0.03	0.07
24	6	-0.05	-0.14	-0.08	0.11	0.11	0.05	0.12	0.09	0.13
25	1	-0.07	-0.21	-0.07	0.10	0.12	0.01	0.15	0.13	0.18
26	1	-0.05	-0.05	-0.09	0.14	0.12	0.15	0.12	0.04	0.11
27	1	-0.09	-0.13	-0.10	0.13	0.12	0.10	0.15	0.09	0.19
28	1	0.03	0.02	-0.03	0.12	0.11	0.13	0.06	-0.02	0.02
29	47	-0.19	0.14	0.01	-0.16	-0.17	0.06	-0.06	-0.10	-0.02
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	65.6097			97.8895			157.6931		
Red. masses	--	6.6818			6.4036			5.5452		
Frc consts	--	0.0169			0.0362			0.0812		
IR Inten	--	1.2205			0.9854			2.4799		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.00	-0.02	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.02
2	6	-0.05	-0.03	-0.10	0.09	0.11	0.28	-0.02	-0.03	-0.07
3	6	-0.04	-0.02	-0.08	0.04	0.04	0.10	0.01	0.01	0.04
4	6	-0.04	-0.02	-0.07	0.09	0.12	0.30	-0.01	-0.02	-0.06
5	1	-0.05	-0.03	-0.11	0.12	0.15	0.39	-0.04	-0.06	-0.17
6	6	0.00	0.03	0.08	0.01	-0.01	-0.05	0.06	0.07	0.20
7	1	-0.02	0.00	-0.02	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	-0.03	-0.06
8	6	0.01	0.03	0.09	0.02	0.01	0.02	0.07	0.07	0.24
9	6	-0.03	-0.01	-0.04	0.01	0.01	-0.01	0.04	0.04	0.14
10	6	0.04	0.06	0.22	0.05	0.03	0.12	0.07	0.07	0.20
11	1	0.02	0.04	0.12	-0.01	-0.03	-0.09	0.06	0.06	0.20
12	6	-0.03	-0.02	-0.07	0.05	0.05	0.10	0.02	0.02	0.05
13	6	-0.05	-0.04	-0.15	0.02	0.01	-0.01	0.04	0.04	0.13
14	7	0.01	0.02	0.10	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01

15	1	-0.04	-0.01	-0.03	0.12	0.16	0.41	-0.03	-0.05	-0.14
16	6	-0.04	-0.03	-0.10	0.02	0.02	0.02	0.04	0.04	0.14
17	6	-0.09	-0.07	-0.26	-0.02	-0.02	-0.13	0.03	0.03	0.10
18	6	-0.04	-0.02	-0.09	0.01	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.06
19	8	-0.05	0.02	0.19	0.04	-0.07	-0.12	0.02	0.01	-0.02
20	8	0.13	0.05	0.19	-0.02	0.00	-0.02	-0.03	0.00	-0.02
21	6	0.04	0.06	0.20	0.06	0.05	0.18	-0.01	-0.01	-0.11
22	1	0.08	0.09	0.33	0.06	0.04	0.15	0.10	0.11	0.32
23	6	-0.08	-0.07	-0.24	-0.02	-0.02	-0.13	-0.01	-0.01	-0.06
24	6	-0.01	0.01	0.03	0.03	0.03	0.08	-0.06	-0.06	-0.27
25	1	0.07	0.08	0.30	0.08	0.07	0.28	-0.04	-0.04	-0.22
26	1	-0.11	-0.09	-0.33	-0.04	-0.04	-0.19	-0.03	-0.04	-0.16
27	1	-0.02	0.00	-0.01	0.03	0.04	0.10	-0.12	-0.13	-0.51
28	1	-0.11	-0.10	-0.35	-0.04	-0.03	-0.19	0.04	0.03	0.13
29	47	0.04	0.00	0.00	-0.06	-0.04	-0.08	-0.03	-0.03	-0.06

7				8			9		
A				A			A		
Frequencies	--	198.1077		208.6577		250.5134			
Red. masses	--	7.9761		6.3041		4.5936			
Frc consts	--	0.1844		0.1617		0.1699			
IR Inten	--	3.9266		9.4987		2.2016			

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.09	-0.04	-0.06	0.00	0.04	0.18	0.03	0.03	0.14
2	6	-0.05	-0.08	0.03	0.00	-0.03	0.09	0.04	0.07	0.17
3	6	-0.07	-0.10	-0.07	0.01	0.00	0.19	0.00	0.01	0.03
4	6	-0.01	-0.07	0.10	-0.03	-0.08	-0.09	0.00	0.02	-0.01
5	1	-0.04	-0.07	0.06	0.02	-0.02	0.12	0.11	0.15	0.41
6	6	-0.04	0.02	-0.04	-0.01	0.03	0.06	0.03	0.02	0.12
7	1	-0.12	0.00	-0.02	-0.05	0.05	0.17	0.06	0.06	0.19
8	6	0.00	0.00	-0.07	0.02	0.03	0.05	0.00	0.00	0.02
9	6	-0.03	-0.09	-0.15	0.05	0.02	0.18	-0.03	-0.04	-0.12
10	6	0.10	0.09	0.07	0.00	0.01	-0.17	0.03	0.01	0.10
11	1	-0.02	0.07	0.00	-0.04	0.04	-0.02	0.06	0.05	0.18
12	6	-0.03	-0.07	0.08	-0.05	-0.09	-0.13	-0.05	-0.05	-0.19
13	6	-0.04	-0.10	0.04	-0.05	-0.09	-0.06	-0.05	-0.05	-0.17
14	7	-0.07	0.12	0.01	-0.03	0.07	-0.05	-0.01	-0.01	-0.07
15	1	0.00	-0.05	0.15	-0.04	-0.10	-0.14	0.02	0.05	0.06
16	6	-0.07	-0.12	-0.09	0.01	-0.02	0.14	-0.05	-0.05	-0.17
17	6	0.04	-0.09	0.16	-0.05	-0.14	-0.18	0.03	0.03	0.10
18	6	0.03	-0.11	-0.14	0.09	0.00	0.16	-0.01	-0.02	-0.04
19	8	0.10	0.18	-0.14	0.01	0.14	-0.01	-0.08	0.02	0.06
20	8	-0.25	0.28	0.06	-0.01	0.19	0.06	0.11	0.01	0.01
21	6	0.16	0.06	0.05	0.06	0.00	-0.13	-0.01	-0.02	-0.03
22	1	0.13	0.18	0.19	-0.06	0.00	-0.35	0.07	0.05	0.23
23	6	0.06	-0.11	0.01	0.03	-0.07	0.00	0.06	0.05	0.20
24	6	0.12	-0.05	-0.10	0.12	0.02	0.10	-0.02	-0.03	-0.07
25	1	0.24	0.12	0.15	0.04	-0.01	-0.27	-0.01	-0.02	-0.03
26	1	0.11	-0.10	0.09	0.04	-0.10	-0.07	0.12	0.13	0.46
27	1	0.18	-0.08	-0.11	0.17	0.01	0.12	-0.03	-0.03	-0.08
28	1	0.09	-0.06	0.35	-0.11	-0.22	-0.39	0.08	0.08	0.27
29	47	0.01	0.01	0.02	-0.02	-0.02	-0.04	-0.01	-0.01	-0.03

10				11			12		
A				A			A		
Frequencies	--	273.5465		310.9333		317.8351			
Red. masses	--	4.9832		9.9906		4.7635			
Frc consts	--	0.2197		0.5691		0.2835			
IR Inten	--	3.7464		1.5780		2.0271			

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	0.05	0.19	-0.19	0.05	0.02	0.06	0.08	0.22
2	6	0.02	0.01	0.04	-0.01	0.01	-0.01	-0.03	-0.03	-0.11
3	6	0.06	0.07	0.22	-0.13	-0.04	0.04	0.00	0.00	-0.06
4	6	-0.04	-0.07	-0.22	0.04	0.00	-0.02	0.00	-0.02	0.02
5	1	0.02	-0.01	0.01	0.05	-0.02	-0.02	-0.06	-0.04	-0.16

6	6	-0.03	-0.04	-0.11	-0.20	0.09	0.02	0.09	0.09	0.29
7	1	0.05	0.07	0.21	-0.25	0.09	0.05	0.14	0.14	0.35
8	6	-0.04	-0.05	-0.16	-0.18	0.08	0.01	0.00	0.00	-0.03
9	6	-0.02	-0.02	-0.09	-0.14	-0.04	0.03	-0.03	-0.02	-0.14
10	6	0.00	-0.01	-0.01	-0.12	0.16	-0.01	-0.05	-0.04	-0.12
11	1	-0.05	-0.04	-0.16	-0.21	0.07	-0.01	0.17	0.16	0.49
12	6	-0.01	0.00	-0.03	0.14	-0.03	-0.02	0.04	0.02	0.13
13	6	0.03	0.05	0.14	-0.03	-0.09	0.07	0.02	0.00	0.01
14	7	-0.01	0.00	-0.02	0.29	-0.01	-0.08	0.03	-0.02	0.08
15	1	-0.10	-0.16	-0.47	-0.03	-0.06	0.01	-0.01	-0.02	0.03
16	6	0.03	0.04	0.12	-0.10	-0.06	0.04	-0.01	-0.01	-0.11
17	6	0.03	0.04	0.12	-0.08	-0.10	0.09	0.00	0.02	0.01
18	6	-0.04	-0.04	-0.17	-0.10	-0.07	0.02	-0.03	0.01	-0.05
19	8	-0.04	0.01	0.03	0.35	0.03	-0.09	0.11	-0.03	-0.04
20	8	0.03	0.00	0.00	0.35	-0.06	-0.10	-0.10	-0.03	0.01
21	6	0.06	0.04	0.18	-0.03	0.14	-0.01	-0.03	0.01	0.00
22	1	0.02	0.00	0.03	-0.13	0.24	-0.02	-0.06	-0.07	-0.17
23	6	-0.03	-0.02	-0.12	-0.09	-0.12	0.06	-0.02	0.00	-0.04
24	6	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.06	0.14
25	1	0.13	0.10	0.43	0.04	0.20	-0.01	-0.03	0.01	0.04
26	1	-0.05	-0.04	-0.19	-0.08	-0.12	0.05	-0.01	0.01	-0.03
27	1	0.01	0.01	0.03	0.08	-0.03	-0.01	0.06	0.12	0.36
28	1	0.06	0.06	0.21	-0.07	-0.08	0.11	0.01	0.05	0.05
29	47	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.03
			13			14			15	
			A			A			A	
Frequencies	--	356.1710			414.6229			423.1222		
Red. masses	--	7.0153			4.6552			5.8628		
Frc consts	--	0.5243			0.4715			0.6184		
IR Inten	--	1.5108			1.7310			1.2519		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	0.09	-0.03	0.12	0.01	0.14	0.12	-0.04	-0.17
2	6	-0.06	0.01	0.07	0.11	-0.11	-0.12	0.18	-0.10	0.11
3	6	0.06	0.10	0.04	0.10	-0.06	0.06	0.14	-0.12	-0.06
4	6	-0.06	-0.19	-0.03	0.12	0.00	-0.01	0.14	-0.13	-0.01
5	1	-0.18	0.08	0.13	0.12	-0.18	-0.28	0.19	-0.04	0.26
6	6	0.03	0.04	-0.16	0.00	-0.07	-0.10	0.15	0.04	0.04
7	1	0.04	0.09	-0.04	0.10	0.05	0.19	0.03	-0.05	-0.23
8	6	0.06	0.05	-0.04	-0.09	0.01	-0.08	-0.02	0.12	0.06
9	6	0.06	0.09	-0.02	-0.07	-0.03	-0.01	-0.03	0.03	0.02
10	6	-0.03	-0.02	0.10	0.03	0.15	0.06	-0.07	0.13	-0.10
11	1	-0.01	0.02	-0.25	0.01	-0.15	-0.09	0.18	-0.08	0.11
12	6	0.02	-0.22	-0.05	0.03	0.07	0.10	-0.02	-0.10	-0.09
13	6	0.08	-0.09	-0.09	-0.06	-0.01	-0.07	-0.01	-0.06	0.07
14	7	0.05	-0.16	0.05	-0.01	0.02	0.08	-0.05	-0.04	-0.04
15	1	-0.13	-0.25	-0.04	0.18	0.05	-0.06	0.21	-0.07	-0.02
16	6	0.08	0.06	-0.04	-0.03	-0.03	0.01	0.00	-0.04	0.00
17	6	-0.02	-0.01	-0.06	-0.10	-0.02	-0.13	-0.07	-0.01	0.15
18	6	-0.04	0.14	0.01	-0.04	0.00	0.09	-0.11	0.04	-0.05
19	8	0.29	0.01	0.00	-0.03	-0.06	0.00	-0.09	-0.01	0.05
20	8	-0.18	0.01	0.11	-0.08	-0.04	0.00	-0.02	0.01	0.02
21	6	-0.17	0.00	0.05	0.05	0.13	-0.04	-0.07	0.18	-0.04
22	1	0.01	-0.13	0.21	0.06	0.27	0.21	-0.11	0.10	-0.23
23	6	0.00	0.06	0.07	-0.04	0.03	0.18	-0.12	-0.06	-0.09
24	6	-0.20	0.06	-0.05	0.01	0.03	-0.13	-0.03	0.14	0.07
25	1	-0.24	-0.04	0.07	0.08	0.16	-0.03	-0.07	0.18	-0.06
26	1	0.09	0.05	0.14	-0.02	0.08	0.33	-0.10	-0.11	-0.20
27	1	-0.31	0.07	-0.15	0.07	-0.05	-0.28	0.07	0.14	0.17
28	1	-0.04	0.05	-0.12	-0.14	-0.04	-0.25	-0.05	0.07	0.25
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			16			17			18	
			A			A			A	
Frequencies	--	462.8893			488.8144			508.0922		

Red. masses	--	5.1274			5.4902			4.1494		
Frc consts	--	0.6473			0.7729			0.6311		
IR Inten	--	1.0798			0.8179			0.5611		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	-0.02	0.09	-0.15	-0.15	0.00	-0.02	-0.01	0.09
2	6	-0.03	-0.14	-0.06	0.02	-0.06	0.15	-0.05	-0.08	-0.07
3	6	-0.06	-0.12	0.03	-0.08	-0.15	0.11	-0.03	-0.07	-0.05
4	6	0.03	-0.02	0.12	-0.06	0.03	-0.16	-0.01	0.06	0.14
5	1	-0.01	-0.20	-0.19	0.19	-0.08	0.25	-0.02	-0.10	-0.08
6	6	0.12	0.09	-0.06	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	0.02
7	1	-0.18	0.09	0.19	-0.27	-0.13	-0.04	0.00	0.02	0.15
8	6	0.16	0.03	-0.12	0.14	-0.03	0.04	0.03	-0.04	-0.01
9	6	0.12	0.09	-0.05	0.06	-0.05	-0.08	0.07	0.00	0.19
10	6	0.05	-0.08	0.01	0.19	0.00	0.01	0.05	-0.02	-0.16
11	1	0.10	0.27	-0.07	-0.05	0.11	-0.11	-0.03	0.02	0.01
12	6	-0.02	-0.01	0.06	0.00	0.08	0.02	-0.03	-0.05	-0.14
13	6	-0.10	-0.09	0.06	-0.05	0.08	0.01	0.02	0.03	-0.12
14	7	0.00	0.08	-0.05	0.04	-0.02	0.07	0.00	-0.09	-0.05
15	1	0.07	0.02	0.20	-0.03	0.01	-0.36	0.08	0.17	0.39
16	6	-0.05	-0.06	0.08	-0.05	-0.13	-0.05	0.05	-0.02	0.06
17	6	-0.10	-0.11	0.03	-0.13	0.16	-0.01	-0.02	0.15	0.05
18	6	0.04	0.17	-0.04	-0.02	0.06	0.01	-0.06	-0.03	-0.03
19	8	-0.09	0.04	-0.03	0.11	-0.04	-0.01	0.05	0.00	0.03
20	8	0.15	0.02	-0.07	-0.04	-0.05	0.02	-0.02	0.00	0.03
21	6	-0.11	-0.01	0.07	0.04	0.01	-0.12	0.09	0.08	0.14
22	1	0.09	-0.23	0.09	0.21	-0.01	0.05	-0.01	-0.05	-0.35
23	6	0.08	0.05	0.01	-0.10	0.18	-0.05	-0.10	0.09	-0.02
24	6	-0.13	0.09	-0.04	0.05	0.11	0.04	0.00	-0.01	-0.11
25	1	-0.18	-0.07	0.18	-0.08	-0.09	-0.21	0.12	0.10	0.33
26	1	0.27	-0.02	0.01	-0.15	0.18	-0.09	-0.18	0.14	0.03
27	1	-0.26	0.13	-0.07	0.12	0.11	0.13	0.02	-0.08	-0.28
28	1	-0.09	-0.22	0.01	-0.13	0.13	-0.02	0.01	0.25	0.18
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			19		20		21			
			A		A		A			
Frequencies	--	515.2730			527.2799			557.0611		
Red. masses	--	5.7492			4.2357			4.5568		
Frc consts	--	0.8994			0.6938			0.8331		
IR Inten	--	11.1182			4.6743			5.7582		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.09	0.19	-0.11	-0.04	-0.12	-0.19	0.09	0.05	0.04
2	6	0.03	-0.11	0.04	-0.03	0.01	0.01	-0.12	0.00	0.02
3	6	0.03	-0.07	0.05	0.02	0.05	0.08	0.00	0.04	-0.14
4	6	0.02	0.01	-0.02	-0.03	-0.01	0.02	-0.09	-0.08	0.09
5	1	0.09	-0.15	-0.01	-0.09	-0.02	-0.13	-0.23	0.08	0.12
6	6	0.02	0.29	-0.02	0.05	-0.02	0.20	0.02	-0.04	-0.01
7	1	-0.26	0.28	-0.05	-0.03	-0.22	-0.34	0.22	0.08	0.15
8	6	0.06	0.11	-0.09	-0.03	-0.06	-0.06	0.01	-0.09	-0.13
9	6	0.07	-0.17	-0.04	-0.05	-0.02	-0.14	-0.01	-0.07	-0.05
10	6	-0.05	0.02	0.01	0.02	-0.01	-0.07	0.16	0.02	0.07
11	1	0.01	0.36	-0.02	0.12	0.00	0.36	0.09	-0.01	0.16
12	6	0.05	0.03	0.01	-0.02	-0.03	-0.02	-0.02	-0.08	0.01
13	6	0.12	0.05	-0.01	0.01	0.02	0.04	0.11	0.04	0.18
14	7	-0.02	0.02	-0.01	-0.01	-0.04	-0.04	-0.02	-0.02	-0.11
15	1	0.05	0.02	-0.09	-0.05	-0.04	-0.02	-0.14	-0.11	0.15
16	6	0.14	-0.11	0.06	0.05	0.09	0.22	0.07	0.02	-0.03
17	6	0.03	0.09	-0.10	-0.06	-0.03	-0.14	-0.07	0.05	0.00
18	6	-0.02	-0.19	0.04	-0.05	0.00	-0.12	-0.07	0.00	0.18
19	8	-0.07	-0.01	0.03	0.02	0.02	0.01	-0.04	0.06	0.01
20	8	-0.02	0.02	-0.01	0.02	0.01	0.01	0.10	0.04	-0.03
21	6	-0.10	-0.01	0.03	0.05	0.03	0.03	0.03	0.02	-0.10
22	1	-0.01	-0.12	0.10	0.04	0.05	-0.01	0.23	0.08	0.28
23	6	-0.05	0.03	0.07	0.02	0.06	0.16	-0.17	-0.04	0.02

24	6	-0.06	-0.24	0.07	0.01	0.05	-0.06	0.02	0.05	0.00
25	1	0.02	0.08	0.02	0.07	0.05	0.23	-0.06	-0.05	-0.15
26	1	-0.20	0.11	0.15	0.09	0.13	0.41	-0.31	-0.08	-0.24
27	1	0.03	-0.27	0.10	0.06	0.09	0.09	0.11	-0.01	-0.07
28	1	-0.01	0.15	-0.19	-0.10	-0.06	-0.28	-0.16	0.11	-0.27
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			22			23			24	
			A			A			A	
Frequencies	--	572.1698			576.4253			610.4112		
Red. masses	--	4.1140			4.6179			5.4364		
Frc consts	--	0.7935			0.9040			1.1935		
IR Inten	--	0.5501			1.1681			1.1368		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.07	0.00	-0.02	0.03	-0.07	0.13	0.02	-0.07
2	6	-0.05	0.07	-0.12	0.07	0.21	0.05	-0.14	-0.12	0.15
3	6	0.04	0.13	0.12	-0.04	0.06	-0.10	0.07	0.02	0.02
4	6	0.01	0.04	0.06	0.02	0.06	-0.16	-0.18	-0.16	-0.01
5	1	-0.14	0.00	-0.36	0.13	0.27	0.23	-0.30	-0.05	0.17
6	6	0.00	0.00	-0.09	0.06	0.08	0.06	0.10	-0.03	-0.01
7	1	-0.01	-0.02	-0.16	0.03	0.06	0.01	0.14	-0.03	-0.15
8	6	0.14	0.01	0.15	0.09	-0.03	-0.08	0.02	0.04	0.11
9	6	0.03	-0.04	-0.03	0.06	0.01	0.09	0.00	0.01	0.08
10	6	0.14	-0.03	-0.01	0.09	-0.08	-0.12	-0.05	0.00	-0.10
11	1	-0.10	-0.03	-0.32	0.09	0.18	0.13	0.09	-0.17	-0.06
12	6	0.04	0.00	0.02	0.07	0.05	0.02	-0.08	0.02	0.23
13	6	-0.02	-0.09	-0.12	-0.04	-0.07	0.05	-0.04	0.01	-0.09
14	7	0.01	0.03	0.01	0.03	0.05	0.08	0.00	0.15	0.08
15	1	-0.05	0.00	0.10	-0.06	-0.03	-0.24	-0.20	-0.22	-0.23
16	6	0.05	0.02	0.02	-0.03	-0.01	-0.06	-0.01	-0.02	-0.13
17	6	-0.10	-0.05	0.07	-0.14	-0.14	0.04	0.00	0.05	-0.06
18	6	-0.13	-0.08	-0.13	-0.03	0.00	0.11	-0.02	-0.04	-0.03
19	8	-0.04	-0.01	0.01	-0.01	-0.05	0.01	0.00	0.05	-0.11
20	8	0.00	0.01	-0.03	-0.07	-0.01	-0.01	0.15	-0.05	-0.06
21	6	0.00	-0.01	-0.08	0.06	0.01	0.14	0.04	0.04	0.09
22	1	0.13	-0.10	-0.08	0.07	-0.17	-0.22	-0.12	-0.05	-0.34
23	6	-0.14	-0.10	0.05	-0.09	-0.12	0.09	-0.01	0.05	0.04
24	6	0.02	0.05	0.09	-0.04	-0.03	-0.12	0.00	-0.05	-0.06
25	1	-0.09	-0.08	-0.13	0.04	0.00	0.29	0.09	0.08	0.13
26	1	-0.06	-0.04	0.30	-0.04	-0.17	0.01	-0.04	0.12	0.21
27	1	0.16	0.08	0.33	-0.07	-0.11	-0.38	0.00	-0.09	-0.17
28	1	-0.04	0.12	0.32	-0.18	-0.13	-0.06	0.04	0.09	0.05
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			25			26			27	
			A			A			A	
Frequencies	--	634.9713			698.6279			705.9263		
Red. masses	--	7.1481			5.1419			6.6098		
Frc consts	--	1.6981			1.4787			1.9407		
IR Inten	--	0.5725			4.1284			0.2310		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.19	0.06	-0.05	0.01	0.10	0.09	0.06	-0.17	0.11
2	6	-0.04	0.01	-0.03	0.07	0.02	0.00	-0.10	0.04	0.02
3	6	0.04	0.01	-0.02	-0.03	-0.04	-0.19	-0.07	-0.08	-0.07
4	6	-0.08	0.14	0.01	0.08	-0.08	-0.01	-0.19	0.25	-0.05
5	1	-0.04	0.03	0.00	0.09	0.11	0.21	0.07	0.02	0.11
6	6	0.27	0.07	-0.10	-0.08	0.01	-0.10	0.16	-0.10	-0.09
7	1	0.11	0.12	-0.01	0.03	0.14	0.16	0.08	-0.13	0.19
8	6	0.02	0.08	-0.09	0.05	0.07	0.24	0.09	0.06	0.09
9	6	-0.04	0.03	-0.01	-0.03	0.02	-0.04	0.05	-0.07	-0.01
10	6	-0.06	0.00	0.07	-0.02	-0.05	-0.03	-0.02	0.11	-0.04
11	1	0.32	0.02	-0.02	-0.16	-0.04	-0.28	0.13	-0.13	-0.18
12	6	-0.20	0.06	-0.12	0.02	-0.01	0.07	0.02	0.12	-0.01
13	6	-0.26	0.06	0.05	0.01	0.05	0.22	0.08	0.06	0.08
14	7	-0.03	-0.09	0.01	-0.03	-0.12	-0.13	-0.02	-0.09	-0.07

15	1	0.04	0.27	0.13	0.07	-0.10	-0.07	-0.20	0.25	-0.08
16	6	-0.14	0.05	0.12	-0.05	0.01	-0.03	0.05	-0.07	0.01
17	6	-0.18	-0.02	0.09	-0.12	-0.01	-0.11	0.14	-0.10	-0.08
18	6	0.06	-0.09	0.01	-0.02	-0.03	-0.17	-0.05	-0.08	-0.06
19	8	0.18	0.03	-0.05	0.00	0.02	0.05	0.03	0.02	0.02
20	8	0.03	-0.09	0.09	0.01	0.03	0.03	-0.02	0.03	0.03
21	6	0.06	-0.12	-0.04	0.09	-0.09	0.04	-0.18	0.24	0.00
22	1	-0.02	0.03	0.19	-0.12	-0.08	-0.34	-0.04	-0.07	-0.14
23	6	-0.03	0.03	-0.03	0.02	0.12	0.10	0.06	-0.16	0.09
24	6	0.09	-0.19	0.07	0.04	-0.03	-0.02	-0.10	0.00	0.02
25	1	0.19	-0.03	-0.12	0.11	-0.08	0.04	-0.16	0.26	0.00
26	1	-0.05	0.02	-0.08	0.07	0.16	0.27	0.09	-0.14	0.18
27	1	0.11	-0.17	0.14	0.02	0.03	0.12	0.04	-0.03	0.08
28	1	-0.15	-0.21	0.12	-0.17	-0.10	-0.29	0.11	-0.12	-0.17
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			28				29			30
			A				A			A
Frequencies	--		720.5404				750.1246			764.5047
Red. masses	--		4.6305				6.6987			3.4378
Frc consts	--		1.4164				2.2208			1.1839
IR Inten	--		19.9300				26.4302			8.8820

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.05	0.05	0.02	-0.15	0.05	0.00	0.03	-0.01
2	6	0.00	-0.03	0.03	-0.10	0.11	0.01	0.02	0.00	0.09
3	6	-0.03	-0.06	-0.19	-0.09	0.02	-0.04	-0.02	-0.05	-0.13
4	6	-0.02	-0.04	-0.05	-0.06	-0.07	0.02	-0.02	0.00	-0.06
5	1	0.10	0.14	0.52	-0.17	0.17	0.07	0.05	-0.01	0.09
6	6	-0.06	-0.01	-0.03	0.16	-0.06	-0.04	-0.02	0.01	0.00
7	1	0.07	0.09	0.14	0.06	-0.10	0.15	0.07	0.13	0.19
8	6	0.00	-0.02	0.00	-0.03	0.06	-0.05	-0.05	-0.04	-0.13
9	6	0.01	0.00	0.05	0.05	0.03	0.03	0.04	0.05	0.19
10	6	0.04	-0.01	0.03	-0.14	0.08	0.03	0.02	-0.01	0.04
11	1	-0.04	0.00	0.01	0.17	-0.06	0.00	0.06	0.06	0.18
12	6	-0.07	-0.05	-0.17	0.16	-0.09	0.00	0.04	0.08	0.18
13	6	0.03	0.02	0.03	0.02	-0.10	-0.01	-0.03	-0.03	-0.14
14	7	0.04	0.22	0.25	0.23	0.08	0.00	-0.04	-0.09	-0.10
15	1	0.11	0.13	0.33	-0.28	-0.25	0.12	-0.05	-0.08	-0.32
16	6	0.07	0.05	0.17	0.00	-0.02	0.06	0.03	0.03	0.09
17	6	0.03	-0.01	-0.04	-0.16	0.05	0.01	0.00	-0.02	-0.03
18	6	-0.06	-0.03	-0.14	0.06	-0.03	-0.05	-0.04	-0.01	-0.10
19	8	0.00	-0.04	-0.09	-0.07	-0.17	0.15	0.00	0.03	0.02
20	8	-0.01	-0.08	-0.04	-0.09	0.17	-0.18	0.02	0.02	0.03
21	6	-0.03	-0.01	-0.06	0.02	0.01	-0.04	-0.01	-0.04	-0.08
22	1	0.09	0.02	0.18	-0.12	0.16	0.13	0.12	0.09	0.38
23	6	0.01	-0.02	0.05	0.00	0.17	-0.05	-0.01	-0.03	-0.03
24	6	0.00	0.05	0.03	0.05	-0.14	0.04	0.02	0.04	0.03
25	1	-0.04	-0.01	0.08	0.22	0.16	-0.07	0.01	-0.02	0.11
26	1	0.03	0.00	0.13	0.04	0.19	0.04	0.09	0.06	0.33
27	1	0.08	0.13	0.34	0.10	-0.13	0.14	0.07	0.12	0.30
28	1	0.01	-0.02	-0.12	-0.14	0.08	0.10	0.11	0.11	0.36
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			31				32			33
			A				A			A
Frequencies	--		786.2286				817.0319			827.9826
Red. masses	--		6.7148				1.5146			4.6167
Frc consts	--		2.4456				0.5957			1.8648
IR Inten	--		22.3259				9.9087			5.5722

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.11	-0.21	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.15	0.05
2	6	0.10	0.27	-0.10	0.01	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00
3	6	-0.08	0.09	-0.03	-0.01	-0.01	-0.06	-0.07	-0.03	0.03
4	6	0.16	-0.18	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.04	-0.06	0.02
5	1	-0.06	0.31	-0.13	0.00	0.02	0.04	0.01	-0.02	-0.05



6	6	0.04	-0.04	0.00	-0.02	-0.01	-0.02	0.21	0.08	-0.08
7	1	-0.02	-0.17	0.21	0.06	0.07	0.14	-0.29	0.06	0.29
8	6	0.07	0.02	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.02	0.07	-0.02
9	6	0.08	-0.01	0.03	-0.02	-0.03	-0.09	-0.11	0.12	0.00
10	6	0.03	0.09	-0.03	0.02	0.02	0.05	-0.07	-0.04	0.05
11	1	-0.01	0.12	-0.08	0.06	0.04	0.18	0.18	0.28	-0.14
12	6	-0.02	-0.11	0.06	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.03	0.00
13	6	-0.01	-0.04	-0.01	-0.02	-0.02	-0.04	0.07	0.06	-0.02
14	7	-0.18	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01
15	1	0.01	-0.31	0.02	-0.01	-0.02	-0.03	0.03	-0.08	-0.01
16	6	-0.01	0.03	0.00	0.03	0.03	0.11	-0.08	0.10	-0.02
17	6	0.00	0.07	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.17	0.07	-0.08
18	6	0.02	-0.10	-0.01	0.01	0.00	0.03	-0.09	0.00	0.01
19	8	-0.01	0.14	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
20	8	0.08	-0.14	0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
21	6	-0.10	0.15	-0.03	0.01	0.03	0.06	0.11	-0.14	0.02
22	1	0.07	0.00	0.10	-0.12	-0.12	-0.46	-0.11	0.00	-0.08
23	6	0.01	0.12	-0.03	-0.01	0.00	-0.05	-0.14	-0.18	0.08
24	6	-0.04	-0.18	0.07	0.01	0.01	0.05	0.07	0.07	-0.02
25	1	0.04	0.26	-0.01	-0.16	-0.12	-0.51	0.07	-0.17	-0.10
26	1	-0.08	0.17	0.02	0.07	0.07	0.21	-0.31	-0.08	0.19
27	1	0.13	-0.23	0.13	-0.12	-0.13	-0.44	-0.01	0.07	-0.10
28	1	0.02	0.05	0.01	0.06	0.06	0.24	0.15	0.33	-0.07
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			34			35			36	
			A			A			A	
Frequencies	--	857.3606			872.0747			876.3965		
Red. masses	--	3.2612			4.7161			1.4536		
Frc consts	--	1.4124			2.1132			0.6578		
IR Inten	--	1.0349			21.0752			9.8346		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	-0.06	0.01	0.03	0.01	0.00	0.00	0.04
2	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03	-0.06	-0.02	-0.02	-0.09
3	6	0.03	0.03	0.10	0.02	0.04	0.01	0.00	0.01	0.03
4	6	0.00	0.03	0.04	0.06	-0.13	-0.01	-0.02	0.00	-0.05
5	1	-0.06	-0.11	-0.30	-0.03	0.16	0.35	0.15	0.19	0.53
6	6	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.03	0.03	0.01	0.04
7	1	0.06	0.11	0.16	-0.07	-0.15	-0.32	-0.13	-0.22	-0.39
8	6	-0.04	-0.04	-0.11	0.05	-0.04	-0.04	-0.02	0.00	-0.04
9	6	0.06	0.04	0.19	-0.08	0.02	0.04	0.02	0.01	0.01
10	6	0.03	0.02	0.07	0.21	-0.01	-0.06	-0.05	0.00	0.01
11	1	0.12	0.06	0.33	-0.08	0.04	-0.12	-0.10	-0.05	-0.25
12	6	-0.03	-0.03	-0.10	-0.14	0.02	0.05	0.04	0.01	0.03
13	6	0.04	0.05	0.18	-0.16	0.11	0.04	0.05	-0.01	0.03
14	7	0.00	0.02	0.03	0.11	-0.03	-0.06	-0.03	-0.01	-0.01
15	1	-0.02	0.00	-0.06	0.21	0.03	0.23	0.07	0.15	0.35
16	6	-0.04	-0.07	-0.18	-0.17	0.09	-0.01	0.03	-0.02	-0.02
17	6	-0.04	-0.03	-0.08	0.14	0.02	-0.08	-0.04	-0.02	-0.03
18	6	-0.03	-0.03	-0.13	-0.02	-0.08	0.03	0.01	0.02	0.01
19	8	0.00	0.00	-0.01	0.04	-0.10	0.10	-0.01	0.03	-0.02
20	8	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.10	-0.08	0.01	-0.02	0.02
21	6	-0.01	0.01	0.00	-0.10	0.10	0.00	0.02	-0.02	0.01
22	1	-0.05	-0.05	-0.20	0.25	-0.17	0.03	-0.04	0.05	0.07
23	6	0.01	0.01	-0.01	0.05	-0.03	-0.03	-0.03	-0.01	-0.03
24	6	0.02	0.02	0.07	-0.07	-0.07	0.05	0.02	0.01	0.01
25	1	-0.12	-0.09	-0.37	-0.20	0.02	0.02	0.03	-0.02	-0.09
26	1	0.17	0.14	0.47	-0.04	0.09	0.20	0.08	0.06	0.26
27	1	-0.04	-0.03	-0.13	0.03	-0.15	-0.05	-0.05	-0.02	-0.14
28	1	0.02	0.01	0.14	0.22	-0.06	0.13	0.02	0.11	0.22
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			37			38			39	
			A			A			A	
Frequencies	--	899.4788			924.6659			977.7374		



24	6	-0.02	-0.19	0.04	0.02	0.00	0.08	0.01	0.02	0.00
25	1	0.25	0.20	-0.13	0.04	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01
26	1	0.09	-0.21	-0.01	-0.02	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00
27	1	-0.01	-0.16	0.14	-0.11	-0.12	-0.36	0.01	0.02	-0.02
28	1	-0.16	0.10	0.07	-0.04	-0.01	-0.14	0.01	0.01	0.01
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			43			44			45	
			A			A			A	
Frequencies	--	1043.5756			1054.9520			1056.3547		
Red. masses	--	1.3565			5.7785			1.4246		
Frc consts	--	0.8704			3.7891			0.9366		
IR Inten	--	0.6975			3.5224			0.9262		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.01	0.00	0.03	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.11	0.07	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.07	-0.05	0.00	0.01	0.00
5	1	-0.01	0.00	0.00	0.18	-0.27	-0.11	0.01	-0.01	0.00
6	6	0.00	0.01	0.01	0.05	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
7	1	0.01	0.00	0.02	-0.09	0.11	0.04	0.00	0.01	0.01
8	6	0.00	0.00	-0.01	-0.07	-0.01	0.02	-0.01	0.00	-0.01
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.20	0.17	0.01	-0.01	0.01	0.00
10	6	0.02	0.01	0.06	0.26	0.05	-0.10	0.03	0.01	0.04
11	1	-0.03	0.00	-0.06	0.04	-0.16	-0.06	-0.02	-0.02	-0.04
12	6	0.00	0.00	0.00	0.30	-0.04	-0.05	0.01	0.00	-0.01
13	6	0.00	0.00	-0.01	0.10	-0.11	0.01	0.01	0.00	0.01
14	7	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
15	1	0.00	0.00	0.01	-0.17	0.04	0.29	-0.01	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.12	-0.01	-0.01	0.00	0.00
17	6	0.02	0.02	0.09	0.01	-0.01	0.01	-0.02	-0.02	-0.07
18	6	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.04	0.01	-0.01	-0.01	-0.03
19	8	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.07	-0.05	0.00	0.00	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.05	0.06	0.00	0.00	0.00
21	6	-0.02	-0.02	-0.09	0.02	-0.02	0.02	-0.03	-0.03	-0.09
22	1	-0.09	-0.07	-0.29	0.27	0.24	-0.09	-0.05	-0.05	-0.24
23	6	-0.02	-0.02	-0.08	0.03	0.06	-0.04	0.03	0.03	0.08
24	6	0.01	0.01	0.05	-0.12	-0.20	0.07	0.02	0.01	0.09
25	1	0.14	0.12	0.48	-0.06	-0.12	-0.07	0.13	0.12	0.48
26	1	0.12	0.12	0.45	0.07	0.09	0.06	-0.11	-0.12	-0.46
27	1	-0.07	-0.07	-0.24	-0.20	-0.14	0.20	-0.13	-0.12	-0.41
28	1	-0.13	-0.18	-0.49	-0.01	0.03	-0.09	0.11	0.15	0.41
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			46			47			48	
			A			A			A	
Frequencies	--	1116.9801			1138.7869			1169.9672		
Red. masses	--	2.2430			2.5025			1.5520		
Frc consts	--	1.6488			1.9121			1.2517		
IR Inten	--	0.6878			5.9623			15.1905		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.03	0.00	-0.07	-0.06	0.06	0.04	-0.09	0.01
2	6	0.02	0.07	-0.03	-0.03	-0.02	0.02	0.03	-0.02	0.00
3	6	0.00	-0.02	0.01	0.07	0.05	-0.04	0.07	0.02	-0.01
4	6	-0.01	0.00	0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.06	0.02	0.00
5	1	0.04	0.07	-0.02	-0.30	0.08	0.03	0.13	-0.05	-0.01
6	6	-0.02	0.00	0.00	0.09	0.05	-0.06	-0.08	0.07	-0.01
7	1	0.08	-0.05	0.00	-0.40	-0.02	-0.03	0.54	-0.29	-0.01
8	6	-0.02	0.05	-0.01	-0.07	-0.03	0.04	0.03	0.05	-0.01
9	6	0.06	-0.03	-0.01	-0.11	-0.11	0.06	-0.04	-0.02	0.01
10	6	0.07	0.12	-0.05	0.04	0.02	-0.02	-0.01	0.02	0.00
11	1	-0.01	-0.06	0.03	0.10	0.33	-0.01	-0.14	0.63	-0.05
12	6	-0.11	0.00	0.03	-0.02	0.02	-0.01	0.03	-0.01	0.00
13	6	-0.01	0.00	0.00	0.05	0.05	-0.03	-0.02	-0.04	0.02
14	7	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01

15	1	-0.02	0.00	-0.01	0.21	0.12	-0.11	-0.19	-0.07	0.09
16	6	0.04	-0.08	0.01	0.12	0.07	-0.05	-0.03	-0.01	0.01
17	6	0.04	0.00	-0.01	-0.08	-0.06	0.03	0.02	0.00	-0.01
18	6	-0.03	0.06	-0.01	-0.04	-0.05	0.03	-0.03	-0.03	0.01
19	8	0.02	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
20	8	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
21	6	0.09	-0.12	0.00	-0.01	-0.03	0.01	-0.01	-0.04	0.01
22	1	0.00	0.61	-0.15	0.01	0.28	-0.06	-0.01	0.03	0.01
23	6	-0.02	-0.02	0.01	0.08	0.07	-0.04	0.01	0.03	-0.01
24	6	-0.14	-0.04	0.05	-0.01	0.03	-0.01	0.02	0.03	-0.01
25	1	0.13	-0.11	-0.01	-0.25	-0.22	0.13	-0.13	-0.13	0.07
26	1	0.01	-0.04	0.01	0.31	-0.03	-0.09	-0.13	0.09	0.00
27	1	-0.63	0.16	0.13	0.03	0.01	-0.01	0.06	0.01	-0.02
28	1	0.03	0.02	-0.02	-0.04	-0.29	0.12	0.05	-0.12	0.03
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

49

50

51

			A			A			A		
Frequencies	--	1188.5677			1214.8967			1227.9674			
Red. masses	--	2.1917			1.4587			1.4833			
Frc consts	--	1.8242			1.2686			1.3178			
IR Inten	--	7.3464			9.2002			6.9481			
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	-0.02	0.01	0.00	-0.03	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	
2	6	0.11	0.05	-0.04	-0.01	-0.01	0.01	0.02	0.02	-0.01	
3	6	0.03	-0.03	0.00	0.04	0.01	-0.02	0.06	-0.04	0.00	
4	6	-0.11	0.05	0.00	-0.01	0.04	-0.01	-0.02	-0.05	0.01	
5	1	0.74	-0.19	-0.10	0.04	-0.03	0.00	-0.01	0.03	-0.02	
6	6	0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	
7	1	-0.27	0.10	0.02	-0.17	0.06	0.01	-0.11	0.03	0.01	
8	6	-0.03	-0.03	0.02	0.02	-0.03	0.00	0.00	-0.02	0.01	
9	6	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.05	0.02	
10	6	0.01	-0.02	0.00	-0.02	-0.03	0.02	0.00	-0.02	0.00	
11	1	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.04	-0.01	-0.03	0.16	-0.02	
12	6	-0.15	-0.09	0.08	0.01	-0.04	0.01	0.05	0.04	-0.03	
13	6	0.06	-0.05	0.00	-0.04	-0.05	0.02	-0.02	0.13	-0.03	
14	7	-0.04	0.00	0.03	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.00	
15	1	-0.29	-0.07	0.10	0.04	0.08	-0.04	-0.45	-0.37	0.29	
16	6	0.05	0.05	-0.03	0.04	0.04	-0.02	-0.01	0.00	0.00	
17	6	-0.03	0.00	0.01	0.06	-0.04	-0.01	-0.04	0.00	0.01	
18	6	-0.02	0.01	0.00	-0.06	-0.01	0.02	0.01	0.02	-0.01	
19	8	0.04	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	
20	8	0.03	0.05	-0.06	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	
21	6	-0.02	0.02	0.00	0.06	0.03	-0.02	0.02	0.02	-0.01	
22	1	0.02	-0.06	0.01	0.00	-0.17	0.05	0.04	-0.24	0.05	
23	6	0.01	0.03	-0.01	-0.01	0.07	-0.02	0.01	-0.04	0.01	
24	6	0.02	-0.03	0.00	-0.04	0.02	0.01	-0.02	0.00	0.01	
25	1	-0.06	-0.01	0.02	0.43	0.30	-0.20	0.33	0.26	-0.16	
26	1	0.15	-0.03	-0.03	-0.42	0.25	0.03	0.33	-0.18	-0.04	
27	1	0.22	-0.11	-0.03	-0.21	0.09	0.04	-0.27	0.11	0.05	
28	1	-0.05	0.12	-0.04	0.16	-0.48	0.12	-0.04	0.02	0.01	
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	

52

53

54

			A			A			A		
Frequencies	--	1238.8432			1251.6149			1262.9441			
Red. masses	--	1.4803			9.3458			1.9273			
Frc consts	--	1.3385			8.6260			1.8112			
IR Inten	--	53.7831			277.5949			13.9102			
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.05	0.02	0.01	0.06	-0.02	
2	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.06	-0.03	0.00	-0.03	0.01	
3	6	-0.05	0.03	0.00	0.17	-0.06	-0.03	-0.10	0.03	0.02	
4	6	0.00	0.01	0.00	-0.05	0.07	0.00	0.02	-0.04	0.01	
5	1	-0.04	0.02	0.01	0.00	0.09	-0.02	0.31	-0.16	-0.01	

6	6	0.03	0.01	-0.02	-0.04	0.00	0.02	0.05	-0.02	-0.01
7	1	0.24	-0.07	-0.03	-0.45	0.11	0.06	0.11	0.04	-0.04
8	6	0.01	-0.06	0.02	-0.02	0.06	-0.01	0.05	-0.16	0.03
9	6	-0.07	-0.03	0.03	0.00	0.01	0.00	0.07	0.00	-0.02
10	6	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.06	0.01	0.01
11	1	-0.01	0.30	-0.07	-0.04	-0.08	0.03	0.01	0.28	-0.07
12	6	-0.06	-0.01	0.02	-0.18	-0.08	0.08	0.01	0.03	-0.02
13	6	0.06	-0.08	0.01	-0.05	-0.05	0.02	-0.04	0.04	0.00
14	7	0.03	0.01	-0.01	0.55	-0.02	-0.13	0.06	-0.01	-0.02
15	1	0.33	0.26	-0.21	-0.19	-0.03	-0.01	-0.12	-0.16	0.09
16	6	-0.04	-0.04	0.02	0.05	0.02	-0.01	0.01	0.03	-0.01
17	6	0.01	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.01
18	6	-0.05	0.04	0.00	0.03	-0.03	0.00	-0.08	0.04	0.01
19	8	0.00	0.00	0.00	-0.24	0.19	-0.12	-0.03	0.02	-0.01
20	8	0.00	-0.01	0.01	-0.13	-0.16	0.20	-0.02	-0.02	0.03
21	6	0.02	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
22	1	0.02	-0.17	0.04	0.04	-0.16	0.03	-0.17	0.65	-0.12
23	6	0.03	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	6	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.01
25	1	0.36	0.27	-0.18	-0.08	-0.07	0.04	0.07	0.07	-0.04
26	1	0.37	-0.12	-0.06	-0.09	0.05	0.03	0.08	-0.04	-0.02
27	1	-0.09	0.01	0.02	-0.04	0.03	0.00	0.29	-0.16	-0.04
28	1	-0.06	0.36	-0.11	-0.04	0.17	-0.08	0.07	-0.23	0.06
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
		55			56			57		
		A			A			A		
Frequencies	--	1282.0161			1290.7443			1358.8322		
Red. masses	--	1.7793			1.9076			2.9097		
Frc consts	--	1.7230			1.8725			3.1654		
IR Inten	--	35.9093			47.6493			13.6488		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.01	-0.07	-0.01	0.03
2	6	0.02	0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.09	0.03
3	6	0.15	-0.05	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.06	0.16	-0.07
4	6	-0.03	0.05	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
5	1	-0.53	0.26	0.02	0.12	-0.06	-0.01	0.28	-0.22	0.00
6	6	-0.03	-0.02	0.01	0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.04	0.01
7	1	-0.45	0.18	0.04	-0.07	0.05	-0.01	-0.23	0.04	0.03
8	6	0.03	-0.08	0.02	-0.03	-0.12	0.04	0.11	0.04	-0.04
9	6	0.02	0.06	-0.02	0.01	-0.03	0.01	0.05	-0.10	0.02
10	6	-0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.05	0.04	0.01
11	1	-0.08	0.28	-0.04	-0.01	0.38	-0.08	0.04	-0.33	0.07
12	6	0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.01	0.07	0.02	-0.02
13	6	-0.04	-0.08	0.03	0.01	-0.01	0.00	-0.15	-0.11	0.07
14	7	-0.04	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.03	0.05	-0.04
15	1	-0.07	0.03	0.01	0.04	0.04	-0.03	-0.11	-0.07	0.06
16	6	-0.04	-0.05	0.02	-0.04	0.05	0.00	-0.02	0.08	-0.02
17	6	0.04	0.03	-0.02	-0.04	-0.01	0.02	0.03	0.05	-0.02
18	6	-0.01	0.06	-0.01	0.20	-0.06	-0.04	-0.06	-0.10	0.04
19	8	0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.02
20	8	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.02
21	6	-0.02	0.01	0.00	-0.05	0.07	0.00	0.02	-0.03	0.00
22	1	-0.07	0.30	-0.06	-0.05	0.21	-0.04	-0.07	0.12	-0.02
23	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.01	0.06	0.01	-0.02
24	6	0.00	-0.03	0.01	0.02	0.03	-0.01	0.00	0.06	-0.01
25	1	0.01	0.04	-0.01	-0.10	0.04	0.02	0.01	-0.03	0.00
26	1	-0.02	0.00	0.01	-0.43	0.13	0.09	0.28	-0.08	-0.05
27	1	0.25	-0.14	-0.03	-0.53	0.29	0.08	-0.22	0.16	0.02
28	1	0.00	0.25	-0.08	-0.11	0.29	-0.07	-0.06	0.54	-0.16
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
		58			59			60		
		A			A			A		
Frequencies	--	1385.9298			1405.3520			1423.4913		

Red. masses	--	4.6716			4.2331			5.4445		
Frc consts	--	5.2868			4.9259			6.5001		
IR Inten	--	18.6262			20.9849			73.0732		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	0.01	0.01	-0.08	0.04	0.01	0.07	-0.09	0.01
2	6	0.16	-0.07	-0.01	-0.06	0.00	0.01	0.11	-0.05	-0.01
3	6	-0.01	0.18	-0.06	-0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.02	0.00
4	6	-0.10	-0.11	0.06	0.09	-0.01	-0.02	-0.06	-0.03	0.03
5	1	-0.10	0.02	0.00	0.02	-0.04	0.00	-0.22	0.08	0.02
6	6	0.01	-0.04	0.01	0.08	-0.02	-0.02	-0.03	0.15	-0.03
7	1	-0.22	0.08	0.03	0.34	-0.14	-0.05	-0.03	-0.06	0.02
8	6	0.11	-0.04	-0.02	-0.16	0.01	0.05	-0.16	0.04	0.03
9	6	-0.10	0.00	0.03	-0.06	0.17	-0.03	0.21	-0.06	-0.04
10	6	-0.01	0.13	-0.03	0.06	-0.07	0.00	0.03	-0.17	0.03
11	1	0.04	-0.21	0.03	0.06	0.22	-0.07	0.03	-0.19	0.05
12	6	-0.09	0.25	-0.07	-0.05	0.11	-0.03	-0.06	0.12	-0.02
13	6	0.18	-0.08	-0.02	-0.11	-0.07	0.05	0.19	-0.02	-0.04
14	7	0.02	0.03	-0.05	-0.03	0.13	-0.12	-0.01	0.09	-0.09
15	1	-0.17	-0.16	0.09	-0.28	-0.30	0.20	-0.18	-0.12	0.09
16	6	-0.05	-0.13	0.05	0.25	-0.12	-0.03	-0.21	0.10	0.02
17	6	-0.03	-0.04	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.16	0.05
18	6	-0.02	0.12	-0.03	0.00	-0.02	0.01	-0.01	-0.10	0.03
19	8	0.02	-0.02	0.01	0.06	-0.06	0.04	0.04	-0.04	0.03
20	8	-0.02	-0.03	0.04	-0.03	-0.06	0.06	-0.02	-0.04	0.05
21	6	-0.09	-0.06	0.04	0.04	0.04	-0.02	0.09	0.04	-0.04
22	1	0.03	-0.15	0.02	0.07	-0.14	0.02	-0.02	0.20	-0.04
23	6	0.03	-0.01	0.00	0.09	-0.03	-0.01	0.02	0.09	-0.03
24	6	0.12	-0.06	-0.02	-0.05	-0.01	0.02	-0.19	0.10	0.03
25	1	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.23	0.13	-0.10
26	1	-0.54	0.23	0.08	-0.32	0.14	0.05	-0.12	0.16	-0.01
27	1	-0.17	0.07	0.03	0.10	-0.08	-0.01	0.42	-0.16	-0.08
28	1	0.01	-0.28	0.09	-0.08	0.35	-0.10	-0.08	0.25	-0.07
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			61			62			63	
			A			A			A	
Frequencies	--	1435.6114			1447.2040			1464.4360		
Red. masses	--	7.1260			1.8024			3.6535		
Frc consts	--	8.6531			2.2242			4.6164		
IR Inten	--	81.8390			5.5722			45.9117		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.21	-0.09	-0.02	0.09	-0.01	-0.03	-0.05	0.03	0.00
2	6	-0.10	0.06	0.00	-0.03	0.02	0.00	-0.05	0.08	-0.02
3	6	-0.09	-0.16	0.07	-0.02	0.06	-0.02	0.10	-0.06	0.00
4	6	0.05	0.02	-0.02	-0.04	-0.06	0.03	-0.06	-0.03	0.03
5	1	0.04	0.00	0.00	0.28	-0.11	-0.03	0.24	-0.02	-0.05
6	6	-0.09	0.12	-0.01	-0.01	-0.10	0.04	-0.03	-0.05	0.02
7	1	-0.31	0.12	0.04	-0.42	0.22	0.05	0.09	-0.02	0.00
8	6	0.00	-0.07	0.02	-0.05	0.04	0.00	0.16	0.07	-0.07
9	6	0.03	-0.21	0.05	0.06	0.05	-0.03	-0.14	0.04	0.02
10	6	-0.01	0.20	-0.05	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.09	0.02
11	1	-0.07	0.00	0.03	-0.12	0.47	-0.10	-0.02	-0.17	0.04
12	6	0.02	-0.05	0.02	0.03	0.02	-0.01	0.05	-0.11	0.03
13	6	-0.07	0.00	0.02	0.02	0.01	-0.01	0.06	0.12	-0.06
14	7	-0.05	0.22	-0.19	-0.01	0.05	-0.05	-0.03	0.17	-0.14
15	1	0.03	0.00	0.00	0.19	0.11	-0.09	0.26	0.23	-0.15
16	6	0.06	0.22	-0.08	-0.03	-0.06	0.03	-0.04	-0.06	0.03
17	6	0.07	-0.09	0.01	0.01	0.04	-0.01	-0.05	-0.01	0.02
18	6	-0.04	0.22	-0.05	-0.02	-0.04	0.02	0.05	-0.06	0.00
19	8	0.07	-0.09	0.06	0.02	-0.02	0.01	0.04	-0.06	0.04
20	8	-0.04	-0.09	0.10	-0.01	-0.02	0.03	-0.02	-0.06	0.07
21	6	-0.08	-0.11	0.05	0.08	0.03	-0.03	-0.07	-0.02	0.03
22	1	0.10	-0.49	0.10	0.02	-0.25	0.06	-0.09	0.57	-0.12
23	6	-0.05	0.03	0.00	-0.03	0.00	0.01	0.03	-0.02	0.00

24	6	0.12	-0.07	-0.01	-0.03	-0.01	0.01	-0.02	0.05	-0.01
25	1	0.01	-0.06	0.01	-0.20	-0.18	0.11	0.24	0.22	-0.13
26	1	-0.22	0.12	0.03	0.21	-0.11	-0.03	-0.05	0.01	0.01
27	1	0.08	-0.06	-0.01	-0.11	0.02	0.02	0.12	0.00	-0.04
28	1	0.03	0.11	-0.06	0.07	-0.27	0.07	-0.03	-0.19	0.06
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
		64			65			66		
		A			A			A		
Frequencies	--	1475.0707			1486.6214			1503.3259		
Red. masses	--	2.5843			2.6775			4.7626		
Frc consts	--	3.3129			3.4865			6.3417		
IR Inten	--	10.3445			26.6225			59.9387		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.06	0.03	0.09	0.02	-0.04	0.22	-0.13	-0.01
2	6	-0.07	0.02	0.01	-0.06	0.02	0.01	0.03	0.03	-0.02
3	6	0.07	0.13	-0.06	-0.07	-0.04	0.03	-0.14	-0.04	0.04
4	6	-0.04	-0.07	0.03	0.07	-0.01	-0.01	-0.06	-0.07	0.04
5	1	0.45	-0.19	-0.04	0.08	-0.04	0.00	-0.02	0.05	-0.01
6	6	0.01	0.06	-0.02	-0.03	-0.14	0.06	-0.11	0.17	-0.01
7	1	-0.17	-0.01	0.03	-0.27	0.20	0.04	-0.33	0.09	0.05
8	6	-0.11	0.02	0.03	0.09	0.10	-0.05	-0.01	-0.02	0.01
9	6	0.02	-0.07	0.02	-0.06	-0.01	0.02	0.00	0.15	-0.04
10	6	0.07	-0.01	-0.02	-0.01	0.03	0.00	0.06	-0.05	-0.01
11	1	0.03	-0.03	0.01	-0.13	0.33	-0.07	-0.06	-0.20	0.07
12	6	0.07	0.01	-0.02	-0.03	0.03	-0.01	0.02	0.09	-0.04
13	6	-0.09	0.04	0.01	0.04	0.06	-0.03	-0.04	-0.09	0.04
14	7	0.01	-0.05	0.04	0.01	-0.07	0.06	0.01	-0.04	0.03
15	1	0.26	0.15	-0.12	-0.03	-0.10	0.05	0.17	0.09	-0.08
16	6	0.01	-0.09	0.02	0.02	0.02	-0.01	0.12	0.02	-0.04
17	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.13	0.05	-0.08	0.16	-0.03
18	6	0.08	0.13	-0.06	-0.05	-0.03	0.02	-0.06	-0.17	0.06
19	8	-0.02	0.02	-0.02	-0.02	0.02	-0.02	-0.01	0.02	-0.01
20	8	0.01	0.02	-0.02	0.01	0.03	-0.03	0.00	0.01	-0.01
21	6	-0.05	-0.07	0.03	0.01	-0.06	0.01	-0.14	-0.06	0.06
22	1	0.08	-0.02	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.02	0.29	-0.08
23	6	0.00	-0.05	0.02	0.13	0.02	-0.04	0.12	-0.08	-0.01
24	6	-0.06	0.02	0.01	-0.05	0.04	0.00	0.08	0.07	-0.04
25	1	0.28	0.18	-0.13	0.11	0.00	-0.03	0.33	0.32	-0.18
26	1	-0.25	0.05	0.05	-0.37	0.24	0.04	0.03	-0.06	0.01
27	1	0.46	-0.20	-0.08	0.20	-0.07	-0.04	-0.17	0.19	0.00
28	1	-0.02	0.14	-0.03	-0.17	0.53	-0.12	-0.02	-0.18	0.07
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
		67			68			69		
		A			A			A		
Frequencies	--	1536.4326			1575.7315			1621.9459		
Red. masses	--	3.1303			4.2840			5.8082		
Frc consts	--	4.3537			6.2670			9.0026		
IR Inten	--	29.3424			16.6629			7.4517		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.01	-0.02	-0.10	0.10	-0.01	-0.13	0.10	0.00
2	6	-0.02	-0.08	0.03	0.21	-0.04	-0.04	-0.06	0.12	-0.03
3	6	-0.06	0.07	-0.01	-0.06	-0.03	0.03	0.12	-0.18	0.03
4	6	0.14	0.11	-0.07	-0.15	0.01	0.03	-0.09	-0.15	0.08
5	1	-0.16	-0.04	0.05	-0.36	0.20	0.01	0.23	0.02	-0.06
6	6	0.01	-0.11	0.03	0.08	-0.13	0.01	0.07	-0.14	0.02
7	1	-0.13	0.09	0.02	0.21	-0.01	-0.04	0.26	-0.05	-0.04
8	6	-0.04	0.13	-0.02	-0.08	-0.02	0.03	-0.13	0.11	0.01
9	6	-0.03	-0.06	0.02	0.11	-0.01	-0.03	0.12	0.01	-0.04
10	6	0.07	-0.03	-0.01	0.02	0.19	-0.06	0.09	-0.02	-0.02
11	1	-0.06	0.25	-0.06	0.02	0.26	-0.08	0.01	0.24	-0.07
12	6	-0.09	-0.01	0.03	0.07	-0.11	0.02	0.02	0.19	-0.08
13	6	0.05	-0.10	0.02	-0.05	0.06	-0.01	-0.01	-0.07	0.03
14	7	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.04	-0.02	0.01	-0.04	0.03

15	1	-0.33	-0.25	0.18	0.05	0.19	-0.09	0.25	0.09	-0.10
16	6	0.00	0.02	0.00	0.00	0.08	-0.02	-0.01	0.11	-0.03
17	6	0.02	0.08	-0.03	-0.08	0.09	-0.01	0.10	-0.14	0.01
18	6	0.14	-0.02	-0.03	0.00	-0.07	0.02	-0.07	-0.05	0.03
19	8	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01
21	6	-0.12	-0.08	0.06	-0.04	-0.15	0.05	-0.18	-0.06	0.07
22	1	0.06	0.18	-0.06	0.13	-0.38	0.06	0.08	0.12	-0.05
23	6	-0.13	0.02	0.03	0.11	-0.09	0.00	-0.13	0.14	0.00
24	6	-0.01	0.06	-0.02	-0.08	0.09	0.00	0.20	-0.01	-0.05
25	1	0.30	0.23	-0.15	0.25	0.04	-0.08	0.15	0.20	-0.10
26	1	0.26	-0.16	-0.03	-0.16	0.01	0.04	0.25	0.00	-0.07
27	1	0.21	-0.02	-0.06	0.30	-0.06	-0.07	-0.24	0.19	0.02
28	1	0.11	-0.34	0.07	-0.06	-0.07	0.04	0.06	0.17	-0.07
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

70				71			72		
A				A			A		
Frequencies	--	1628.1071		1633.9047		1665.6604			
Red. masses	--	7.5984		5.9194		6.7688			
Frc consts	--	11.8670		9.3106		11.0646			
IR Inten	--	36.5017		21.1243		65.6948			

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.02	-0.03	-0.04	0.03	0.01	-0.05	0.04	0.00
2	6	0.24	-0.01	-0.05	-0.18	0.12	0.00	-0.11	0.04	0.01
3	6	-0.16	-0.07	0.06	0.13	-0.17	0.03	0.09	-0.08	0.01
4	6	-0.23	-0.12	0.10	0.05	-0.09	0.02	0.07	0.02	-0.02
5	1	-0.25	0.20	-0.02	0.30	-0.07	-0.04	0.11	-0.05	-0.01
6	6	-0.01	-0.07	0.03	-0.01	0.03	-0.01	0.03	-0.07	0.01
7	1	0.01	0.06	0.02	0.15	-0.06	-0.03	0.10	-0.02	-0.01
8	6	0.08	0.17	-0.07	0.12	-0.14	0.00	-0.08	0.14	-0.01
9	6	-0.18	-0.20	0.10	-0.08	0.01	0.02	0.12	-0.19	0.02
10	6	-0.03	-0.20	0.06	-0.08	0.18	-0.03	0.03	-0.16	0.03
11	1	-0.05	0.09	-0.03	0.03	-0.12	0.03	-0.01	0.13	-0.04
12	6	0.08	0.12	-0.07	-0.05	0.20	-0.06	-0.04	0.02	0.00
13	6	-0.14	-0.10	0.07	0.10	-0.19	0.04	0.10	-0.11	0.01
14	7	0.02	-0.02	0.01	0.00	-0.03	0.02	-0.01	0.00	0.00
15	1	0.19	0.20	-0.13	0.11	-0.07	-0.01	-0.02	-0.06	0.03
16	6	0.19	0.15	-0.09	-0.04	0.11	-0.02	-0.14	0.13	0.00
17	6	0.04	0.03	-0.02	-0.04	0.13	-0.03	-0.17	0.27	-0.03
18	6	0.16	0.15	-0.08	0.17	-0.09	-0.02	-0.16	0.19	-0.01
19	8	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
21	6	0.13	0.14	-0.08	0.11	-0.06	-0.02	0.01	0.09	-0.03
22	1	-0.11	0.30	-0.05	-0.01	-0.31	0.08	-0.03	0.19	-0.04
23	6	-0.08	-0.01	0.02	-0.02	-0.04	0.02	0.28	-0.23	-0.01
24	6	-0.11	-0.04	0.04	-0.24	0.11	0.04	0.08	-0.09	0.00
25	1	-0.18	-0.09	0.08	0.04	-0.15	0.03	-0.10	0.01	0.03
26	1	0.01	-0.05	0.01	0.06	-0.09	0.01	-0.45	0.06	0.10
27	1	0.12	-0.15	0.01	0.39	-0.16	-0.07	-0.16	0.00	0.05
28	1	0.06	-0.01	-0.01	0.04	-0.27	0.07	-0.08	-0.34	0.13
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

73				74			75		
A				A			A		
Frequencies	--	3177.3036		3198.2495		3206.8000			
Red. masses	--	1.0882		1.0948		1.0904			
Frc consts	--	6.4724		6.5981		6.6064			
IR Inten	--	3.6648		1.7731		1.1587			

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	-0.06	0.04	-0.01	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.03	0.01	-0.01	-0.02	0.01



6	6	0.04	0.00	-0.02	-0.07	0.00	0.03	-0.01	0.00	0.00
7	1	0.24	0.70	-0.44	0.14	0.41	-0.25	0.01	0.03	-0.02
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.08	-0.01	0.02
11	1	-0.46	-0.03	0.20	0.78	0.05	-0.35	0.10	0.01	-0.04
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00
22	1	0.02	0.00	-0.01	-0.10	-0.01	0.03	0.86	0.08	-0.27
23	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
25	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.21	0.27	-0.01
26	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.01
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.06	-0.17	0.06
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		76 A			77 A			78 A		
Frequencies	--	3214.8658			3216.1914			3219.7502		
Red. masses	--	1.0921			1.0922			1.0922		
Frc consts	--	6.6504			6.6566			6.6712		
IR Inten	--	2.7869			0.3705			5.5263		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.03	-0.08	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.31	0.85	-0.37	0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.02	0.01
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	1	0.01	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00
11	1	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	1	0.12	-0.14	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00
22	1	0.01	0.00	0.00	0.26	0.02	-0.08	0.10	0.01	-0.03
23	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.01	-0.03	-0.07	0.03
24	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.07	0.02	-0.01	-0.03	0.01
25	1	-0.01	0.01	0.00	0.15	-0.20	0.01	0.08	-0.11	0.00
26	1	0.01	0.02	-0.01	-0.12	-0.33	0.12	0.30	0.81	-0.30
27	1	0.00	-0.01	0.00	0.28	0.74	-0.28	0.11	0.30	-0.11
28	1	0.00	0.00	0.00	0.05	0.01	-0.01	-0.12	-0.02	0.04
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		79 A			80 A			81 A		
Frequencies	--	3243.0131			3259.8221			3287.5955		



**Table S23.** Cartesian coordinates of optimized structure for (12-OO)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	3.344554	2.557235	-0.000200
2	6	0	0.870213	2.777158	0.000052
3	6	0	2.044529	1.960364	-0.000039
4	6	0	1.911447	0.527227	0.000033
5	6	0	0.611488	-0.100865	0.000135
6	6	0	-0.539254	0.783052	0.000185
7	6	0	-0.383582	2.209601	0.000187
8	6	0	3.098695	-0.274928	-0.000007
9	6	0	3.006174	-1.702783	0.000099
10	6	0	1.706561	-2.298535	0.000220
11	6	0	0.549837	-1.533974	0.000219
12	6	0	4.484720	1.775483	-0.000257
13	6	0	4.393850	0.342552	-0.000148
14	6	0	5.554749	-0.471788	-0.000176
15	6	0	5.454118	-1.874463	-0.000058
16	6	0	4.192227	-2.486234	0.000079
17	7	0	-1.857776	0.324406	0.000262
18	8	0	-2.865996	1.193747	0.000702
19	8	0	-2.195209	-0.951812	-0.000126
20	1	0	3.421022	3.640622	-0.000272
21	1	0	0.976430	3.857725	0.000001
22	1	0	-1.275068	2.823731	0.000253
23	1	0	1.627502	-3.383099	0.000303
24	1	0	-0.412353	-2.022248	0.000272
25	1	0	5.467573	2.240120	-0.000379
26	1	0	6.534075	0.000504	-0.000289
27	1	0	6.353455	-2.482095	-0.000074
28	1	0	4.113207	-3.570528	0.000168
29	47	0	-4.576888	-0.392461	-0.000178

**Table S24. Vibrational frequencies for (12-OO)**

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	34.2221			53.1442			70.6171		
Red. masses	--	7.4078			11.4616			10.1418		
Frc consts	--	0.0051			0.0191			0.0298		
IR Inten	--	1.8129			1.6389			0.2832		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.12	0.08	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.15
2	6	0.00	0.00	0.10	0.08	0.12	0.00	0.00	0.00	-0.05
3	6	0.00	0.00	0.02	0.04	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.12
4	6	0.00	0.00	0.07	-0.03	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.11
5	6	0.00	0.00	0.17	-0.06	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.12
6	6	0.00	0.00	0.19	-0.02	0.19	0.00	0.00	0.00	-0.01
7	6	0.00	0.00	0.18	0.05	0.19	0.00	0.00	0.00	0.04
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05
9	6	0.00	0.00	0.08	-0.15	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.22	-0.18	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.09
11	6	0.00	0.00	0.26	-0.14	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.16
12	6	0.00	0.00	-0.20	0.03	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.09
13	6	0.00	0.00	-0.14	-0.04	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	-0.22	-0.09	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.15
15	6	0.00	0.00	-0.14	-0.16	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.24
16	6	0.00	0.00	0.01	-0.19	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.15
17	7	0.00	0.00	0.16	-0.03	0.25	0.00	0.00	0.00	0.08
18	8	0.00	0.00	0.18	-0.02	0.23	0.00	0.00	0.00	0.58
19	8	0.00	0.00	0.07	-0.04	0.23	0.00	0.00	0.00	-0.33
20	1	0.00	0.00	-0.16	0.14	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.19
21	1	0.00	0.00	0.09	0.14	0.12	0.00	0.00	0.00	-0.06
22	1	0.00	0.00	0.22	0.08	0.23	0.00	0.00	0.00	0.13
23	1	0.00	0.00	0.30	-0.24	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.09
24	1	0.00	0.00	0.35	-0.16	0.19	0.00	0.00	0.00	-0.23
25	1	0.00	0.00	-0.31	0.06	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.08
26	1	0.00	0.00	-0.33	-0.06	-0.19	0.00	0.00	0.00	0.20
27	1	0.00	0.00	-0.20	-0.19	-0.18	0.00	0.00	0.00	0.36
28	1	0.00	0.00	0.07	-0.25	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.20
29	47	0.00	0.00	-0.11	0.11	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.01
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	100.8011			118.7824			145.6327		
Red. masses	--	10.1115			4.9622			18.0356		
Frc consts	--	0.0605			0.0413			0.2254		
IR Inten	--	4.8151			3.1904			22.9663		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.12	0.25	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.25	0.22	0.06	0.00
3	6	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.02	0.21	0.05	0.00
4	6	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.04	0.16	0.05	0.00
5	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.12	0.10	0.00
6	6	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	0.06	0.10	0.10	0.00
7	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.27	0.18	0.09	0.00
8	6	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.07	0.15	0.02	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.14	0.00	0.00	-0.01	0.12	0.02	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	-0.10	0.10	0.07	0.00
11	6	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	-0.13	0.11	0.10	0.00
12	6	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.21	0.23	-0.03	0.00
13	6	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.10	0.18	-0.02	0.00
14	6	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	0.03	0.16	-0.06	0.00

15	6	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	0.20	0.12	-0.06	0.00
16	6	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.15	0.10	-0.01	0.00
17	7	0.00	0.00	0.28	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.13	0.00
18	8	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	-0.20	0.02	0.10	0.00
19	8	0.00	0.00	0.59	0.00	0.00	0.02	0.01	0.13	0.00
20	1	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	-0.15	0.28	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	0.39	0.24	0.06	0.00
22	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.42	0.22	0.15	0.00
23	1	0.00	0.00	-0.36	0.00	0.00	-0.12	0.06	0.07	0.00
24	1	0.00	0.00	-0.14	0.00	0.00	-0.17	0.10	0.11	0.00
25	1	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	-0.31	0.24	-0.05	0.00
26	1	0.00	0.00	0.29	0.00	0.00	0.02	0.18	-0.09	0.00
27	1	0.00	0.00	0.21	0.00	0.00	0.34	0.10	-0.09	0.00
28	1	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.23	0.06	-0.01	0.00
29	47	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.01	-0.30	-0.11	0.00

		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies	--	190.2973			216.6201			232.2483		
Red. masses	--	4.5666			4.1390			9.2744		
Frc consts	--	0.0974			0.1144			0.2947		
IR Inten	--	0.5084			13.7016			3.6144		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	-0.12	0.09	0.06	0.00
2	6	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.11	0.00
3	6	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.07	0.04	0.14	0.00
4	6	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.24	0.04	0.14	0.00
5	6	0.00	0.00	0.14	0.00	0.00	0.07	0.05	0.15	0.00
6	6	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	0.03	0.03	0.07	0.00
7	6	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.08	0.00
8	6	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.28	-0.02	0.07	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.16	-0.11	0.08	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.13	-0.10	0.12	0.00
11	6	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	-0.20	-0.04	0.17	0.00
12	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.10	0.06	-0.01	0.00
13	6	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	0.11	0.02	-0.02	0.00
14	6	0.00	0.00	0.24	0.00	0.00	-0.07	-0.05	-0.13	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.16	-0.13	0.00
16	6	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	0.03	-0.20	-0.03	0.00
17	7	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.19	0.00
18	8	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.36	0.00
19	8	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	-0.01	0.33	-0.23	0.00
20	1	0.00	0.00	-0.40	0.00	0.00	-0.33	0.17	0.06	0.00
21	1	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	-0.18	-0.04	0.11	0.00
22	1	0.00	0.00	0.14	0.00	0.00	-0.10	-0.03	0.07	0.00
23	1	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	-0.37	-0.14	0.12	0.00
24	1	0.00	0.00	0.27	0.00	0.00	-0.47	-0.04	0.21	0.00
25	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.30	0.08	-0.05	0.00
26	1	0.00	0.00	0.43	0.00	0.00	-0.24	-0.01	-0.22	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.24	-0.21	-0.19	0.00
28	1	0.00	0.00	-0.46	0.00	0.00	-0.05	-0.31	-0.02	0.00
29	47	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00

		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies	--	277.1347			298.3507			351.3114		
Red. masses	--	4.4634			4.5788			8.5550		
Frc consts	--	0.2020			0.2401			0.6221		
IR Inten	--	0.4810			2.6868			14.9647		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	-0.06	-0.12	-0.07	0.00
2	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.23	0.08	0.07	0.00
3	6	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	0.14	-0.07	-0.10	0.00
4	6	0.00	0.00	0.16	0.00	0.00	0.02	-0.08	-0.11	0.00
5	6	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	-0.12	-0.06	-0.04	0.00

6	6	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.27	0.08	0.17	0.00
7	6	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	-0.14	0.06	0.17	0.00
8	6	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.05	-0.10	-0.13	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.15	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	0.12	-0.02	-0.13	0.00
11	6	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	0.02	-0.02	-0.09	0.00
12	6	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	-0.18	-0.16	-0.06	0.00
13	6	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00	0.04	-0.17	-0.04	0.00
14	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.16	-0.09	0.12	0.00
15	6	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	-0.01	0.06	0.13	0.00
16	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.16	0.12	-0.02	0.00
17	7	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.07	0.13	0.14	0.00
18	8	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.09	-0.02	-0.03	0.00
19	8	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.11	0.46	0.11	0.00
20	1	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	-0.16	-0.15	-0.07	0.00
21	1	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	0.45	0.24	0.05	0.00
22	1	0.00	0.00	-0.49	0.00	0.00	-0.20	0.05	0.16	0.00
23	1	0.00	0.00	-0.28	0.00	0.00	0.23	-0.07	-0.13	0.00
24	1	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	0.04	0.01	-0.12	0.00
25	1	0.00	0.00	-0.29	0.00	0.00	-0.40	-0.15	-0.09	0.00
26	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.28	-0.16	0.26	0.00
27	1	0.00	0.00	0.44	0.00	0.00	-0.05	0.13	0.23	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.34	0.26	-0.03	0.00
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00

		13 A			14 A			15 A		
Frequencies	--	373.2748			423.4298			433.7843		
Red. masses	--	10.7010			3.6335			6.7553		
Frc consts	--	0.8785			0.3838			0.7489		
IR Inten	--	45.9705			0.0630			5.2869		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.12	0.00	0.00	0.00	0.16	0.21	0.00	0.00
2	6	0.07	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.26	-0.11	0.00
3	6	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	0.06	0.22	-0.09	0.00
4	6	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.06	0.00
5	6	0.12	-0.12	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.08	-0.02	0.00
6	6	0.24	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.06	-0.01	0.00
7	6	0.16	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.06	0.19	-0.03	0.00
8	6	-0.06	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.07	-0.03	0.00
9	6	-0.16	0.03	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.11	-0.01	0.00
10	6	-0.10	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.18	-0.13	-0.03	0.00
11	6	-0.05	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.13	-0.02	0.00
12	6	-0.05	0.12	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.16	0.00	0.00
13	6	-0.12	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.08	0.05	0.00
14	6	-0.17	0.09	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.06	0.19	0.00
15	6	-0.24	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.23	0.00
16	6	-0.20	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.01	0.14	0.00
17	7	0.24	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.10	-0.04	0.00
18	8	0.49	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.17	-0.12	0.00
19	8	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.07	-0.07	0.00
20	1	-0.08	0.13	0.00	0.00	0.00	0.32	0.14	0.00	0.00
21	1	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.37	0.28	-0.12	0.00
22	1	0.11	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.06	0.29	0.12	0.00
23	1	0.00	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.34	-0.13	-0.03	0.00
24	1	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.31	-0.15	0.00	0.00
25	1	-0.02	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.27	0.23	-0.16	0.00
26	1	-0.15	0.03	0.00	0.00	0.00	0.35	-0.09	0.27	0.00
27	1	-0.24	0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.24	0.00
28	1	-0.17	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.32	0.14	0.13	0.00
29	47	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
		16 A			17 A			18 A		
Frequencies	--	466.3098			497.0039			498.4834		



24	1	0.00	0.00	-0.28	-0.02	0.22	0.00	0.00	0.00	0.35
25	1	0.00	0.00	0.44	-0.07	0.31	0.00	0.00	0.00	-0.38
26	1	0.00	0.00	-0.07	-0.02	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.35
27	1	0.00	0.00	0.35	0.00	0.11	0.00	0.00	0.00	0.05
28	1	0.00	0.00	-0.04	0.13	-0.30	0.00	0.00	0.00	0.20
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
		22			23			24		
		A			A			A		
Frequencies	--	570.8181			590.2896			595.1649		
Red. masses	--	6.1744			3.7465			6.3471		
Frc consts	--	1.1853			0.7692			1.3247		
IR Inten	--	2.9655			0.0149			10.7977		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.08	0.03	0.00
2	6	-0.15	0.09	0.00	0.00	0.00	0.16	0.13	0.29	0.00
3	6	-0.02	0.17	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.05	0.01	0.00
4	6	0.09	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.07	-0.05	0.00
5	6	0.08	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.09	-0.10	0.00
6	6	0.05	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.13	0.03	0.15	0.00
7	6	-0.08	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.09	0.31	0.00
8	6	0.08	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.12	0.04	0.02	0.00
9	6	-0.17	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.09	0.02	-0.03	0.00
10	6	-0.23	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.05	0.01	-0.12	0.00
11	6	-0.15	-0.12	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.08	-0.20	0.00
12	6	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	0.07	0.00	0.14	0.00
13	6	0.17	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.08	0.08	0.00
14	6	0.27	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.06	-0.04	0.00
15	6	0.04	0.06	0.00	0.00	0.00	0.17	0.01	-0.06	0.00
16	6	-0.02	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.01	-0.07	0.00
17	7	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00	0.18	0.02	-0.07	0.00
18	8	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.05	-0.13	0.00
19	8	0.07	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.21	-0.09	0.00
20	1	0.17	0.11	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.18	0.04	0.00
21	1	-0.31	0.11	0.00	0.00	0.00	0.33	0.34	0.28	0.00
22	1	-0.17	-0.20	0.00	0.00	0.00	-0.38	0.09	0.32	0.00
23	1	-0.24	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.03	0.13	-0.13	0.00
24	1	-0.25	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.06	-0.26	0.00
25	1	0.04	0.05	0.00	0.00	0.00	0.25	-0.06	0.25	0.00
26	1	0.30	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.36	0.10	-0.13	0.00
27	1	-0.06	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.29	0.01	-0.07	0.00
28	1	0.15	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.47	0.00	-0.07	0.00
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
		25			26			27		
		A			A			A		
Frequencies	--	651.9686			684.8730			704.1300		
Red. masses	--	7.8903			6.9140			7.0582		
Frc consts	--	1.9760			1.9107			2.0618		
IR Inten	--	5.4428			16.8754			0.3361		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.20	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.13	0.18	0.00
2	6	0.10	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.15	0.03	0.00
3	6	-0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.07	0.00
4	6	0.17	0.02	0.00	0.00	0.00	0.20	-0.08	0.06	0.00
5	6	0.28	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.06	-0.04	0.00
6	6	0.17	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.32	0.05	-0.12	0.00
7	6	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.30	-0.22	0.00
8	6	0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.08	0.05	0.00
9	6	-0.07	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.06	0.00
10	6	0.07	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.11	0.17	0.00
11	6	0.22	0.07	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.20	0.03	0.00
12	6	-0.27	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.23	0.03	0.00
13	6	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.04	-0.05	0.00
14	6	0.07	0.04	0.00	0.00	0.00	0.06	0.05	-0.12	0.00



15	6	-0.14	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.27	-0.19	0.00
16	6	-0.16	0.16	0.00	0.00	0.00	0.05	0.12	0.02	0.00
17	7	0.02	0.04	0.00	0.00	0.00	0.49	0.00	0.02	0.00
18	8	-0.20	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.05	-0.04	0.00
19	8	-0.15	0.10	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.01	0.03	0.00
20	1	-0.12	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.18	0.00
21	1	0.20	0.04	0.00	0.00	0.00	0.20	-0.01	0.05	0.00
22	1	0.11	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.43	0.29	-0.24	0.00
23	1	0.09	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.12	0.17	0.00
24	1	0.13	0.24	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.19	0.02	0.00
25	1	-0.32	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.19	-0.24	0.06	0.00
26	1	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	0.41	-0.01	0.02	0.00
27	1	-0.25	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.27	-0.21	0.00
28	1	-0.17	0.16	0.00	0.00	0.00	0.23	-0.03	0.03	0.00
29	47	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		28			29			30		
		A			A			A		
Frequencies	--	719.4102			750.2492			755.9486		
Red. masses	--	3.5319			7.4952			3.0937		
Frc consts	--	1.0770			2.4857			1.0416		
IR Inten	--	3.6394			12.3875			20.9355		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.11	-0.08	0.15	0.00	0.00	0.00	-0.01
2	6	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.08
3	6	0.00	0.00	-0.21	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.15
4	6	0.00	0.00	0.02	0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	0.12
5	6	0.00	0.00	0.23	-0.04	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.14
6	6	0.00	0.00	-0.07	-0.20	0.03	0.00	0.00	0.00	0.16
7	6	0.00	0.00	-0.05	0.06	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.06
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.20
9	6	0.00	0.00	-0.19	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.14
10	6	0.00	0.00	0.11	0.04	-0.18	0.00	0.00	0.00	-0.02
11	6	0.00	0.00	-0.11	0.16	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02
12	6	0.00	0.00	-0.10	-0.18	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04
13	6	0.00	0.00	0.18	0.03	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.12
14	6	0.00	0.00	0.00	0.17	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.05
15	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.10
16	6	0.00	0.00	0.01	-0.08	0.13	0.00	0.00	0.00	0.05
17	7	0.00	0.00	0.07	-0.17	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.07
18	8	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.30	0.00	0.00	0.00	0.02
19	8	0.00	0.00	-0.02	0.13	-0.30	0.00	0.00	0.00	0.02
20	1	0.00	0.00	0.30	-0.08	0.15	0.00	0.00	0.00	0.38
21	1	0.00	0.00	0.46	0.21	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.14
22	1	0.00	0.00	0.25	0.23	0.33	0.00	0.00	0.00	-0.21
23	1	0.00	0.00	0.29	0.02	-0.18	0.00	0.00	0.00	0.30
24	1	0.00	0.00	-0.36	0.16	0.03	0.00	0.00	0.00	0.32
25	1	0.00	0.00	-0.32	-0.18	0.01	0.00	0.00	0.00	0.27
26	1	0.00	0.00	-0.18	0.19	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.39
27	1	0.00	0.00	0.02	-0.15	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.12
28	1	0.00	0.00	0.25	-0.12	0.14	0.00	0.00	0.00	0.41
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		31			32			33		
		A			A			A		
Frequencies	--	790.3753			815.2974			833.9617		
Red. masses	--	6.7009			1.3798			4.9587		
Frc consts	--	2.4663			0.5404			2.0319		
IR Inten	--	7.9688			10.9657			0.0809		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	-0.24	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.07	0.20	0.00
2	6	0.02	0.32	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	-0.02	0.00
3	6	-0.11	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.08	0.06	0.00
4	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.09	0.12	-0.08	0.00
5	6	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	-0.09	0.00

6	6	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.03	0.00
7	6	0.20	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.06	0.06	0.00
8	6	0.08	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.14	-0.09	0.00
9	6	0.06	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.09	0.04	0.00
10	6	-0.02	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.08	0.24	0.00
11	6	-0.03	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.16	-0.14	0.00
12	6	0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.20	-0.16	0.00
13	6	0.07	0.05	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.10	0.00
14	6	0.00	0.11	0.00	0.00	0.00	0.06	0.06	0.07	0.00
15	6	-0.16	0.13	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.13	0.09	0.00
16	6	0.01	-0.21	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.05	-0.07	0.00
17	7	-0.10	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
18	8	-0.08	0.18	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
19	8	0.08	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
20	1	0.02	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.27	0.33	0.19	0.00
21	1	-0.14	0.33	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	0.00
22	1	0.08	-0.31	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.05	0.09	0.00
23	1	-0.12	0.15	0.00	0.00	0.00	0.21	0.31	0.23	0.00
24	1	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	0.21	-0.04	-0.38	0.00
25	1	-0.03	0.11	0.00	0.00	0.00	0.22	-0.10	-0.38	0.00
26	1	0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.47	0.08	0.02	0.00
27	1	-0.06	0.27	0.00	0.00	0.00	-0.57	-0.14	0.09	0.00
28	1	0.19	-0.22	0.00	0.00	0.00	-0.45	0.00	-0.08	0.00
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			34			35			36	
			A			A			A	
Frequencies	--	850.6240			872.5040			877.8910		
Red. masses	--	1.6899			2.3131			7.2189		
Frc consts	--	0.7204			1.0375			3.2780		
IR Inten	--	1.4090			6.7811			79.8069		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.00
2	6	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.07	-0.04	0.03	0.00
3	6	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.11	0.00	-0.05	0.00
4	6	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.14	0.25	-0.05	0.00
5	6	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	0.13	0.28	-0.07	0.00
6	6	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.02	0.15	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	-0.03	-0.10	0.13	0.00
8	6	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	0.15	0.11	0.03	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.07	-0.01	0.11	0.00
10	6	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.05	-0.09	0.01	0.00
11	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.09	-0.18	-0.10	0.00
12	6	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.06	0.04	0.01	0.00
13	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.14	-0.09	0.04	0.00
14	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.04	-0.29	-0.09	0.00
15	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.18	-0.09	0.00
16	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.07	0.07	0.13	0.00
17	7	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.03	0.00
18	8	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.18	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.18	0.00
20	1	0.00	0.00	0.41	0.00	0.00	-0.37	-0.05	-0.04	0.00
21	1	0.00	0.00	-0.65	0.00	0.00	0.28	0.15	0.02	0.00
22	1	0.00	0.00	-0.40	0.00	0.00	0.32	-0.18	0.02	0.00
23	1	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.55	0.11	-0.01	0.00
24	1	0.00	0.00	-0.14	0.00	0.00	0.33	-0.30	0.13	0.00
25	1	0.00	0.00	0.39	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.04	0.00
26	1	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.02	-0.39	0.11	0.00
27	1	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.30	0.29	0.08	0.00
28	1	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	-0.25	-0.11	0.14	0.00
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			37			38			39	
			A			A			A	
Frequencies	--	909.3726			925.2953			988.4688		



24	1	-0.21	0.06	0.00	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	0.33
25	1	-0.23	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.49	0.00	0.00	0.03
26	1	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.31
27	1	0.20	0.34	0.00	0.00	0.00	-0.33	0.00	0.00	-0.46
28	1	0.04	-0.22	0.00	0.00	0.00	0.25	0.00	0.00	0.23
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			43			44			45	
			A			A			A	
Frequencies	--	1052.5877			1053.8487			1059.6731		
Red. masses	--	6.9734			1.4131			1.4347		
Frc consts	--	4.5521			0.9247			0.9492		
IR Inten	--	144.6976			0.0015			0.0835		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.03
2	6	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.01
3	6	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.01
4	6	-0.19	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.11	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
6	6	0.29	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01
7	6	-0.08	0.09	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.01
8	6	-0.26	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.04
10	6	0.02	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.10
11	6	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.09
12	6	0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	-0.04
13	6	-0.08	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.02
14	6	0.26	0.15	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.05
15	6	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.09
16	6	-0.05	-0.24	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.08
17	7	0.17	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	8	-0.17	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	-0.05	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.12	0.06	0.00	0.00	0.00	0.44	0.00	0.00	-0.14
21	1	0.26	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.37	0.00	0.00	-0.08
22	1	-0.23	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.36	0.00	0.00	0.07
23	1	0.02	0.09	0.00	0.00	0.00	0.33	0.00	0.00	0.53
24	1	-0.01	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.32	0.00	0.00	-0.49
25	1	0.13	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.47	0.00	0.00	0.17
26	1	0.20	0.32	0.00	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	0.25
27	1	-0.03	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.16	0.00	0.00	-0.43
28	1	-0.17	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.37
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			46			47			48	
			A			A			A	
Frequencies	--	1113.7786			1156.7774			1167.2191		
Red. masses	--	2.3025			2.4305			3.4260		
Frc consts	--	1.6829			1.9162			2.7501		
IR Inten	--	56.0304			13.8629			55.4927		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.02	0.00	0.05	0.09	0.00	0.02	0.02	0.00
2	6	0.01	0.07	0.00	0.02	0.05	0.00	-0.09	-0.04	0.00
3	6	0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.08	0.00	-0.02	0.00	0.00
4	6	0.06	-0.04	0.00	-0.08	-0.10	0.00	-0.03	-0.11	0.00
5	6	0.02	0.00	0.00	-0.04	-0.07	0.00	-0.11	0.09	0.00
6	6	-0.09	-0.05	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.08	0.21	0.00
7	6	-0.01	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.00	0.11	-0.10	0.00
8	6	0.04	-0.02	0.00	0.07	0.13	0.00	0.08	0.00	0.00
9	6	-0.05	0.04	0.00	0.01	0.07	0.00	0.03	0.04	0.00
10	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.06	-0.08	0.00	0.02	-0.10	0.00
11	6	0.03	0.00	0.00	0.07	0.09	0.00	-0.01	0.03	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.08	0.00	-0.01	-0.04	0.00
13	6	-0.05	0.03	0.00	0.06	0.05	0.00	0.02	0.04	0.00
14	6	0.04	0.15	0.00	-0.03	-0.03	0.00	-0.02	0.03	0.00

15	6	0.12	-0.09	0.00	0.01	0.03	0.00	0.03	-0.01	0.00
16	6	-0.12	-0.10	0.00	0.01	-0.04	0.00	-0.04	-0.01	0.00
17	7	-0.07	-0.01	0.00	0.02	-0.03	0.00	0.08	0.16	0.00
18	8	0.05	-0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00
19	8	0.02	0.05	0.00	0.01	0.03	0.00	-0.05	-0.15	0.00
20	1	0.01	-0.03	0.00	0.28	0.08	0.00	0.15	0.01	0.00
21	1	0.04	0.07	0.00	0.35	0.03	0.00	-0.70	0.01	0.00
22	1	0.00	0.03	0.00	-0.22	-0.21	0.00	0.09	-0.16	0.00
23	1	0.04	-0.01	0.00	-0.35	-0.06	0.00	0.11	-0.12	0.00
24	1	0.02	0.02	0.00	-0.01	0.27	0.00	-0.06	0.12	0.00
25	1	0.02	-0.06	0.00	0.02	-0.31	0.00	0.03	-0.14	0.00
26	1	-0.17	0.62	0.00	0.07	-0.25	0.00	-0.05	0.10	0.00
27	1	0.14	-0.09	0.00	0.24	0.37	0.00	0.11	0.10	0.00
28	1	-0.65	-0.07	0.00	-0.11	-0.03	0.00	-0.38	0.02	0.00
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

49

50

51

Frequencies	--	1190.1523		1211.7443		1213.7272
Red. masses	--	1.6265		1.5041		2.9800
Frc consts	--	1.3574		1.3013		2.5864
IR Inten	--	5.6376		45.9826		135.6286

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.07	0.00	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
2	6	0.01	-0.03	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.02	-0.07	0.00
3	6	0.05	0.05	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.07	0.05	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00
5	6	-0.07	-0.01	0.00	0.02	-0.04	0.00	0.08	-0.17	0.00
6	6	0.04	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.04	-0.01	0.00
7	6	-0.02	0.01	0.00	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.04	0.00
8	6	0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.02	0.00
9	6	-0.02	-0.04	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.06	-0.03	0.00
10	6	-0.02	0.03	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.05	0.11	0.00
11	6	0.05	-0.01	0.00	-0.02	0.03	0.00	0.11	-0.02	0.00
12	6	-0.07	0.01	0.00	-0.05	0.01	0.00	0.03	0.00	0.00
13	6	0.03	0.06	0.00	-0.01	0.04	0.00	0.02	-0.02	0.00
14	6	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.01	-0.03	0.00
15	6	0.03	-0.03	0.00	-0.04	-0.05	0.00	0.03	0.02	0.00
16	6	-0.02	0.03	0.00	0.05	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00
17	7	0.07	-0.07	0.00	-0.06	0.10	0.00	-0.13	0.20	0.00
18	8	-0.05	0.04	0.00	0.04	-0.04	0.00	0.07	-0.08	0.00
19	8	-0.01	0.02	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.09	0.00
20	1	0.51	-0.11	0.00	0.43	-0.04	0.00	0.10	0.01	0.00
21	1	-0.05	-0.03	0.00	0.23	-0.01	0.00	-0.04	-0.07	0.00
22	1	-0.05	-0.03	0.00	-0.14	-0.15	0.00	0.25	0.40	0.00
23	1	-0.34	0.06	0.00	0.16	-0.03	0.00	-0.64	0.16	0.00
24	1	0.23	-0.37	0.00	-0.18	0.35	0.00	0.21	-0.19	0.00
25	1	-0.30	0.49	0.00	-0.15	0.22	0.00	0.02	0.02	0.00
26	1	-0.08	0.10	0.00	-0.07	0.18	0.00	0.01	-0.06	0.00
27	1	0.00	-0.07	0.00	-0.31	-0.46	0.00	0.16	0.21	0.00
28	1	-0.10	0.04	0.00	0.30	-0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

52

53

54

Frequencies	--	1232.7197		1243.0051		1268.9577
Red. masses	--	1.4512		1.3788		2.0946
Frc consts	--	1.2993		1.2552		1.9872
IR Inten	--	148.1935		251.9092		22.2415

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.08	0.00
2	6	-0.03	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.03	0.00
3	6	-0.05	0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	0.13	0.00	0.00
4	6	-0.01	-0.03	0.00	-0.03	-0.07	0.00	0.03	0.01	0.00
5	6	0.01	-0.06	0.00	0.05	-0.05	0.00	0.02	-0.01	0.00

6	6	-0.04	-0.03	0.00	-0.05	-0.05	0.00	-0.01	-0.03	0.00
7	6	0.04	0.03	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.03	0.02	0.00
8	6	0.05	0.06	0.00	-0.07	-0.06	0.00	-0.06	-0.02	0.00
9	6	0.03	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.12	-0.04	0.00
10	6	-0.02	-0.01	0.00	0.03	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00
11	6	0.01	0.02	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.04	-0.02	0.00
12	6	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.05	-0.01	0.00
13	6	-0.01	0.05	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.11	0.16	0.00
14	6	-0.01	0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.06	0.02	0.00
15	6	-0.02	-0.03	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
16	6	0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.04	0.00
17	7	0.07	-0.06	0.00	0.04	-0.01	0.00	-0.02	0.03	0.00
18	8	-0.03	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
19	8	0.00	0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
20	1	0.00	0.02	0.00	0.25	-0.02	0.00	-0.09	-0.09	0.00
21	1	-0.32	0.01	0.00	-0.25	0.03	0.00	-0.21	0.05	0.00
22	1	0.35	0.48	0.00	0.24	0.37	0.00	-0.08	-0.03	0.00
23	1	-0.23	0.00	0.00	0.36	0.00	0.00	-0.30	0.01	0.00
24	1	-0.02	0.10	0.00	-0.19	0.40	0.00	-0.09	0.07	0.00
25	1	0.13	-0.30	0.00	-0.15	0.33	0.00	0.02	-0.21	0.00
26	1	-0.08	0.19	0.00	0.10	-0.20	0.00	0.36	-0.58	0.00
27	1	-0.27	-0.41	0.00	0.19	0.29	0.00	-0.11	-0.18	0.00
28	1	0.22	-0.01	0.00	-0.14	0.00	0.00	-0.41	0.07	0.00
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			55			56			57	
			A			A			A	
Frequencies	--	1280.5625			1295.7812			1318.0412		
Red. masses	--	2.4255			1.7989			3.5038		
Frc consts	--	2.3434			1.7796			3.5863		
IR Inten	--	466.8249			14.1238			958.6671		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.03	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.05	-0.02	0.00
2	6	-0.01	0.05	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.00
3	6	0.22	-0.03	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.06	0.07	0.00
4	6	0.06	-0.01	0.00	-0.04	0.04	0.00	0.06	0.12	0.00
5	6	-0.06	-0.08	0.00	-0.02	-0.03	0.00	-0.11	-0.04	0.00
6	6	-0.06	-0.05	0.00	-0.01	-0.04	0.00	-0.15	-0.14	0.00
7	6	-0.04	0.05	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00
8	6	-0.01	0.08	0.00	0.02	0.00	0.00	0.06	-0.07	0.00
9	6	-0.14	0.02	0.00	0.16	0.01	0.00	-0.03	-0.09	0.00
10	6	0.01	0.02	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.05	0.02	0.00
11	6	0.05	0.03	0.00	-0.03	-0.01	0.00	-0.02	0.03	0.00
12	6	-0.05	-0.04	0.00	0.02	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00
13	6	0.02	0.01	0.00	0.04	-0.14	0.00	0.00	0.05	0.00
14	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00
15	6	0.02	-0.02	0.00	-0.06	0.04	0.00	0.03	-0.01	0.00
16	6	0.00	-0.04	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.03	0.04	0.00
17	7	0.07	0.08	0.00	0.03	0.03	0.00	0.25	0.15	0.00
18	8	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00
19	8	-0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.04	-0.08	0.00
20	1	-0.52	-0.01	0.00	-0.36	0.05	0.00	0.09	-0.02	0.00
21	1	-0.44	0.11	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.78	-0.10	0.00
22	1	-0.17	-0.12	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.04	0.05	0.00
23	1	0.09	0.02	0.00	-0.43	-0.01	0.00	0.15	0.01	0.00
24	1	0.09	-0.03	0.00	-0.17	0.27	0.00	-0.03	0.05	0.00
25	1	-0.13	0.11	0.00	-0.16	0.39	0.00	0.15	-0.25	0.00
26	1	-0.08	0.13	0.00	-0.21	0.34	0.00	0.01	-0.04	0.00
27	1	0.05	0.02	0.00	-0.09	0.02	0.00	0.03	-0.01	0.00
28	1	0.52	-0.09	0.00	-0.39	0.06	0.00	-0.22	0.06	0.00
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			58			59			60	
			A			A			A	
Frequencies	--	1384.1014			1411.4881			1420.7736		



24	1	0.14	-0.25	0.00	-0.07	0.20	0.00	0.06	0.01	0.00
25	1	-0.06	0.19	0.00	0.11	-0.21	0.00	-0.20	0.40	0.00
26	1	0.11	-0.21	0.00	0.15	-0.27	0.00	0.20	-0.48	0.00
27	1	-0.15	-0.14	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.23	-0.40	0.00
28	1	-0.47	0.02	0.00	-0.09	0.01	0.00	-0.14	-0.05	0.00
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			64			65			66	
			A			A			A	
Frequencies	--	1476.0470			1506.5251			1517.4619		
Red. masses	--	2.0386			6.0168			3.7280		
Frc consts	--	2.6169			8.0457			5.0578		
IR Inten	--	39.3037			5.8263			2.1620		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	-0.04	0.00	-0.25	-0.03	0.00	0.08	-0.09	0.00
2	6	-0.08	0.02	0.00	0.06	-0.11	0.00	0.12	-0.01	0.00
3	6	0.02	0.04	0.00	0.05	0.24	0.00	-0.03	0.10	0.00
4	6	0.03	0.01	0.00	0.04	-0.13	0.00	-0.02	-0.03	0.00
5	6	-0.10	0.01	0.00	-0.13	0.04	0.00	0.04	-0.14	0.00
6	6	0.07	0.03	0.00	0.06	-0.16	0.00	-0.03	0.04	0.00
7	6	-0.02	-0.07	0.00	0.03	0.17	0.00	-0.09	-0.04	0.00
8	6	0.04	-0.09	0.00	0.04	-0.13	0.00	0.09	0.04	0.00
9	6	0.00	0.12	0.00	0.08	0.29	0.00	0.08	0.01	0.00
10	6	0.04	-0.02	0.00	-0.19	-0.06	0.00	-0.05	-0.09	0.00
11	6	0.02	-0.05	0.00	0.10	0.01	0.00	-0.08	0.22	0.00
12	6	-0.03	0.03	0.00	0.14	0.04	0.00	-0.07	0.15	0.00
13	6	-0.08	0.00	0.00	-0.11	-0.08	0.00	-0.14	-0.08	0.00
14	6	0.04	0.05	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.10	-0.01	0.00
15	6	-0.02	-0.10	0.00	0.04	0.09	0.00	-0.11	-0.10	0.00
16	6	-0.05	0.01	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.03	0.06	0.00
17	7	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	0.03	0.00	0.02	0.02	0.00
18	8	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
20	1	-0.22	-0.03	0.00	0.39	-0.07	0.00	-0.11	-0.10	0.00
21	1	0.37	-0.02	0.00	-0.14	-0.10	0.00	-0.11	0.02	0.00
22	1	0.21	0.24	0.00	-0.25	-0.23	0.00	-0.04	0.05	0.00
23	1	-0.37	0.02	0.00	0.13	-0.08	0.00	0.28	-0.14	0.00
24	1	-0.17	0.33	0.00	0.11	0.00	0.00	0.31	-0.52	0.00
25	1	-0.05	0.05	0.00	0.18	0.01	0.00	0.08	-0.19	0.00
26	1	0.11	-0.07	0.00	0.06	-0.14	0.00	0.05	0.12	0.00
27	1	0.22	0.23	0.00	-0.18	-0.24	0.00	0.20	0.38	0.00
28	1	0.46	-0.02	0.00	0.20	-0.13	0.00	0.03	0.07	0.00
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			67			68			69	
			A			A			A	
Frequencies	--	1539.2651			1574.6896			1619.1667		
Red. masses	--	3.1853			4.8638			5.0605		
Frc consts	--	4.4466			7.1059			7.8167		
IR Inten	--	24.6525			32.3809			87.6470		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.08	-0.08	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.16	-0.05	0.00
2	6	-0.02	0.09	0.00	0.23	0.00	0.00	0.08	-0.04	0.00
3	6	0.16	-0.02	0.00	-0.07	0.08	0.00	-0.14	0.10	0.00
4	6	0.00	0.01	0.00	-0.04	-0.10	0.00	0.09	-0.13	0.00
5	6	-0.03	-0.04	0.00	-0.01	0.15	0.00	-0.09	0.16	0.00
6	6	0.03	0.11	0.00	0.07	-0.13	0.00	0.03	-0.11	0.00
7	6	-0.11	-0.16	0.00	-0.15	-0.01	0.00	0.00	0.05	0.00
8	6	0.00	0.02	0.00	0.06	0.08	0.00	0.02	0.08	0.00
9	6	-0.07	0.03	0.00	-0.11	-0.05	0.00	-0.18	-0.02	0.00
10	6	-0.01	0.02	0.00	0.29	-0.04	0.00	0.00	0.07	0.00
11	6	0.05	-0.03	0.00	-0.15	0.01	0.00	0.09	-0.15	0.00
12	6	-0.06	0.19	0.00	0.00	0.06	0.00	-0.07	0.03	0.00
13	6	0.04	-0.11	0.00	0.03	-0.14	0.00	-0.12	0.08	0.00
14	6	-0.02	-0.08	0.00	-0.09	0.11	0.00	0.12	-0.16	0.00





6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	-0.08	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
12	6	-0.05	-0.02	0.00	-0.04	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.03	0.02	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.03	0.01	0.00
15	6	-0.02	0.01	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00
16	6	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00
17	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.03	-0.46	0.00	-0.03	-0.38	0.00	0.01	0.08	0.00
21	1	0.01	0.05	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.01	-0.12	0.00	0.02	0.26	0.00	0.07	0.90	0.00
24	1	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.08	-0.04	0.00
25	1	0.56	0.27	0.00	0.42	0.20	0.00	-0.06	-0.03	0.00
26	1	-0.39	-0.19	0.00	0.34	0.16	0.00	-0.33	-0.16	0.00
27	1	0.23	-0.16	0.00	-0.29	0.20	0.00	0.12	-0.08	0.00
28	1	0.02	0.33	0.00	-0.04	-0.54	0.00	-0.01	-0.03	0.00
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		76			77			78		
		A			A			A		
Frequencies	--	3216.9993			3226.6632			3231.8873		
Red. masses	--	1.0927			1.0926			1.0977		
Frc consts	--	6.6629			6.7024			6.7551		
IR Inten	--	4.9549			2.0644			9.5806		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.07	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.08	0.00	0.00	-0.02	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.05	-0.02	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.01	-0.09	0.00	-0.01	-0.19	0.00	0.05	0.76	0.00
21	1	0.00	0.01	0.00	0.09	0.93	0.00	0.02	0.27	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	0.16	-0.12	0.00	0.05	-0.04	0.00
23	1	0.02	0.29	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
24	1	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.06	0.03	0.00	-0.19	-0.09	0.00	0.52	0.24	0.00
26	1	0.58	0.28	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.01	0.00
27	1	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.00
28	1	0.05	0.69	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		79			80			81		
		A			A			A		
Frequencies	--	3243.0695			3272.0366			3300.9077		



**Table S25.** Cartesian coordinates of optimized structure for (12-C<sub>10</sub>O)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	-2.737255	2.538890	-0.699275
2	6	0	-0.381986	3.256908	-0.324933
3	6	0	-1.384723	2.252554	-0.298193
4	6	0	-1.042880	0.922937	0.141452
5	6	0	0.305339	0.609864	0.531276
6	6	0	1.280287	1.644440	0.405901
7	6	0	0.933076	2.960007	0.017174
8	6	0	-2.065031	-0.084836	0.192790
9	6	0	-1.766964	-1.408433	0.663170
10	6	0	-0.442724	-1.676471	1.140969
11	6	0	0.566453	-0.714559	1.086073
12	6	0	-3.707602	1.564186	-0.665058
13	6	0	-3.403264	0.227019	-0.216203
14	6	0	-4.395396	-0.781871	-0.163573
15	6	0	-4.091865	-2.077349	0.293822
16	6	0	-2.789713	-2.390257	0.708856
17	7	0	2.702032	1.393959	0.584934
18	8	0	3.482400	2.354078	0.851900
19	8	0	3.173791	0.175798	0.410608
20	1	0	-2.977909	3.544931	-1.030451
21	1	0	-0.642114	4.262592	-0.640969
22	1	0	1.709929	3.714683	-0.036938
23	1	0	-0.243195	-2.631668	1.622648
24	1	0	1.476289	-0.877501	1.659568
25	1	0	-4.725465	1.791791	-0.970825
26	1	0	-5.408785	-0.545321	-0.478119
27	1	0	-4.870280	-2.832837	0.332219
28	1	0	-2.560080	-3.387118	1.077019
29	47	0	2.060071	-1.576478	-0.693920

**Table S26. Vibrational frequencies for (12-C<sub>10</sub>O)**

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	42.0966			47.2293			78.6037		
Red. masses	--	12.9120			9.6079			14.1955		
Frc consts	--	0.0135			0.0126			0.0517		
IR Inten	--	0.4485			1.3068			3.6564		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.12	0.11	0.18	0.02	-0.04	-0.14	-0.05	0.04	0.01
2	6	-0.09	0.06	0.08	0.04	-0.09	-0.15	-0.04	0.07	-0.05
3	6	-0.10	0.07	0.09	0.01	-0.06	-0.12	-0.03	0.05	-0.05
4	6	-0.09	0.04	0.00	-0.03	-0.05	-0.06	0.00	0.05	-0.08
5	6	-0.07	0.01	-0.07	-0.04	-0.08	-0.04	0.01	0.07	-0.12
6	6	-0.07	0.01	-0.06	-0.02	-0.08	-0.01	-0.03	0.09	-0.07
7	6	-0.08	0.03	0.00	0.01	-0.09	-0.07	-0.03	0.09	-0.04
8	6	-0.10	0.05	-0.02	-0.06	-0.01	0.01	0.02	0.03	-0.05
9	6	-0.09	0.02	-0.11	-0.10	0.00	0.07	0.07	0.03	-0.07
10	6	-0.08	-0.01	-0.16	-0.09	-0.04	0.02	0.09	0.05	-0.12
11	6	-0.08	-0.01	-0.13	-0.06	-0.08	-0.04	0.07	0.07	-0.14
12	6	-0.13	0.12	0.18	-0.02	0.00	-0.05	-0.04	0.03	0.07
13	6	-0.12	0.09	0.07	-0.07	0.02	0.04	-0.01	0.03	0.04
14	6	-0.12	0.10	0.05	-0.11	0.08	0.16	0.01	0.02	0.11
15	6	-0.11	0.06	-0.05	-0.16	0.10	0.24	0.05	0.02	0.08
16	6	-0.10	0.03	-0.13	-0.15	0.06	0.19	0.08	0.02	-0.01
17	7	-0.07	0.03	-0.10	-0.04	-0.07	0.14	-0.03	0.10	0.05
18	8	-0.04	0.05	-0.27	-0.08	-0.07	0.26	-0.15	0.05	0.59
19	8	-0.07	0.00	0.05	0.00	-0.05	0.14	0.06	0.21	-0.40
20	1	-0.12	0.14	0.26	0.06	-0.05	-0.20	-0.08	0.04	0.03
21	1	-0.10	0.08	0.14	0.06	-0.10	-0.21	-0.06	0.07	-0.04
22	1	-0.08	0.03	-0.01	0.02	-0.10	-0.05	-0.05	0.12	0.00
23	1	-0.08	-0.03	-0.20	-0.11	-0.04	0.01	0.12	0.05	-0.12
24	1	-0.08	-0.03	-0.12	-0.05	-0.11	-0.07	0.07	0.11	-0.12
25	1	-0.14	0.15	0.25	-0.01	0.02	-0.05	-0.06	0.02	0.13
26	1	-0.14	0.13	0.12	-0.12	0.11	0.19	-0.02	0.01	0.19
27	1	-0.12	0.07	-0.07	-0.20	0.14	0.34	0.06	0.01	0.14
28	1	-0.09	0.00	-0.21	-0.18	0.07	0.24	0.12	0.02	-0.04
29	47	0.21	-0.11	0.05	0.12	0.07	-0.09	0.00	-0.14	0.02
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	101.4980			130.1033			140.0223		
Red. masses	--	6.0935			6.5661			11.6997		
Frc consts	--	0.0370			0.0655			0.1352		
IR Inten	--	0.8733			4.7490			10.0791		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.02	-0.12	-0.03	0.03	0.11	-0.05	0.03	0.03
2	6	-0.06	0.07	0.22	0.02	-0.04	-0.10	-0.01	0.05	-0.17
3	6	-0.02	0.03	0.05	-0.02	0.01	0.05	-0.03	0.07	-0.01
4	6	-0.02	0.03	0.05	-0.05	0.02	0.12	-0.02	0.10	0.08
5	6	-0.03	0.03	0.07	-0.04	0.00	0.08	-0.02	0.13	0.07
6	6	-0.04	0.05	0.11	-0.01	-0.05	-0.06	-0.03	0.12	0.02
7	6	-0.07	0.08	0.25	0.03	-0.07	-0.17	-0.01	0.08	-0.15
8	6	-0.01	0.02	0.02	-0.06	0.04	0.13	0.01	0.08	0.10
9	6	-0.03	0.05	0.12	-0.06	0.04	0.16	0.06	0.09	0.10
10	6	-0.03	0.05	0.12	-0.08	0.06	0.23	0.06	0.13	0.12
11	6	-0.01	0.03	0.05	-0.06	0.03	0.16	0.03	0.14	0.08
12	6	0.05	-0.06	-0.23	-0.03	0.03	0.08	-0.03	0.01	0.07
13	6	0.02	-0.02	-0.12	-0.03	0.01	0.02	0.02	0.01	0.05
14	6	0.02	-0.02	-0.11	0.02	-0.04	-0.18	0.08	-0.06	-0.06

15	6	-0.02	0.03	0.07	0.02	-0.05	-0.22	0.14	-0.06	-0.10
16	6	-0.05	0.07	0.18	-0.03	0.00	0.00	0.13	0.02	0.01
17	7	-0.03	0.02	-0.03	-0.01	-0.07	-0.07	-0.07	0.07	0.17
18	8	0.01	0.00	-0.05	-0.02	-0.12	0.09	-0.02	0.06	0.06
19	8	-0.06	0.03	-0.14	0.01	-0.04	-0.25	-0.18	-0.02	0.46
20	1	0.03	-0.03	-0.17	-0.03	0.04	0.13	-0.09	0.02	0.01
21	1	-0.08	0.09	0.29	0.05	-0.06	-0.18	-0.01	0.02	-0.28
22	1	-0.08	0.10	0.33	0.07	-0.11	-0.30	0.00	0.07	-0.23
23	1	-0.03	0.07	0.15	-0.10	0.08	0.27	0.08	0.14	0.12
24	1	0.02	0.02	-0.01	-0.03	0.03	0.10	0.07	0.15	0.01
25	1	0.08	-0.10	-0.38	-0.03	0.03	0.07	-0.04	-0.02	0.08
26	1	0.05	-0.05	-0.22	0.05	-0.08	-0.32	0.09	-0.12	-0.12
27	1	-0.03	0.04	0.11	0.06	-0.10	-0.40	0.19	-0.12	-0.20
28	1	-0.08	0.10	0.30	-0.05	0.00	0.01	0.17	0.03	0.00
29	47	0.04	-0.06	-0.05	0.05	0.03	0.00	0.00	-0.12	-0.12

		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies	--	193.2318			211.7462			264.0808		
Red. masses	--	4.8516			8.8416			4.6464		
Frc consts	--	0.1067			0.2336			0.1909		
IR Inten	--	3.3265			8.1157			4.7251		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	0.06	0.23	0.09	-0.02	0.00	-0.02	0.01	-0.01
2	6	-0.02	0.02	0.10	0.04	-0.09	-0.07	-0.01	0.03	0.01
3	6	-0.02	0.02	0.07	0.05	-0.07	0.05	-0.06	0.08	0.18
4	6	0.03	-0.04	-0.13	0.02	-0.05	0.15	-0.06	0.09	0.21
5	6	0.04	-0.05	-0.18	0.05	-0.08	0.10	-0.02	0.04	0.05
6	6	0.04	-0.04	-0.16	0.02	-0.05	0.08	0.00	0.00	-0.07
7	6	0.01	-0.02	-0.06	0.02	-0.08	-0.03	0.02	-0.02	-0.15
8	6	0.03	-0.03	-0.12	-0.03	0.00	0.15	-0.04	0.06	0.16
9	6	-0.01	0.01	0.05	-0.09	-0.03	0.11	0.01	0.02	0.01
10	6	-0.02	0.03	0.05	-0.06	-0.12	-0.01	0.07	-0.06	-0.23
11	6	0.03	-0.03	-0.11	0.02	-0.17	-0.05	0.04	-0.04	-0.17
12	6	-0.01	0.01	0.03	0.05	0.03	0.00	0.03	-0.05	-0.17
13	6	0.03	-0.05	-0.15	0.01	0.04	0.05	0.00	0.00	0.00
14	6	0.05	-0.06	-0.18	-0.02	0.06	-0.11	0.03	-0.04	-0.06
15	6	-0.01	0.01	0.04	-0.10	0.05	-0.11	0.01	0.00	0.07
16	6	-0.05	0.06	0.21	-0.15	0.00	0.02	0.02	0.02	0.05
17	7	0.03	0.00	-0.02	0.07	0.17	0.04	0.00	-0.04	-0.03
18	8	-0.03	0.03	0.04	-0.11	0.36	-0.06	0.00	-0.07	0.04
19	8	0.07	0.00	0.11	0.25	0.26	0.03	-0.01	-0.05	0.02
20	1	-0.11	0.12	0.45	0.16	-0.03	-0.06	-0.01	-0.03	-0.12
21	1	-0.05	0.06	0.24	0.06	-0.13	-0.19	0.01	0.01	-0.07
22	1	0.00	-0.01	-0.04	0.03	-0.10	-0.08	0.05	-0.06	-0.31
23	1	-0.04	0.08	0.16	-0.05	-0.17	-0.12	0.14	-0.15	-0.43
24	1	0.02	0.01	-0.10	0.04	-0.25	-0.09	0.07	-0.10	-0.23
25	1	-0.02	0.02	0.09	0.07	0.04	-0.07	0.08	-0.13	-0.42
26	1	0.07	-0.09	-0.29	0.03	0.10	-0.24	0.06	-0.09	-0.19
27	1	-0.02	0.03	0.10	-0.12	0.06	-0.24	0.01	0.00	0.11
28	1	-0.10	0.13	0.42	-0.21	-0.02	0.00	0.05	0.01	0.02
29	47	-0.01	0.00	0.01	-0.02	-0.04	-0.03	0.00	0.01	0.02

		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies	--	277.8573			296.3523			323.6512		
Red. masses	--	5.0924			4.7024			10.2449		
Frc consts	--	0.2316			0.2433			0.6323		
IR Inten	--	2.6033			2.8469			0.3578		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.04	0.17	0.01	0.02	0.03	-0.18	-0.05	0.01
2	6	0.04	-0.04	-0.15	-0.03	0.03	0.15	-0.02	-0.03	-0.01
3	6	0.01	-0.01	0.05	-0.03	0.03	0.16	-0.12	0.04	0.02
4	6	0.01	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.04	-0.07	0.06	0.01
5	6	-0.03	0.04	0.21	-0.01	-0.02	0.03	0.00	0.13	0.06







24	1	-0.05	0.25	0.06	0.06	0.02	-0.19	-0.02	0.24	0.11
25	1	0.08	0.23	-0.25	-0.05	0.19	0.24	0.00	-0.19	-0.15
26	1	0.04	-0.15	-0.07	0.00	-0.02	0.07	0.03	-0.04	-0.40
27	1	0.00	0.06	-0.06	-0.04	0.07	0.12	-0.03	0.06	0.17
28	1	-0.06	-0.29	0.00	-0.06	-0.05	0.18	-0.07	0.05	-0.02
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			22			23			24	
			A			A			A	
Frequencies	--	571.2429			587.4032			606.7222		
Red. masses	--	5.6430			3.6692			5.1584		
Frc consts	--	1.0849			0.7459			1.1188		
IR Inten	--	1.4855			0.7646			3.6465		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	-0.08	0.07	-0.01	-0.04	-0.06	0.10	-0.02	0.01
2	6	-0.06	-0.16	-0.02	0.00	-0.07	0.17	-0.13	0.17	0.01
3	6	-0.03	-0.12	0.11	0.01	-0.07	-0.13	0.05	0.00	0.02
4	6	0.07	-0.04	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.05	-0.06	-0.14
5	6	0.04	0.05	-0.10	-0.04	0.08	0.07	0.02	-0.06	-0.05
6	6	0.04	0.02	0.06	0.03	-0.02	0.05	-0.13	0.11	0.16
7	6	-0.05	-0.02	0.02	0.06	-0.10	-0.10	-0.09	0.12	-0.16
8	6	0.06	0.06	0.03	0.01	0.02	0.07	-0.04	0.03	0.08
9	6	-0.11	0.05	-0.16	-0.06	0.06	0.14	0.01	0.00	-0.03
10	6	-0.21	0.17	-0.12	-0.03	0.09	0.00	-0.02	-0.02	0.08
11	6	-0.19	0.13	-0.02	-0.02	0.06	-0.13	0.05	-0.09	-0.02
12	6	0.05	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	0.09	0.06	0.04	0.02
13	6	0.13	0.07	0.16	0.08	-0.04	-0.12	-0.06	0.03	0.10
14	6	0.24	0.02	0.03	0.07	0.01	-0.05	-0.01	-0.05	-0.11
15	6	0.05	-0.02	0.01	-0.03	0.04	0.10	-0.03	0.02	0.13
16	6	-0.01	-0.02	0.05	0.02	-0.05	-0.12	0.04	-0.02	-0.09
17	7	-0.01	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.05	-0.06	-0.07	0.14
18	8	-0.05	0.01	-0.02	-0.01	0.03	-0.01	0.01	-0.10	-0.06
19	8	0.02	-0.03	-0.02	-0.05	0.01	-0.03	0.16	0.00	-0.02
20	1	0.13	-0.10	-0.04	-0.06	0.01	0.11	0.15	-0.03	-0.05
21	1	-0.12	-0.22	-0.14	-0.01	0.00	0.40	-0.28	0.15	0.03
22	1	-0.13	0.06	-0.05	0.06	-0.11	-0.23	-0.04	0.05	-0.37
23	1	-0.23	0.22	-0.04	0.07	0.05	-0.12	-0.12	0.01	0.18
24	1	-0.28	0.04	0.09	0.03	-0.02	-0.24	0.01	-0.05	0.06
25	1	0.10	-0.18	-0.25	-0.11	0.03	0.41	0.11	0.10	-0.10
26	1	0.29	0.06	-0.12	0.08	0.04	-0.05	0.05	-0.17	-0.39
27	1	-0.03	0.07	-0.08	-0.08	0.10	0.19	-0.02	0.01	0.21
28	1	0.09	0.05	0.17	0.10	-0.13	-0.40	0.09	-0.06	-0.23
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			25			26			27	
			A			A			A	
Frequencies	--	642.1601			703.8114			706.5457		
Red. masses	--	7.5494			7.0069			6.4711		
Frc consts	--	1.8342			2.0450			1.9033		
IR Inten	--	2.1869			0.5209			3.7384		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.20	0.07	-0.05	-0.08	-0.20	0.01	0.03	-0.03	-0.10
2	6	0.05	0.01	0.02	0.13	0.00	0.03	-0.04	0.04	-0.03
3	6	-0.05	0.02	-0.02	0.02	-0.06	0.07	-0.03	0.03	0.14
4	6	0.19	-0.01	-0.04	-0.07	-0.07	-0.01	0.03	0.03	0.13
5	6	0.27	0.03	0.06	-0.05	0.03	-0.06	0.11	-0.09	-0.25
6	6	0.17	0.09	0.09	0.02	0.13	-0.02	0.02	-0.03	-0.14
7	6	0.12	0.10	-0.01	0.25	0.26	-0.01	-0.04	0.03	-0.01
8	6	0.04	0.04	0.01	-0.07	-0.07	-0.01	0.01	0.03	0.01
9	6	-0.06	-0.09	-0.02	0.02	-0.05	0.06	-0.05	0.04	0.12
10	6	0.02	0.05	0.01	-0.08	-0.19	0.04	0.04	-0.02	-0.11
11	6	0.22	-0.06	0.04	-0.21	-0.07	0.00	0.00	0.05	0.18
12	6	-0.28	0.10	-0.11	-0.21	-0.07	-0.01	-0.05	0.05	0.08
13	6	-0.04	0.12	0.04	-0.05	0.03	-0.04	0.05	-0.04	-0.22
14	6	0.08	-0.03	-0.01	0.02	0.12	-0.04	0.02	-0.01	0.04

15	6	-0.11	-0.09	0.04	0.24	0.24	0.00	-0.03	-0.05	-0.03
16	6	-0.11	-0.19	0.01	0.12	0.01	0.02	-0.03	-0.02	0.02
17	7	0.02	-0.08	0.00	-0.01	-0.02	0.03	-0.05	-0.06	0.37
18	8	-0.18	0.07	-0.01	-0.03	0.02	-0.01	0.02	0.01	-0.10
19	8	-0.06	-0.14	-0.04	0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.09
20	1	-0.11	0.10	-0.06	-0.06	-0.21	-0.04	0.09	-0.05	-0.21
21	1	0.09	0.02	0.01	-0.01	-0.06	-0.05	-0.04	0.01	-0.13
22	1	0.07	0.14	-0.15	0.25	0.27	-0.07	-0.06	0.06	0.14
23	1	0.00	0.08	0.08	-0.07	-0.21	0.00	0.09	-0.11	-0.30
24	1	0.13	-0.20	0.15	-0.17	-0.07	-0.05	-0.03	0.06	0.23
25	1	-0.28	-0.02	-0.19	-0.22	-0.07	0.01	-0.10	0.13	0.30
26	1	0.11	-0.06	-0.14	-0.02	-0.02	0.02	-0.06	0.10	0.35
27	1	-0.23	0.02	-0.04	0.23	0.25	0.00	-0.07	-0.01	0.01
28	1	-0.11	-0.20	-0.02	-0.02	-0.04	-0.04	0.01	-0.03	-0.04
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

28				29			30		
A				A			A		
Frequencies	--	718.5100		752.8096		765.4877			
Red. masses	--	4.1027		6.7103		3.3383			
Frc consts	--	1.2479		2.2406		1.1525			
IR Inten	--	23.9028		4.8588		11.4263			

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	-0.01	0.08	-0.04	-0.16	0.02	0.01	-0.04	-0.02
2	6	0.02	0.01	0.01	0.12	0.09	-0.02	-0.02	0.05	0.07
3	6	0.05	-0.06	-0.19	0.06	0.04	0.07	0.04	-0.02	-0.10
4	6	-0.03	0.02	0.11	0.02	-0.04	-0.03	-0.01	0.03	0.11
5	6	-0.03	0.04	0.12	-0.03	-0.09	0.02	0.04	-0.06	-0.17
6	6	-0.02	-0.04	-0.17	-0.17	-0.07	-0.02	-0.03	0.04	0.18
7	6	0.04	0.01	-0.05	0.06	-0.07	0.05	0.00	-0.02	-0.05
8	6	-0.02	0.01	0.06	-0.03	0.01	-0.05	-0.05	0.06	0.19
9	6	0.03	-0.06	-0.18	-0.09	0.00	0.04	0.03	-0.05	-0.12
10	6	-0.02	0.05	0.05	0.02	0.17	-0.07	0.01	0.00	-0.02
11	6	0.06	-0.04	-0.08	0.16	0.04	0.06	-0.01	0.01	0.02
12	6	-0.01	-0.03	-0.08	-0.17	-0.04	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03
13	6	-0.01	0.03	0.06	0.02	0.06	-0.01	0.02	-0.02	-0.12
14	6	0.02	0.03	0.03	0.15	0.06	0.01	-0.01	0.02	0.04
15	6	0.02	0.00	-0.06	-0.02	0.04	0.01	0.03	-0.02	-0.09
16	6	-0.01	-0.01	0.04	-0.06	-0.14	0.02	-0.01	-0.01	0.05
17	7	-0.05	-0.03	0.24	-0.18	0.07	-0.11	0.00	0.01	-0.11
18	8	0.03	-0.02	-0.07	0.07	-0.22	-0.01	-0.01	-0.02	0.02
19	8	0.00	0.06	-0.05	0.08	0.26	0.09	0.01	0.00	0.03
20	1	-0.09	0.05	0.30	-0.03	-0.19	-0.08	-0.07	0.06	0.35
21	1	-0.10	0.13	0.48	0.23	0.10	-0.08	0.00	0.04	0.03
22	1	0.00	0.09	0.35	0.26	-0.27	0.13	0.07	-0.11	-0.31
23	1	-0.09	0.13	0.24	0.03	0.13	-0.15	-0.05	0.09	0.19
24	1	0.04	-0.07	-0.05	0.13	0.03	0.10	-0.10	0.13	0.20
25	1	-0.01	-0.05	-0.12	-0.16	-0.06	-0.04	-0.09	0.10	0.29
26	1	0.01	0.03	0.06	0.18	0.08	-0.05	-0.09	0.10	0.36
27	1	-0.02	0.05	-0.01	-0.17	0.18	-0.14	-0.03	0.06	0.11
28	1	-0.10	0.07	0.33	-0.06	-0.19	-0.11	-0.11	0.10	0.39
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

31				32			33		
A				A			A		
Frequencies	--	788.3463		818.9544		832.5873			
Red. masses	--	6.8318		1.3670		4.6394			
Frc consts	--	2.5016		0.5402		1.8948			
IR Inten	--	6.3961		13.4813		1.4646			

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.08	-0.21	0.08	0.01	-0.01	-0.02	-0.08	0.16	-0.09
2	6	-0.07	0.29	-0.10	-0.01	0.00	0.02	0.02	-0.01	0.02
3	6	0.09	0.09	0.00	0.01	-0.01	-0.03	-0.09	0.05	0.00
4	6	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.03	0.08	-0.09	-0.10	-0.03
5	6	0.00	-0.03	0.05	0.01	-0.01	-0.04	0.04	-0.06	0.02

6	6	0.03	-0.12	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.03	-0.02
7	6	-0.18	-0.15	0.01	0.00	0.00	0.00	0.05	0.07	0.01
8	6	-0.07	-0.03	-0.04	0.02	-0.02	-0.07	-0.12	-0.10	0.05
9	6	-0.05	-0.08	0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.08	0.01	-0.03
10	6	0.00	0.12	-0.04	0.01	-0.02	-0.03	-0.10	0.18	-0.10
11	6	0.01	0.07	-0.03	-0.01	0.00	0.01	0.17	-0.10	0.08
12	6	-0.03	-0.05	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.20	-0.11	0.08
13	6	-0.09	0.04	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.02	-0.09	-0.01
14	6	-0.02	0.10	-0.04	-0.01	0.01	0.06	-0.06	0.05	-0.02
15	6	0.13	0.16	0.00	-0.02	0.01	0.05	0.11	0.11	0.00
16	6	0.03	-0.19	0.06	-0.02	0.02	0.06	0.05	-0.05	0.05
17	7	0.16	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.01
18	8	0.02	0.18	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
19	8	-0.07	-0.18	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01
20	1	0.02	-0.23	0.06	-0.06	0.08	0.30	-0.35	0.11	-0.04
21	1	0.06	0.34	-0.05	0.01	-0.02	-0.05	0.05	-0.05	-0.13
22	1	-0.06	-0.26	0.13	0.01	-0.01	-0.07	0.05	0.07	-0.09
23	1	0.10	0.14	-0.05	-0.05	0.07	0.17	-0.33	0.14	-0.11
24	1	0.01	0.01	-0.06	-0.06	0.06	0.11	0.02	-0.28	0.28
25	1	0.02	0.11	-0.05	-0.06	0.08	0.24	0.12	-0.28	0.25
26	1	-0.05	-0.06	-0.08	0.11	-0.13	-0.43	-0.07	0.00	-0.04
27	1	0.05	0.25	-0.12	0.13	-0.16	-0.52	0.14	0.08	-0.09
28	1	-0.13	-0.27	-0.03	0.11	-0.13	-0.43	0.02	-0.09	-0.04
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			34			35			36	
			A			A			A	
Frequencies	--	856.5311			875.3113			881.1487		
Red. masses	--	2.2254			2.0359			5.3657		
Frc consts	--	0.9619			0.9190			2.4545		
IR Inten	--	0.3408			5.3643			3.6678		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.04	0.07	0.00	-0.01	0.02	0.01	-0.04	0.01
2	6	0.01	-0.01	-0.04	0.02	-0.01	-0.06	0.02	0.04	0.04
3	6	0.01	-0.02	-0.10	-0.01	0.00	0.07	0.03	-0.05	-0.04
4	6	-0.03	0.03	0.15	-0.03	-0.03	-0.09	-0.21	-0.05	0.05
5	6	0.04	-0.04	-0.10	-0.07	0.01	0.05	-0.19	-0.10	-0.07
6	6	-0.01	0.03	0.11	-0.04	0.00	0.02	-0.14	0.00	-0.01
7	6	0.02	-0.01	-0.08	0.02	0.01	-0.04	0.07	0.11	0.00
8	6	0.02	-0.05	-0.11	-0.04	0.04	0.10	-0.08	-0.02	-0.11
9	6	-0.03	0.02	0.07	0.01	0.00	-0.05	-0.02	0.10	0.03
10	6	-0.01	0.01	-0.03	0.03	-0.02	-0.04	0.06	0.02	0.03
11	6	0.00	0.01	0.04	0.04	-0.03	-0.03	0.14	-0.04	0.07
12	6	0.01	0.00	0.04	-0.03	0.02	0.06	-0.01	-0.02	-0.04
13	6	-0.01	0.00	0.03	0.05	-0.02	-0.12	0.04	0.07	0.10
14	6	-0.01	0.00	-0.03	0.05	0.00	0.05	0.24	-0.02	0.03
15	6	0.01	0.02	0.01	-0.03	-0.02	0.01	-0.11	-0.09	-0.01
16	6	0.01	-0.01	-0.01	-0.03	0.05	0.06	-0.05	0.06	-0.09
17	7	0.00	0.00	-0.04	0.04	0.00	-0.02	0.10	0.00	0.01
18	8	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.04	0.01	0.06	0.14	0.03
19	8	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.04	0.00	-0.01	-0.14	-0.03
20	1	0.05	-0.08	-0.36	0.12	-0.12	-0.38	-0.03	0.03	0.27
21	1	-0.14	0.15	0.62	-0.11	0.08	0.32	-0.08	-0.06	-0.20
22	1	-0.05	0.09	0.30	-0.02	0.08	0.31	0.17	0.00	-0.18
23	1	0.00	-0.02	-0.10	-0.13	0.16	0.40	-0.03	-0.14	-0.24
24	1	-0.01	-0.01	0.05	-0.11	0.14	0.27	0.22	0.13	0.00
25	1	0.12	-0.15	-0.41	0.01	-0.02	-0.11	-0.04	-0.03	0.04
26	1	-0.03	0.00	0.04	0.07	0.04	0.04	0.28	0.15	0.05
27	1	0.01	0.02	0.04	0.01	-0.09	-0.30	-0.28	0.10	0.19
28	1	0.02	-0.04	-0.08	0.09	-0.05	-0.28	0.02	0.18	0.17
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			37			38			39	
			A			A			A	
Frequencies	--	915.6293			929.1786			984.0043		

Red. masses	--	1.4826			1.5844			2.4194		
Frc consts	--	0.7323			0.8060			1.3802		
IR Inten	--	7.1561			144.1430			0.4281		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.01	-0.06	-0.02	0.02	0.06	0.03	-0.06	0.06
2	6	0.02	-0.01	-0.07	-0.01	0.02	0.04	-0.01	-0.11	0.02
3	6	-0.03	0.02	0.10	0.02	-0.02	-0.07	-0.03	0.03	-0.03
4	6	0.00	-0.02	-0.03	-0.01	-0.01	0.01	-0.04	0.13	-0.04
5	6	0.00	-0.02	-0.02	0.00	-0.02	-0.02	-0.02	0.05	-0.02
6	6	-0.01	0.01	0.05	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.02	0.00
7	6	0.01	-0.01	-0.06	0.00	0.01	0.04	-0.01	0.00	0.01
8	6	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.04	-0.04	0.11	-0.04
9	6	0.02	-0.01	-0.05	0.03	-0.03	-0.09	-0.03	0.03	0.01
10	6	-0.02	0.03	0.07	-0.02	0.04	0.08	0.02	-0.07	0.03
11	6	-0.01	0.02	0.02	-0.01	0.02	0.03	0.08	-0.05	0.01
12	6	0.01	-0.01	-0.04	-0.02	0.02	0.06	0.07	-0.04	0.03
13	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	-0.08	-0.03	0.01	-0.06
14	6	0.00	0.01	0.04	0.00	0.01	0.04	-0.02	0.05	0.09
15	6	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.02	0.00
16	6	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.02	0.04	0.02	-0.13	-0.06
17	7	0.00	0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00
18	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
19	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00
20	1	-0.04	0.06	0.18	0.08	-0.09	-0.34	-0.01	-0.16	-0.18
21	1	-0.09	0.10	0.37	0.04	-0.04	-0.18	0.01	-0.10	0.05
22	1	-0.06	0.10	0.42	0.06	-0.07	-0.29	-0.14	0.11	-0.14
23	1	0.11	-0.17	-0.39	0.10	-0.18	-0.40	-0.06	-0.14	-0.05
24	1	0.18	-0.12	-0.32	0.23	-0.14	-0.40	-0.03	0.15	0.27
25	1	-0.09	0.09	0.36	0.07	-0.09	-0.30	0.10	0.09	0.03
26	1	0.06	-0.06	-0.22	0.04	-0.02	-0.11	0.11	-0.16	-0.49
27	1	0.02	-0.03	-0.10	0.07	-0.10	-0.34	-0.09	0.11	-0.14
28	1	-0.04	0.05	0.15	0.02	-0.03	-0.10	-0.14	0.04	0.52
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			40			41			42	
			A			A			A	
Frequencies	--	989.4789			1030.4517			1039.4278		
Red. masses	--	1.9780			1.3500			1.3130		
Frc consts	--	1.1410			0.8446			0.8358		
IR Inten	--	1.2352			0.6389			2.6844		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	0.06	0.01	0.01	-0.01	-0.05	0.00	0.00	-0.01
2	6	0.00	0.08	-0.01	-0.02	0.02	0.09	0.01	0.00	-0.05
3	6	0.03	-0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01
4	6	0.03	-0.09	0.04	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01
5	6	0.01	-0.03	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00
6	6	-0.03	-0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.01
7	6	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.02	-0.10	-0.01	0.00	0.05
8	6	0.03	-0.08	0.03	0.01	0.00	0.01	0.02	-0.02	0.01
9	6	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00
10	6	-0.01	0.04	-0.06	-0.01	0.01	0.02	-0.04	0.03	0.07
11	6	-0.05	0.02	-0.03	0.01	-0.01	-0.02	0.03	-0.02	-0.07
12	6	-0.05	0.03	-0.02	-0.02	0.02	0.06	-0.02	0.01	-0.02
13	6	0.04	-0.03	-0.03	0.01	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.02
14	6	-0.03	0.01	0.11	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.04
15	6	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.03	0.00	0.01	0.04
16	6	0.03	0.05	-0.13	0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.02	-0.01
17	7	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.00
18	8	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
20	1	0.10	0.02	-0.23	-0.05	0.08	0.27	0.04	0.03	0.04
21	1	-0.01	0.07	-0.04	0.10	-0.12	-0.46	-0.06	0.07	0.23
22	1	0.12	-0.12	-0.03	-0.07	0.11	0.57	0.06	-0.09	-0.26
23	1	0.03	0.15	0.13	0.04	-0.07	-0.15	0.10	-0.20	-0.46

24	1	-0.15	0.01	0.11	-0.11	0.09	0.20	-0.31	0.26	0.56
25	1	-0.09	-0.06	0.03	0.08	-0.10	-0.36	-0.03	0.01	0.02
26	1	0.13	-0.15	-0.56	-0.02	0.01	0.03	-0.06	0.06	0.17
27	1	0.09	-0.11	0.03	0.06	-0.07	-0.19	0.10	-0.10	-0.17
28	1	-0.12	0.26	0.52	-0.04	0.04	0.13	-0.02	0.02	0.01
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			43			44			45	
			A			A			A	
Frequencies	--	1046.5168			1056.7183			1060.7321		
Red. masses	--	1.3962			1.4533			5.9058		
Frc consts	--	0.9009			0.9562			3.9150		
IR Inten	--	0.8441			0.8084			1.7087		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.02	-0.08	-0.02	0.02	0.06	0.03	-0.02	0.03
2	6	0.01	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.12	-0.02
3	6	-0.01	0.01	0.03	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	0.04	-0.02
4	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.14	-0.10	0.00
5	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.10	0.12	-0.01
6	6	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.29	0.01	0.04
7	6	-0.01	0.01	0.05	0.01	0.00	-0.02	-0.07	-0.09	-0.01
8	6	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.22	-0.13	-0.01
9	6	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.03	-0.03	0.00
10	6	0.02	-0.02	-0.04	0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.07	0.03
11	6	-0.01	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.01	0.03	0.01	0.00
12	6	-0.01	0.02	0.08	0.02	-0.02	-0.08	0.05	-0.01	0.00
13	6	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.03	-0.08	0.01	-0.01
14	6	0.02	-0.01	-0.02	0.01	-0.02	-0.09	0.26	-0.10	0.07
15	6	-0.02	0.02	0.07	-0.03	0.03	0.10	0.03	0.05	0.02
16	6	0.01	-0.02	-0.05	0.02	-0.03	-0.05	-0.09	0.20	-0.10
17	7	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.05	0.00
18	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.09	-0.03
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.04	0.12	0.02
20	1	-0.12	0.11	0.43	0.08	-0.09	-0.34	-0.07	-0.09	-0.10
21	1	-0.06	0.08	0.30	0.02	-0.05	-0.14	0.24	0.17	-0.09
22	1	0.03	-0.05	-0.28	0.00	0.02	0.12	-0.24	0.10	0.05
23	1	-0.04	0.10	0.22	-0.02	0.06	0.11	0.01	-0.09	0.02
24	1	0.11	-0.09	-0.20	0.05	-0.04	-0.09	-0.01	-0.06	0.06
25	1	0.10	-0.11	-0.39	-0.10	0.10	0.40	0.07	0.16	0.08
26	1	-0.03	0.04	0.15	-0.11	0.14	0.40	0.18	-0.29	0.24
27	1	0.07	-0.09	-0.38	0.11	-0.15	-0.51	0.01	0.09	-0.16
28	1	-0.06	0.09	0.28	-0.05	0.08	0.29	-0.27	0.19	-0.06
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			46			47			48	
			A			A			A	
Frequencies	--	1116.5636			1144.5601			1157.5391		
Red. masses	--	2.3795			2.5383			3.4963		
Frc consts	--	1.7478			1.9591			2.7601		
IR Inten	--	7.9657			0.6058			286.4215		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.03	0.01	-0.07	0.08	-0.04	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.03	0.07	-0.02	-0.03	0.03	-0.01	-0.10	0.02	-0.03
3	6	-0.01	-0.02	0.00	0.03	-0.06	0.02	-0.01	-0.03	0.01
4	6	-0.06	-0.06	0.00	0.10	-0.09	0.05	-0.01	0.08	-0.03
5	6	0.00	0.02	0.00	0.05	-0.07	0.05	-0.05	-0.04	-0.01
6	6	0.12	-0.03	0.02	-0.01	-0.04	0.00	-0.02	-0.09	0.03
7	6	0.01	0.00	0.00	0.04	0.02	0.00	0.10	0.07	0.01
8	6	-0.05	-0.03	0.00	-0.10	0.12	-0.06	0.06	0.04	0.00
9	6	0.03	0.05	-0.01	-0.03	0.06	-0.04	0.01	-0.02	0.01
10	6	0.01	-0.02	0.01	0.06	-0.07	0.06	0.01	0.05	-0.02
11	6	-0.02	0.00	-0.01	-0.07	0.06	-0.07	0.00	0.00	0.03
12	6	0.01	0.00	0.00	0.09	-0.07	0.04	0.01	0.02	-0.01
13	6	0.04	0.05	0.00	-0.07	0.04	-0.03	0.01	-0.03	0.01
14	6	-0.05	0.13	-0.05	0.04	-0.02	0.01	-0.01	-0.04	0.01

15	6	-0.10	-0.11	0.00	-0.01	0.02	-0.01	0.03	0.03	0.00
16	6	0.12	-0.06	0.05	-0.01	-0.03	0.01	-0.04	-0.01	-0.01
17	7	0.04	-0.05	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.23	-0.18	-0.01
18	8	-0.04	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.03	-0.02
19	8	-0.03	0.07	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.18	0.02
20	1	-0.03	-0.04	0.00	-0.34	0.01	-0.08	0.08	0.02	0.01
21	1	-0.05	0.07	-0.04	-0.29	-0.04	-0.06	-0.67	-0.15	-0.12
22	1	0.01	0.01	0.01	0.21	-0.14	0.08	0.29	-0.10	0.05
23	1	-0.05	-0.04	0.00	0.35	-0.04	0.01	0.04	0.09	0.03
24	1	-0.03	0.00	0.00	-0.07	0.40	0.02	0.07	-0.18	-0.13
25	1	0.00	-0.05	0.01	0.04	-0.28	0.09	0.02	0.07	-0.01
26	1	0.08	0.60	-0.16	-0.02	-0.22	0.06	-0.05	-0.17	0.04
27	1	-0.14	-0.10	0.00	-0.24	0.26	-0.13	0.08	-0.01	0.02
28	1	0.65	0.08	0.13	0.09	-0.01	0.01	-0.31	-0.08	-0.05
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

49

50

51

		A			A			A		
Frequencies	--	1188.5370			1207.5279			1212.4899		
Red. masses	--	1.5140			1.3238			3.6631		
Frc consts	--	1.2601			1.1373			3.1729		
IR Inten	--	5.6393			14.3264			444.1194		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.05	0.01	0.04	0.04	0.00	0.03	0.00	0.01
2	6	0.00	-0.04	0.01	0.03	0.00	0.01	-0.04	0.04	-0.02
3	6	-0.04	0.05	-0.02	0.03	-0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.01
4	6	-0.01	0.01	-0.01	-0.03	0.03	-0.01	-0.06	0.04	-0.02
5	6	0.04	-0.07	0.02	0.00	-0.02	0.00	-0.08	-0.17	0.05
6	6	-0.03	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.27	-0.18	0.07
7	6	0.01	0.03	-0.01	-0.04	0.02	-0.01	0.07	0.10	-0.02
8	6	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01	0.03	0.03	0.00
9	6	0.06	-0.04	0.02	0.03	0.00	0.00	0.06	0.01	0.02
10	6	0.02	0.07	0.00	0.02	0.04	0.00	0.00	0.07	-0.03
11	6	-0.07	-0.03	-0.01	-0.03	-0.03	0.00	-0.02	-0.01	-0.02
12	6	0.04	0.01	0.01	-0.05	-0.03	-0.01	-0.02	0.00	-0.01
13	6	-0.03	0.04	-0.02	0.01	-0.04	0.01	0.01	-0.02	0.01
14	6	0.03	0.01	0.01	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00
15	6	-0.03	-0.02	0.00	-0.04	0.05	-0.02	0.01	-0.01	0.01
16	6	0.01	0.03	0.00	0.04	-0.01	0.01	-0.03	-0.02	0.00
17	7	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.18	0.10	-0.02
18	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.01
19	8	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.03	-0.04	-0.01
20	1	-0.37	-0.16	-0.04	0.44	0.17	0.06	0.19	0.05	0.03
21	1	0.03	-0.04	0.01	0.14	0.03	0.02	-0.45	-0.07	-0.10
22	1	-0.06	0.10	-0.03	-0.20	0.18	-0.08	-0.22	0.41	-0.09
23	1	0.51	0.19	0.00	0.25	0.09	0.00	-0.02	0.07	-0.05
24	1	-0.25	-0.44	0.16	-0.13	-0.27	0.08	-0.02	0.31	0.05
25	1	0.16	0.40	-0.07	-0.16	-0.38	0.07	-0.02	0.01	-0.01
26	1	0.05	0.06	-0.01	-0.04	-0.17	0.04	0.02	0.09	-0.02
27	1	-0.05	-0.01	-0.01	-0.32	0.33	-0.17	0.11	-0.11	0.06
28	1	0.04	0.03	-0.01	0.17	0.02	0.03	-0.35	-0.12	-0.05
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

52

53

54

		A			A			A		
Frequencies	--	1229.3019			1242.2953			1267.8889		
Red. masses	--	1.4439			1.4332			2.0721		
Frc consts	--	1.2856			1.3032			1.9626		
IR Inten	--	55.9815			22.3242			20.8601		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.02	-0.01	0.02	0.00	0.01	0.02	-0.07	0.02
2	6	0.04	-0.02	0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.00	0.03	-0.01
3	6	0.08	0.02	0.01	-0.04	-0.04	0.00	-0.14	-0.02	-0.03
4	6	0.02	-0.02	0.01	-0.05	0.05	-0.02	-0.02	-0.02	0.00
5	6	-0.02	-0.06	0.02	0.05	0.07	-0.02	-0.02	-0.02	0.01

6	6	-0.03	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.05	0.01
7	6	-0.04	0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.03	0.05	-0.01
8	6	-0.05	0.05	-0.03	-0.06	0.05	-0.03	0.08	-0.01	0.02
9	6	-0.04	-0.01	-0.01	-0.03	-0.03	-0.01	-0.11	-0.06	-0.01
10	6	0.02	-0.01	0.01	0.02	-0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.00
11	6	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.03	0.00	0.01
12	6	-0.01	-0.02	0.00	0.02	-0.02	0.01	0.05	0.00	0.01
13	6	0.02	0.04	-0.01	0.02	0.05	-0.01	0.07	0.16	-0.03
14	6	0.00	0.03	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.06	0.00	-0.01
15	6	0.03	-0.03	0.02	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00
16	6	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.01
17	7	0.06	-0.03	0.00	-0.05	0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.01
18	8	-0.02	-0.01	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
19	8	-0.02	0.03	0.00	0.02	-0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00
20	1	-0.05	0.01	-0.01	0.29	0.07	0.05	0.08	-0.07	0.03
21	1	0.24	0.03	0.04	-0.19	-0.03	-0.03	0.30	0.13	0.03
22	1	-0.38	0.34	-0.14	0.35	-0.35	0.13	-0.02	0.10	-0.04
23	1	0.21	0.05	0.03	0.31	0.06	0.05	0.21	0.05	0.03
24	1	0.02	0.10	-0.04	-0.11	-0.35	0.11	0.10	0.18	-0.04
25	1	-0.09	-0.31	0.07	-0.07	-0.33	0.07	0.03	-0.12	0.04
26	1	0.06	0.23	-0.05	0.04	0.15	-0.03	-0.25	-0.62	0.12
27	1	0.37	-0.37	0.20	0.27	-0.27	0.15	0.10	-0.11	0.06
28	1	-0.25	-0.06	-0.04	-0.14	-0.03	-0.03	0.39	0.15	0.05
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			55			56			57	
			A			A			A	
Frequencies	--	1285.6565			1294.0257			1358.9582		
Red. masses	--	1.9215			1.6639			3.0303		
Frc consts	--	1.8713			1.6416			3.2972		
IR Inten	--	30.5242			35.1925			18.0473		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.06	-0.03	0.02
2	6	0.00	-0.03	0.01	0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.09	0.02
3	6	0.14	0.06	0.02	0.10	0.02	0.02	-0.04	0.15	-0.05
4	6	0.02	0.07	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.11	-0.03
5	6	-0.04	0.03	-0.02	-0.03	0.05	-0.02	0.16	-0.13	0.08
6	6	0.02	-0.02	0.01	0.02	0.01	0.00	-0.08	0.02	-0.02
7	6	-0.01	-0.03	0.00	-0.02	-0.03	0.00	0.01	0.02	0.00
8	6	-0.01	-0.07	0.02	0.02	-0.02	0.01	-0.08	-0.09	0.01
9	6	-0.15	-0.06	-0.02	0.11	-0.01	0.03	0.06	-0.12	0.06
10	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.03	-0.01	-0.06	0.02	-0.03
11	6	0.05	-0.03	0.03	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.05	-0.03
12	6	-0.05	0.03	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.01
13	6	0.02	-0.05	0.02	0.02	0.14	-0.03	-0.08	0.05	-0.03
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.01	0.05	0.03	0.00
15	6	0.03	0.04	0.00	-0.05	-0.04	0.00	-0.03	-0.02	0.00
16	6	-0.01	0.04	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.02	0.06	-0.02
17	7	-0.02	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.05	0.04	0.02
18	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	-0.01
19	8	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
20	1	-0.25	-0.04	-0.05	-0.43	-0.13	-0.07	0.34	0.04	0.07
21	1	-0.55	-0.21	-0.07	-0.29	-0.11	-0.04	-0.24	-0.17	-0.01
22	1	-0.11	0.05	-0.02	-0.08	0.01	-0.01	0.14	-0.10	0.04
23	1	0.35	0.07	0.05	-0.35	-0.06	-0.06	-0.32	-0.04	-0.07
24	1	0.08	0.03	0.00	-0.09	-0.26	0.06	0.10	0.49	-0.12
25	1	-0.07	-0.01	-0.01	-0.12	-0.43	0.09	-0.08	-0.34	0.08
26	1	0.00	-0.01	0.00	-0.16	-0.40	0.08	0.07	0.07	0.00
27	1	0.08	0.00	0.02	-0.06	-0.04	0.00	-0.03	-0.03	0.00
28	1	0.54	0.21	0.07	-0.16	-0.06	-0.02	0.22	0.12	0.02
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			58			59			60	
			A			A			A	
Frequencies	--	1391.5097			1402.9266			1426.1621		

Red. masses	--	5.6140		5.7860		6.2945				
Frc consts	--	6.4046		6.7096		7.5431				
IR Inten	--	162.7123		53.0010		39.2598				
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z			
1	6	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.06	-0.07	0.00
2	6	-0.13	-0.03	-0.02	0.11	0.04	0.01	-0.13	-0.03	-0.02
3	6	0.01	0.12	-0.03	0.02	-0.13	0.04	-0.03	-0.01	0.00
4	6	0.01	-0.09	0.03	-0.20	0.00	-0.05	0.34	0.11	0.04
5	6	-0.18	-0.09	-0.01	0.12	-0.02	0.04	-0.20	0.06	-0.06
6	6	0.11	0.25	-0.05	-0.01	-0.02	0.00	0.04	0.01	0.00
7	6	0.08	-0.11	0.04	-0.08	0.01	-0.02	0.08	0.00	0.01
8	6	0.07	-0.03	0.03	-0.03	0.15	-0.05	-0.25	-0.10	-0.03
9	6	0.03	0.15	-0.04	-0.03	-0.09	0.03	-0.04	-0.11	0.03
10	6	0.01	0.04	-0.01	-0.06	0.00	-0.02	0.10	0.13	-0.02
11	6	-0.03	-0.10	0.02	0.00	-0.02	0.00	-0.07	-0.19	0.05
12	6	0.00	0.02	0.00	-0.05	0.04	-0.02	0.06	0.10	-0.01
13	6	-0.03	-0.02	0.00	0.23	0.01	0.05	0.11	0.07	0.01
14	6	0.00	0.10	-0.03	-0.09	-0.17	0.03	-0.02	-0.14	0.03
15	6	0.05	-0.07	0.03	-0.09	0.10	-0.05	-0.11	0.05	-0.04
16	6	-0.10	-0.05	-0.01	0.16	0.02	0.04	0.20	0.08	0.03
17	7	0.14	0.23	0.07	0.15	0.24	0.06	-0.02	0.00	0.00
18	8	-0.14	-0.15	-0.05	-0.12	-0.14	-0.04	0.00	0.01	0.00
19	8	0.01	-0.05	-0.01	0.00	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00
20	1	0.25	0.04	0.05	-0.42	-0.11	-0.07	0.00	-0.07	0.02
21	1	0.10	0.04	0.02	-0.08	-0.01	-0.01	0.35	0.12	0.04
22	1	0.23	-0.25	0.12	0.07	-0.14	0.02	0.12	-0.02	0.04
23	1	0.47	0.18	0.05	0.08	0.05	0.01	-0.18	0.04	-0.10
24	1	-0.01	0.06	0.03	0.11	0.37	-0.07	0.09	0.26	-0.10
25	1	-0.04	-0.16	0.04	0.03	0.32	-0.08	0.00	-0.17	0.05
26	1	-0.12	-0.29	0.05	-0.03	0.04	-0.02	0.07	0.18	-0.04
27	1	-0.02	0.00	-0.01	-0.04	0.04	-0.02	-0.12	0.05	-0.04
28	1	-0.06	-0.04	0.00	-0.28	-0.12	-0.03	-0.37	-0.09	-0.07
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			61			62			63	
			A			A			A	
Frequencies	--	1435.1761		1453.0794		1464.3610				
Red. masses	--	2.8784		3.6778		2.2494				
Frc consts	--	3.4931		4.5752		2.8419				
IR Inten	--	164.3280		3.6039		21.6344				
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.10	0.00	-0.02	-0.03	-0.01	0.00	-0.07	0.00	-0.02
2	6	0.05	0.07	0.00	0.05	0.01	0.01	-0.01	-0.04	0.01
3	6	-0.03	-0.10	0.02	0.04	-0.19	0.06	0.08	0.01	0.02
4	6	0.09	0.08	0.00	-0.04	0.21	-0.07	-0.03	0.04	-0.02
5	6	0.00	0.06	-0.03	0.08	0.02	0.01	0.03	-0.08	0.04
6	6	-0.09	-0.14	0.01	0.00	-0.07	0.02	0.04	0.07	-0.01
7	6	0.05	-0.01	0.01	-0.10	0.10	-0.04	-0.05	0.01	-0.01
8	6	-0.04	-0.06	0.01	-0.01	-0.17	0.05	-0.11	0.01	-0.03
9	6	-0.01	0.02	-0.01	0.03	0.13	-0.03	0.04	0.03	0.00
10	6	0.10	0.00	0.04	0.00	0.04	-0.02	0.07	0.02	0.01
11	6	-0.01	0.04	-0.02	-0.06	-0.13	0.03	-0.05	0.01	-0.02
12	6	0.06	-0.03	0.02	0.03	0.09	-0.02	-0.02	-0.01	0.00
13	6	-0.05	0.01	-0.01	-0.04	-0.04	0.00	0.13	-0.07	0.05
14	6	0.04	0.06	-0.01	0.02	0.11	-0.03	0.03	0.06	-0.01
15	6	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.09	0.04	-0.09	0.07	-0.04
16	6	-0.06	-0.02	-0.01	-0.07	-0.02	-0.01	-0.03	-0.06	0.01
17	7	0.08	0.17	0.03	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.06	-0.01
18	8	-0.06	-0.08	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.01
19	8	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
20	1	0.28	0.11	0.04	-0.32	-0.10	-0.05	0.17	0.07	0.02
21	1	-0.15	0.02	-0.04	0.32	0.08	0.05	0.11	-0.01	0.03
22	1	-0.29	0.34	-0.14	0.18	-0.18	0.06	0.13	-0.17	0.07
23	1	-0.38	-0.16	-0.06	0.31	0.14	0.02	-0.19	-0.06	-0.04



24	1	-0.17	-0.37	0.10	0.14	0.44	-0.11	-0.08	-0.02	0.00
25	1	0.13	0.18	-0.02	-0.06	-0.24	0.05	0.08	0.33	-0.07
26	1	-0.01	-0.14	0.04	-0.06	-0.14	0.03	-0.14	-0.53	0.12
27	1	0.14	-0.14	0.08	-0.10	0.06	-0.04	0.31	-0.34	0.18
28	1	0.18	0.05	0.03	-0.13	-0.03	-0.02	0.23	0.00	0.06
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
		64			65			66		
		A			A			A		
Frequencies	--	1474.8711			1494.2056			1512.9620		
Red. masses	--	2.0265			3.8276			5.1085		
Frc consts	--	2.5972			5.0350			6.8897		
IR Inten	--	5.0337			3.5677			12.8842		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	0.04	0.00	0.11	-0.08	0.05	0.22	0.09	0.03
2	6	-0.08	-0.02	-0.01	-0.07	-0.04	0.00	0.09	-0.04	0.03
3	6	0.03	-0.08	0.03	-0.07	0.10	-0.04	-0.12	0.11	-0.06
4	6	0.01	0.04	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.04	-0.12	0.04
5	6	-0.08	-0.05	0.00	0.09	-0.08	0.04	0.01	0.10	-0.03
6	6	0.06	-0.01	0.01	-0.04	-0.05	0.00	0.00	-0.09	0.02
7	6	-0.01	0.07	-0.02	0.05	0.03	0.00	-0.10	0.09	-0.04
8	6	0.04	0.08	-0.01	-0.06	-0.08	0.01	0.10	-0.07	0.04
9	6	0.03	-0.11	0.04	-0.13	0.14	-0.08	-0.06	0.13	-0.06
10	6	0.01	0.02	0.00	0.13	-0.07	0.07	0.18	0.09	0.03
11	6	0.03	0.05	-0.01	-0.01	0.15	-0.07	-0.12	-0.16	0.01
12	6	0.00	0.03	-0.01	-0.02	0.19	-0.06	-0.11	-0.10	0.00
13	6	-0.09	-0.04	-0.01	0.15	-0.08	0.06	-0.09	0.02	-0.03
14	6	0.03	-0.04	0.02	-0.07	-0.04	-0.01	0.07	-0.06	0.03
15	6	0.01	0.06	-0.01	0.07	-0.01	0.02	-0.11	0.15	-0.07
16	6	-0.07	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.10	0.03
17	7	0.02	0.04	0.01	0.00	0.02	0.00	0.04	0.02	0.01
18	8	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
20	1	-0.33	-0.08	-0.06	-0.32	-0.22	-0.02	-0.28	-0.05	-0.06
21	1	0.45	0.14	0.07	0.11	0.02	0.02	-0.16	-0.13	0.00
22	1	0.23	-0.16	0.08	0.04	0.06	-0.01	0.17	-0.18	0.05
23	1	-0.26	-0.06	-0.04	-0.23	-0.20	0.00	-0.17	-0.03	-0.08
24	1	-0.07	-0.23	0.07	-0.22	-0.39	0.12	-0.02	0.21	-0.06
25	1	-0.08	-0.24	0.05	-0.19	-0.38	0.06	-0.10	-0.01	-0.02
26	1	0.10	0.18	-0.03	-0.05	0.06	-0.03	0.12	0.04	0.02
27	1	0.14	-0.05	0.05	-0.11	0.17	-0.08	0.38	-0.35	0.20
28	1	0.42	0.14	0.06	-0.16	-0.05	-0.03	0.08	-0.09	0.05
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
		67			68			69		
		A			A			A		
Frequencies	--	1537.5245			1575.8323			1625.3592		
Red. masses	--	3.2054			4.3808			6.6078		
Frc consts	--	4.4646			6.4094			10.2850		
IR Inten	--	11.7365			17.7191			32.4451		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	-0.03	0.02	-0.07	-0.06	0.00	0.03	0.02	0.00
2	6	-0.04	0.08	-0.03	0.16	0.09	0.01	-0.16	-0.06	-0.02
3	6	-0.09	-0.06	-0.01	-0.07	-0.09	0.01	0.08	0.12	-0.02
4	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.06	0.03	-0.02	-0.05	-0.15	0.03
5	6	0.07	0.06	-0.01	0.00	-0.10	0.03	0.13	0.22	-0.04
6	6	-0.08	0.04	-0.02	0.04	0.21	-0.04	-0.08	-0.18	0.03
7	6	0.16	-0.14	0.06	-0.03	-0.12	0.02	0.07	0.05	0.00
8	6	-0.03	0.05	-0.02	0.05	0.03	0.00	-0.11	0.18	-0.08
9	6	0.13	0.03	0.03	-0.04	-0.03	0.00	0.10	-0.11	0.06
10	6	-0.09	0.00	-0.03	0.20	0.11	0.02	0.10	0.11	-0.01
11	6	-0.01	-0.05	0.02	-0.12	-0.10	-0.01	-0.11	-0.19	0.04
12	6	0.02	0.14	-0.03	0.07	0.06	0.00	-0.06	-0.04	0.00
13	6	-0.03	-0.13	0.03	0.02	0.08	-0.02	0.16	-0.02	0.05
14	6	0.06	-0.01	0.02	-0.07	-0.14	0.02	-0.09	0.05	-0.04



6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.01	-0.04	0.02	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.03	-0.01
11	6	-0.06	0.01	-0.04	0.02	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.01
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.06	0.01	-0.02
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.06	-0.02	0.00	-0.01	0.00
17	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.10	-0.03	-0.13	0.52	-0.17
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.04	0.01
22	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
23	1	-0.11	0.49	-0.25	-0.06	0.31	-0.16	0.06	-0.28	0.14
24	1	0.69	-0.12	0.43	-0.22	0.04	-0.14	0.18	-0.03	0.11
25	1	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.03	0.04	0.65	-0.15	0.20
26	1	0.00	0.00	0.00	-0.34	0.08	-0.10	-0.16	0.04	-0.05
27	1	0.00	0.00	0.00	0.27	0.26	-0.01	0.02	0.02	0.00
28	1	0.01	-0.03	0.01	0.15	-0.64	0.24	-0.02	0.09	-0.03
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			76			77			78	
			A			A			A	
Frequencies	--	3212.3648			3216.8618			3227.7127		
Red. masses	--	1.0932			1.0926			1.0919		
Frc consts	--	6.6468			6.6618			6.7021		
IR Inten	--	0.5019			2.6558			1.3035		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.08	0.02
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.01	-0.05	0.03	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.03	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.02	0.00	-0.01	-0.07	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
15	6	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.01	-0.03	0.01	-0.01	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00
17	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.05	0.21	-0.07	-0.03	0.14	-0.05	0.03	-0.13	0.04
21	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.22	0.85	-0.27
22	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.21	-0.21	0.02
23	1	-0.12	0.59	-0.30	0.02	-0.08	0.04	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.37	0.06	-0.23	0.03	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
25	1	0.24	-0.06	0.07	0.10	-0.03	0.03	0.17	-0.04	0.05
26	1	0.20	-0.04	0.06	0.77	-0.18	0.24	0.00	0.00	0.00
27	1	-0.16	-0.16	0.01	-0.10	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	-0.08	0.34	-0.13	0.11	-0.46	0.17	0.00	0.00	0.00
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			79			80			81	
			A			A			A	
Frequencies	--	3233.0071			3243.6078			3256.2867		



**Table S27.** Cartesian coordinates of optimized structure for (12-C<sub>6</sub>)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	0.156337	2.645733	0.767128
2	6	0	2.553310	2.418813	0.149311
3	6	0	1.296182	1.832238	0.423398
4	6	0	1.153905	0.404589	0.369842
5	6	0	2.286939	-0.436165	0.072176
6	6	0	3.520815	0.220015	-0.196962
7	6	0	3.653487	1.619586	-0.169369
8	6	0	-0.129735	-0.181483	0.631145
9	6	0	-0.286083	-1.612503	0.621228
10	6	0	0.855588	-2.425503	0.308365
11	6	0	2.086717	-1.870752	0.041574
12	6	0	-1.073891	2.082722	1.016549
13	6	0	-1.255311	0.656919	0.935357
14	6	0	-2.535327	0.043309	1.201805
15	6	0	-2.648285	-1.392226	1.231183
16	6	0	-1.545798	-2.195277	0.929484
17	7	0	4.767781	-0.523086	-0.523617
18	8	0	5.661933	0.103950	-1.183867
19	8	0	4.898811	-1.729294	-0.119320
20	1	0	0.289398	3.722313	0.832427
21	1	0	2.665153	3.498387	0.190861
22	1	0	4.618610	2.058517	-0.394221
23	1	0	0.737995	-3.505450	0.291307
24	1	0	2.929696	-2.512132	-0.174506
25	1	0	-1.920970	2.709358	1.284811
26	1	0	-3.305255	0.645101	1.687986
27	1	0	-3.583870	-1.844610	1.550054
28	1	0	-1.638787	-3.277042	0.954648
29	47	0	-3.557138	0.091699	-0.896294

**Table S28.** Vibrational frequencies for (12-C<sub>6</sub>)

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	31.2149			38.3803			47.0571		
Red. masses	--	17.2523			9.9801			12.2305		
Frc consts	--	0.0099			0.0087			0.0160		
IR Inten	--	0.6907			0.4926			0.1514		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.10	0.01	-0.13	0.11	0.10	0.12	-0.09	-0.04	-0.14
2	6	0.12	0.00	-0.03	0.11	0.02	0.15	-0.09	-0.02	-0.13
3	6	0.10	0.01	-0.09	0.08	0.06	0.11	-0.07	-0.04	-0.11
4	6	0.10	0.01	-0.11	0.02	0.07	0.04	-0.03	-0.04	-0.04
5	6	0.11	0.01	-0.06	-0.02	0.03	-0.01	-0.01	-0.04	-0.02
6	6	0.13	0.00	0.04	0.01	-0.01	0.02	-0.02	-0.02	-0.03
7	6	0.14	0.00	0.05	0.07	-0.02	0.11	-0.06	-0.01	-0.07
8	6	0.08	0.02	-0.15	-0.01	0.12	0.02	-0.02	-0.05	0.00
9	6	0.08	0.02	-0.17	-0.07	0.12	-0.03	0.00	-0.06	0.09
10	6	0.07	0.01	-0.18	-0.11	0.08	-0.07	0.01	-0.05	0.12
11	6	0.09	0.01	-0.12	-0.09	0.04	-0.07	0.00	-0.04	0.07
12	6	0.09	0.02	-0.14	0.08	0.15	0.08	-0.07	-0.05	-0.10
13	6	0.09	0.02	-0.13	0.02	0.16	0.04	-0.04	-0.06	-0.03
14	6	0.10	0.02	-0.09	0.00	0.20	0.02	-0.03	-0.07	0.02
15	6	0.10	0.02	-0.10	-0.06	0.21	0.00	0.00	-0.07	0.09
16	6	0.08	0.02	-0.17	-0.09	0.17	-0.03	0.01	-0.06	0.13
17	7	0.17	-0.01	0.18	-0.02	-0.04	-0.06	0.04	0.04	0.00
18	8	0.26	-0.01	0.32	0.06	0.03	0.11	0.24	0.24	0.47
19	8	0.10	-0.03	0.16	-0.13	-0.13	-0.31	-0.11	-0.13	-0.45
20	1	0.10	0.01	-0.14	0.16	0.09	0.16	-0.10	-0.04	-0.20
21	1	0.12	0.00	-0.02	0.16	0.01	0.21	-0.11	-0.02	-0.17
22	1	0.16	-0.01	0.13	0.10	-0.05	0.14	-0.07	0.01	-0.06
23	1	0.06	0.02	-0.22	-0.16	0.09	-0.11	0.03	-0.05	0.18
24	1	0.09	0.00	-0.11	-0.12	0.01	-0.11	0.00	-0.04	0.08
25	1	0.09	0.02	-0.16	0.10	0.17	0.08	-0.08	-0.06	-0.12
26	1	0.14	0.01	-0.02	0.01	0.24	-0.02	-0.02	-0.06	0.01
27	1	0.11	0.01	-0.05	-0.06	0.24	0.03	0.00	-0.07	0.10
28	1	0.07	0.02	-0.19	-0.13	0.17	-0.04	0.03	-0.06	0.19
29	47	-0.26	-0.01	0.09	0.00	-0.15	-0.02	0.04	0.06	0.01
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	63.2367			114.7997			141.1443		
Red. masses	--	9.9425			5.2642			5.8817		
Frc consts	--	0.0234			0.0409			0.0690		
IR Inten	--	1.3244			3.7634			0.5098		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	-0.02	0.04	-0.06	0.01	-0.20	0.03	-0.02	0.13
2	6	0.07	-0.02	0.14	0.04	-0.01	0.22	0.02	0.00	0.05
3	6	0.07	-0.02	0.11	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.05
4	6	0.08	-0.02	0.13	-0.02	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.03
5	6	0.09	-0.02	0.16	-0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.01	-0.14
6	6	0.07	-0.01	0.07	0.01	0.00	0.11	-0.01	0.01	-0.09
7	6	0.06	-0.01	0.10	0.06	-0.01	0.29	0.01	0.01	-0.02
8	6	0.07	-0.02	0.09	-0.02	0.00	-0.09	0.02	-0.01	0.03
9	6	0.08	-0.02	0.15	0.00	0.00	-0.02	0.05	-0.01	0.13
10	6	0.11	-0.03	0.29	-0.01	0.00	-0.07	0.01	0.00	-0.05
11	6	0.11	-0.03	0.28	-0.02	0.01	-0.09	-0.03	0.02	-0.23
12	6	0.03	-0.02	-0.05	-0.08	0.01	-0.27	0.02	-0.02	0.08
13	6	0.04	-0.02	-0.03	-0.04	0.00	-0.13	0.01	-0.02	0.03
14	6	0.01	-0.01	-0.12	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	-0.02	0.02

15	6	0.02	-0.01	-0.06	0.03	-0.02	0.12	0.08	-0.02	0.25
16	6	0.06	-0.02	0.08	0.03	-0.01	0.10	0.10	-0.02	0.34
17	7	0.03	0.01	-0.13	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
18	8	-0.06	0.07	-0.21	-0.09	0.01	-0.09	0.05	-0.03	0.03
19	8	0.09	-0.02	-0.26	0.01	-0.01	-0.04	-0.03	0.02	0.07
20	1	0.04	-0.02	0.03	-0.08	0.01	-0.25	0.05	-0.03	0.21
21	1	0.07	-0.02	0.15	0.06	-0.02	0.31	0.03	0.00	0.12
22	1	0.05	0.00	0.05	0.10	-0.01	0.43	0.02	0.01	0.02
23	1	0.13	-0.03	0.38	-0.01	0.00	-0.08	0.02	0.00	-0.06
24	1	0.13	-0.03	0.37	-0.02	0.01	-0.12	-0.07	0.02	-0.40
25	1	0.01	-0.01	-0.13	-0.11	0.02	-0.39	0.03	-0.03	0.10
26	1	-0.01	0.00	-0.16	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.05
27	1	0.00	-0.01	-0.12	0.06	-0.01	0.21	0.10	-0.01	0.31
28	1	0.06	-0.02	0.12	0.05	-0.01	0.18	0.15	-0.02	0.51
29	47	-0.13	0.03	-0.07	0.03	0.01	0.03	-0.05	0.01	-0.08

7				8			9		
A				A			A		
Frequencies	--	200.8733		217.7324		250.3655			
Red. masses	--	8.4422		4.9293		5.2921			
Frc consts	--	0.2007		0.1377		0.1954			
IR Inten	--	3.5379		12.0650		4.1254			

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.08	-0.06	0.06	-0.02	0.01	-0.17	0.02	-0.01	0.03
2	6	0.01	-0.11	0.04	-0.03	-0.02	-0.13	0.02	-0.02	0.11
3	6	0.00	-0.11	-0.03	0.01	-0.02	0.00	0.05	-0.03	0.22
4	6	-0.04	-0.10	-0.13	0.05	-0.03	0.21	0.04	-0.03	0.17
5	6	-0.03	-0.13	-0.10	0.04	-0.04	0.15	0.00	-0.02	-0.03
6	6	-0.02	-0.11	-0.07	0.03	-0.03	0.12	-0.04	0.00	-0.17
7	6	-0.02	-0.11	0.01	0.00	-0.03	0.00	-0.04	0.00	-0.15
8	6	-0.07	-0.04	-0.12	0.05	-0.02	0.23	0.03	-0.02	0.15
9	6	-0.13	-0.03	-0.04	-0.01	-0.01	0.04	0.01	-0.02	0.13
10	6	-0.12	-0.08	0.05	-0.07	-0.01	-0.21	-0.01	-0.02	0.03
11	6	-0.07	-0.14	0.03	-0.03	-0.02	-0.11	-0.05	-0.02	-0.13
12	6	0.05	0.01	0.04	0.01	0.01	-0.03	-0.05	0.01	-0.24
13	6	-0.02	0.03	-0.05	0.04	0.00	0.17	-0.01	0.00	-0.08
14	6	-0.04	0.12	0.02	0.02	0.02	0.12	-0.04	0.03	-0.18
15	6	-0.11	0.13	0.08	-0.01	0.02	0.06	-0.06	0.02	-0.15
16	6	-0.16	0.06	0.06	-0.03	0.01	-0.01	-0.04	0.00	0.00
17	7	0.12	0.09	-0.02	0.04	0.02	0.03	0.00	0.03	-0.06
18	8	0.01	0.29	-0.01	-0.04	0.08	-0.02	0.09	0.01	0.03
19	8	0.38	0.15	0.05	0.11	0.00	-0.03	-0.02	0.07	0.07
20	1	0.17	-0.08	0.15	-0.06	0.03	-0.40	0.01	-0.01	-0.02
21	1	0.03	-0.12	0.14	-0.07	-0.01	-0.32	0.02	-0.02	0.14
22	1	-0.01	-0.11	0.06	-0.02	-0.02	-0.07	-0.08	0.01	-0.28
23	1	-0.14	-0.08	0.16	-0.14	0.00	-0.48	-0.03	-0.02	-0.02
24	1	-0.06	-0.17	0.14	-0.07	-0.02	-0.28	-0.10	-0.02	-0.32
25	1	0.10	0.04	0.11	-0.01	0.03	-0.14	-0.12	0.04	-0.52
26	1	0.02	0.19	0.02	0.00	0.03	0.06	-0.06	0.05	-0.22
27	1	-0.11	0.19	0.15	-0.02	0.03	0.04	-0.10	0.04	-0.24
28	1	-0.22	0.07	0.14	-0.08	0.01	-0.13	-0.06	0.00	-0.02
29	47	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.04

10				11			12		
A				A			A		
Frequencies	--	278.7338		308.1445		313.4123			
Red. masses	--	4.6496		5.6132		8.3259			
Frc consts	--	0.2128		0.3140		0.4819			
IR Inten	--	1.6662		6.8942		2.5297			

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.01	0.16	-0.08	0.00	-0.07	-0.14	0.04	0.08
2	6	-0.02	0.01	-0.04	0.03	-0.01	0.18	-0.03	-0.01	-0.08
3	6	0.02	0.00	0.14	-0.01	0.01	0.09	-0.09	0.09	-0.01
4	6	0.02	0.00	0.09	-0.01	0.02	0.01	-0.06	0.10	0.01
5	6	0.04	0.00	0.19	0.02	0.03	-0.03	-0.01	0.09	0.00

6	6	0.02	0.00	0.08	0.02	0.02	-0.18	0.11	-0.06	0.06
7	6	-0.05	0.01	-0.17	0.01	0.02	-0.06	0.03	-0.04	0.03
8	6	-0.03	0.01	-0.13	-0.03	0.01	0.02	-0.08	0.10	0.02
9	6	-0.04	0.01	-0.18	-0.06	0.02	-0.09	-0.02	0.10	0.08
10	6	-0.04	0.01	-0.17	-0.02	0.04	0.02	-0.02	0.13	0.00
11	6	0.03	0.00	0.12	0.01	0.03	0.13	-0.04	0.13	-0.08
12	6	-0.03	0.00	-0.09	-0.08	0.00	-0.07	-0.16	0.03	0.08
13	6	-0.04	0.01	-0.19	-0.05	-0.02	0.11	-0.17	0.02	-0.02
14	6	-0.02	0.00	-0.07	0.00	-0.04	0.29	-0.18	-0.07	-0.14
15	6	0.06	0.00	0.19	-0.01	-0.04	0.17	-0.08	-0.09	-0.10
16	6	0.02	0.00	0.05	-0.07	0.00	-0.14	0.02	0.00	0.09
17	7	0.00	-0.01	0.03	0.09	-0.01	-0.10	0.21	-0.14	-0.01
18	8	-0.02	-0.01	0.00	0.22	-0.11	-0.03	0.16	-0.13	-0.07
19	8	0.01	-0.03	-0.03	0.03	0.03	0.03	0.34	-0.16	-0.07
20	1	0.05	-0.02	0.30	-0.13	0.02	-0.19	-0.17	0.05	0.17
21	1	-0.05	0.01	-0.15	0.07	-0.02	0.33	0.02	-0.01	-0.18
22	1	-0.11	0.03	-0.41	-0.01	0.06	-0.09	0.01	0.02	0.05
23	1	-0.06	0.02	-0.28	0.01	0.04	0.07	-0.03	0.14	-0.04
24	1	0.06	0.00	0.23	0.04	0.01	0.29	-0.06	0.13	-0.18
25	1	-0.05	-0.01	-0.12	-0.11	0.02	-0.19	-0.15	0.03	0.13
26	1	0.03	0.03	-0.04	0.02	-0.06	0.34	-0.24	-0.13	-0.16
27	1	0.13	0.01	0.41	0.04	-0.08	0.27	-0.09	-0.15	-0.20
28	1	0.06	0.00	0.17	-0.08	-0.01	-0.30	0.14	-0.01	0.16
29	47	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.02
			13			14			15	
			A			A			A	
Frequencies	--	354.9607			417.0126			424.8342		
Red. masses	--	7.1770			5.1089			4.9265		
Frc consts	--	0.5328			0.5234			0.5239		
IR Inten	--	2.6236			10.7909			0.0584		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.11	-0.03	0.10	-0.02	-0.12	0.12	-0.07	0.12
2	6	-0.07	0.05	-0.04	0.22	0.00	0.03	0.11	0.05	-0.15
3	6	-0.02	-0.08	-0.09	0.14	0.04	-0.08	0.13	0.01	0.03
4	6	0.05	-0.09	0.00	0.00	0.05	0.00	0.01	0.02	0.00
5	6	0.14	0.01	0.06	-0.02	0.02	0.07	0.00	0.07	-0.06
6	6	0.15	0.15	0.09	-0.02	-0.01	-0.09	0.07	0.05	0.12
7	6	0.06	0.16	0.10	0.14	-0.04	-0.05	0.14	0.05	-0.01
8	6	0.01	-0.10	-0.02	-0.05	0.06	0.03	-0.03	-0.02	-0.02
9	6	-0.11	-0.09	0.02	-0.08	0.06	-0.03	-0.07	-0.02	0.08
10	6	-0.06	-0.02	-0.06	-0.13	0.08	-0.10	-0.01	0.05	0.16
11	6	-0.01	0.00	0.03	-0.07	0.03	0.13	-0.07	0.08	-0.12
12	6	0.04	-0.11	0.08	0.10	-0.01	0.07	0.05	-0.06	-0.15
13	6	0.02	-0.08	-0.03	-0.07	-0.01	0.07	-0.07	-0.06	-0.08
14	6	-0.06	0.07	-0.11	-0.12	-0.14	-0.11	-0.05	-0.08	0.16
15	6	-0.17	0.09	0.00	-0.07	-0.18	-0.03	-0.11	-0.08	0.08
16	6	-0.18	0.01	0.12	0.01	-0.09	0.10	-0.13	-0.05	-0.10
17	7	0.12	0.13	-0.03	-0.05	0.03	-0.05	0.01	0.02	0.08
18	8	0.24	-0.13	-0.14	-0.01	0.08	0.03	-0.07	0.04	-0.01
19	8	-0.18	0.11	-0.02	-0.05	0.07	0.04	0.00	-0.01	-0.02
20	1	0.00	-0.11	-0.01	0.03	0.00	-0.20	0.09	-0.08	0.29
21	1	-0.23	0.07	-0.07	0.29	-0.01	0.15	0.03	0.07	-0.33
22	1	0.05	0.24	0.16	0.19	-0.15	-0.06	0.16	0.01	-0.03
23	1	-0.01	-0.02	-0.16	-0.17	0.08	-0.21	0.08	0.03	0.27
24	1	-0.06	-0.07	0.02	-0.07	-0.01	0.24	-0.12	0.06	-0.25
25	1	0.06	-0.13	0.19	0.18	0.09	0.11	0.07	0.01	-0.23
26	1	-0.01	0.19	-0.17	-0.19	-0.21	-0.14	0.02	-0.06	0.25
27	1	-0.21	0.16	-0.01	-0.07	-0.20	-0.08	-0.09	-0.09	0.11
28	1	-0.24	0.02	0.23	0.18	-0.10	0.20	-0.13	-0.06	-0.28
29	47	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01
			16			17			18	
			A			A			A	
Frequencies	--	464.5245			487.9852			512.7488		



Red. masses	--	5.2577			5.6565			4.5475		
Frc consts	--	0.6684			0.7936			0.7044		
IR Inten	--	0.3857			1.2571			6.7616		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	0.08	-0.04	0.04	-0.19	-0.09	0.02	-0.07	0.06
2	6	0.07	0.10	0.09	0.01	-0.09	0.13	-0.01	-0.06	-0.12
3	6	0.00	0.15	0.02	0.03	-0.19	0.02	-0.02	-0.04	-0.08
4	6	-0.03	0.11	-0.03	-0.04	-0.10	-0.09	-0.02	-0.02	0.10
5	6	-0.05	0.14	0.00	0.09	0.05	0.01	-0.03	0.07	-0.08
6	6	-0.03	0.04	-0.05	0.05	0.06	0.03	-0.04	0.00	-0.17
7	6	0.01	0.06	-0.10	0.02	0.08	-0.17	0.09	-0.03	0.15
8	6	0.07	-0.14	-0.02	-0.09	0.01	-0.05	0.01	-0.04	0.20
9	6	-0.05	-0.18	-0.01	0.06	0.04	0.01	0.03	-0.02	-0.06
10	6	0.03	-0.07	-0.05	0.16	0.13	-0.06	0.11	0.05	-0.06
11	6	-0.03	0.14	0.05	0.19	0.08	-0.04	0.11	0.10	0.07
12	6	0.06	-0.15	0.01	-0.01	-0.04	0.01	-0.01	-0.05	-0.02
13	6	0.15	-0.14	0.02	-0.11	0.00	0.10	-0.05	-0.03	-0.03
14	6	0.08	0.04	-0.04	-0.16	0.08	0.09	-0.12	0.06	-0.13
15	6	-0.10	0.08	0.00	-0.08	0.07	-0.08	0.02	0.06	0.15
16	6	-0.14	-0.05	0.07	0.02	0.11	0.07	-0.03	0.05	-0.09
17	7	-0.04	-0.09	0.02	-0.03	-0.04	0.08	-0.07	-0.05	-0.08
18	8	-0.09	0.00	0.06	-0.12	0.02	0.04	-0.03	0.02	0.05
19	8	0.13	-0.10	-0.01	0.02	-0.07	-0.02	0.01	0.00	0.03
20	1	-0.25	0.10	-0.09	0.09	-0.19	-0.22	0.03	-0.09	0.18
21	1	0.15	0.09	0.21	-0.11	-0.09	0.30	-0.04	-0.06	-0.16
22	1	0.01	0.03	-0.16	-0.05	0.15	-0.33	0.16	-0.03	0.47
23	1	0.22	-0.09	-0.13	0.18	0.13	-0.11	0.19	0.04	-0.06
24	1	0.05	0.23	0.09	0.17	0.07	-0.06	0.18	0.14	0.23
25	1	-0.04	-0.29	0.01	0.07	0.09	-0.05	0.01	-0.03	-0.02
26	1	0.15	0.18	-0.10	-0.18	0.06	0.09	-0.12	0.12	-0.20
27	1	-0.16	0.20	-0.01	-0.08	-0.04	-0.22	0.09	0.02	0.31
28	1	-0.26	-0.04	0.15	-0.01	0.12	0.14	-0.11	0.06	-0.15
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			19			20			21	
			A			A			A	
Frequencies	--	517.6944			521.3614			560.6180		
Red. masses	--	5.2154			4.1231			4.7565		
Frc consts	--	0.8235			0.6603			0.8808		
IR Inten	--	0.8037			1.8071			5.6352		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.16	0.13	0.07	0.02	0.06	-0.17	-0.04	0.07	0.05
2	6	-0.07	-0.09	0.00	-0.01	-0.07	0.01	0.11	-0.04	-0.01
3	6	-0.06	-0.08	-0.04	0.00	-0.04	0.08	-0.01	0.11	-0.11
4	6	-0.16	-0.05	-0.09	-0.03	-0.03	0.22	-0.06	0.07	0.00
5	6	-0.06	0.08	0.00	-0.02	0.05	0.07	-0.02	0.00	0.23
6	6	0.00	0.05	0.03	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	-0.08	0.00
7	6	-0.01	0.03	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.05	-0.13	0.00
8	6	-0.11	-0.08	0.10	-0.11	-0.03	-0.15	-0.06	-0.04	-0.06
9	6	-0.05	-0.16	0.06	-0.04	-0.07	-0.11	0.12	-0.10	0.11
10	6	0.04	-0.01	-0.10	0.09	0.00	0.15	0.12	-0.13	-0.05
11	6	0.03	0.10	0.07	-0.01	0.08	-0.14	0.07	-0.01	-0.03
12	6	0.08	0.23	-0.10	0.08	0.06	0.16	-0.04	-0.01	-0.02
13	6	0.01	0.14	0.04	-0.03	0.05	-0.06	-0.11	-0.02	-0.11
14	6	0.06	0.00	0.02	-0.02	0.02	-0.06	-0.10	0.06	0.17
15	6	0.05	-0.05	-0.06	0.04	-0.01	0.05	-0.04	0.06	-0.06
16	6	-0.04	-0.23	0.04	-0.03	-0.08	-0.04	0.02	0.05	0.02
17	7	0.02	0.02	0.02	-0.01	0.00	-0.04	-0.02	0.03	-0.10
18	8	0.04	-0.04	-0.02	0.03	0.00	0.01	0.08	0.02	0.00
19	8	0.02	0.00	-0.03	0.00	0.02	0.01	-0.06	0.08	0.03
20	1	0.38	0.10	0.17	0.02	0.08	-0.43	-0.07	0.06	0.32
21	1	-0.15	-0.08	0.08	-0.06	-0.06	-0.11	0.28	-0.06	0.04
22	1	-0.03	0.09	0.04	-0.01	0.00	-0.06	0.09	-0.22	-0.01
23	1	0.16	-0.02	-0.25	0.23	-0.02	0.34	0.11	-0.13	-0.33

24	1	0.09	0.15	0.16	-0.02	0.13	-0.32	0.10	0.12	-0.31
25	1	0.09	0.30	-0.21	0.14	0.07	0.33	0.00	-0.05	0.18
26	1	-0.05	-0.12	0.00	-0.01	-0.03	0.01	-0.05	0.05	0.26
27	1	-0.03	0.07	-0.12	0.07	0.04	0.22	-0.04	-0.03	-0.18
28	1	-0.13	-0.22	0.02	-0.05	-0.08	0.12	-0.12	0.06	-0.04
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			22			23			24	
			A			A			A	
Frequencies	--	570.4356			586.0542			612.3199		
Red. masses	--	4.2380			4.5121			5.7037		
Frc consts	--	0.8125			0.9131			1.2600		
IR Inten	--	0.3984			0.7825			9.1895		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.06	0.02	0.04	0.02	-0.05	0.12	-0.09	-0.01
2	6	0.05	0.12	-0.10	0.04	0.17	0.12	-0.10	0.20	-0.05
3	6	0.09	0.08	0.16	0.02	0.05	-0.14	0.04	-0.05	-0.03
4	6	-0.01	0.03	0.02	0.00	-0.01	-0.04	0.03	-0.04	0.14
5	6	-0.06	-0.05	-0.16	0.02	-0.08	0.03	-0.01	-0.02	0.10
6	6	-0.03	0.02	0.05	-0.04	0.08	0.01	-0.14	0.11	-0.16
7	6	0.03	0.03	0.05	-0.04	0.14	-0.09	-0.05	0.18	0.14
8	6	-0.05	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.13	-0.03	0.02	-0.11
9	6	0.03	-0.08	-0.17	0.04	-0.04	0.08	0.00	0.04	0.02
10	6	0.07	-0.18	-0.04	0.02	-0.13	0.03	-0.05	0.00	-0.03
11	6	0.08	-0.14	0.01	0.03	-0.16	-0.05	-0.01	-0.05	0.03
12	6	-0.01	0.04	-0.03	0.03	0.06	0.06	0.10	-0.02	-0.05
13	6	-0.07	0.01	0.17	-0.09	0.05	-0.06	-0.03	0.01	-0.11
14	6	-0.15	0.03	0.02	-0.14	0.00	-0.12	0.03	-0.02	0.17
15	6	-0.04	0.02	-0.05	0.03	-0.03	0.16	-0.03	-0.02	-0.13
16	6	0.03	0.02	0.09	-0.03	-0.02	-0.14	0.05	0.01	0.09
17	7	0.01	0.03	0.04	0.01	-0.01	0.07	-0.11	-0.09	-0.13
18	8	0.02	-0.03	-0.02	-0.02	-0.05	0.00	0.01	-0.09	0.08
19	8	0.00	0.01	-0.02	0.07	-0.05	-0.04	0.16	-0.04	0.00
20	1	-0.09	0.09	-0.21	0.09	0.01	0.07	0.18	-0.10	0.08
21	1	0.03	0.13	-0.35	0.04	0.16	0.39	-0.27	0.21	-0.05
22	1	0.07	-0.05	0.03	-0.03	0.10	-0.15	0.01	0.15	0.35
23	1	0.11	-0.19	0.22	-0.08	-0.12	-0.07	-0.14	0.01	-0.12
24	1	0.20	-0.07	0.29	0.01	-0.14	-0.21	-0.03	-0.06	-0.05
25	1	-0.06	0.11	-0.31	0.13	0.12	0.25	0.19	0.05	0.06
26	1	-0.23	-0.02	-0.03	-0.17	-0.02	-0.13	0.07	-0.06	0.28
27	1	-0.02	-0.07	-0.08	0.09	-0.07	0.29	-0.06	-0.05	-0.24
28	1	0.01	0.03	0.32	-0.10	-0.02	-0.35	0.11	0.01	0.17
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			25			26			27	
			A			A			A	
Frequencies	--	637.2720			702.6047			710.8126		
Red. masses	--	7.5102			6.9753			6.0484		
Frc consts	--	1.7970			2.0288			1.8005		
IR Inten	--	0.2265			0.2521			5.8834		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.14	0.15	0.05	-0.14	-0.17	0.02	0.00	0.04	-0.10
2	6	0.03	0.00	-0.04	0.13	-0.04	-0.03	0.00	-0.05	0.00
3	6	-0.05	0.04	-0.01	0.02	-0.07	-0.01	0.01	0.01	0.07
4	6	0.18	-0.06	0.05	-0.08	-0.04	0.05	0.02	0.01	0.17
5	6	0.26	-0.08	-0.05	-0.04	0.06	0.00	-0.07	0.02	-0.21
6	6	0.16	0.01	-0.18	0.05	0.11	-0.03	-0.03	-0.01	-0.15
7	6	0.13	0.06	0.00	0.31	0.16	-0.07	-0.03	-0.04	-0.02
8	6	0.05	0.02	-0.05	-0.10	-0.03	0.03	0.00	-0.01	0.05
9	6	-0.09	-0.05	0.01	-0.01	-0.07	0.00	0.04	0.00	0.10
10	6	0.05	0.03	-0.03	-0.14	-0.15	0.02	-0.02	-0.01	-0.11
11	6	0.17	-0.13	-0.02	-0.19	-0.01	0.05	0.01	0.01	0.11
12	6	-0.20	0.21	0.06	-0.22	0.01	0.05	0.06	-0.03	0.07
13	6	0.00	0.11	-0.07	-0.06	0.06	-0.01	-0.08	0.00	-0.28
14	6	0.07	-0.05	0.05	0.08	0.11	0.02	-0.01	0.00	0.11

15	6	-0.16	-0.07	-0.01	0.29	0.15	-0.10	-0.02	0.00	-0.05
16	6	-0.15	-0.13	-0.07	0.11	-0.06	-0.01	0.03	0.02	0.04
17	7	-0.03	-0.10	-0.04	0.00	-0.02	0.01	0.15	0.10	0.31
18	8	-0.14	0.13	0.04	-0.03	0.03	0.01	-0.05	-0.01	-0.09
19	8	-0.06	-0.09	0.08	0.02	-0.02	0.01	-0.05	-0.04	-0.08
20	1	-0.03	0.14	0.08	-0.14	-0.17	0.03	-0.02	0.04	-0.07
21	1	0.06	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	0.03	0.04	-0.05	0.02
22	1	0.13	0.16	0.19	0.33	0.16	-0.04	0.02	-0.04	0.20
23	1	0.04	0.03	-0.08	-0.15	-0.15	0.02	-0.04	0.00	-0.20
24	1	0.06	-0.28	-0.03	-0.19	0.00	0.05	0.07	0.03	0.32
25	1	-0.23	0.14	0.18	-0.20	0.01	0.09	0.15	-0.07	0.46
26	1	0.08	-0.04	0.06	0.01	-0.05	0.10	0.11	0.00	0.28
27	1	-0.23	0.09	0.00	0.29	0.18	-0.08	-0.03	-0.05	-0.15
28	1	-0.14	-0.14	0.13	-0.03	-0.04	0.07	-0.01	0.02	-0.11
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			28			29			30	
			A			A			A	
Frequencies	--		725.6956			749.8611			760.2619	
Red. masses	--		3.7463			6.3056			3.3329	
Frc consts	--		1.1624			2.0890			1.1350	
IR Inten	--		17.2393			36.2973			4.4759	

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	-0.01	-0.08	0.09	0.12	-0.01	0.01	0.03	-0.04
2	6	0.01	0.02	-0.01	-0.14	-0.05	0.00	0.00	-0.03	0.09
3	6	0.06	-0.02	0.20	-0.06	0.00	0.09	-0.05	0.00	-0.12
4	6	-0.02	0.00	-0.12	-0.01	0.03	-0.06	0.03	0.00	0.11
5	6	-0.03	0.00	-0.12	0.06	0.07	0.03	-0.02	0.02	-0.14
6	6	0.01	0.00	0.14	0.16	0.01	-0.08	0.07	0.00	0.19
7	6	0.03	0.01	0.04	-0.01	0.08	0.03	-0.01	0.02	-0.06
8	6	-0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.04	-0.07	0.04	-0.01	0.15
9	6	0.04	0.00	0.21	0.09	-0.02	0.05	-0.01	0.00	-0.11
10	6	-0.01	0.03	-0.08	-0.08	-0.16	0.01	-0.02	-0.03	-0.03
11	6	0.04	-0.02	0.06	-0.15	0.04	0.07	-0.03	0.00	-0.04
12	6	0.00	0.00	0.10	0.16	-0.02	-0.02	0.02	0.00	-0.04
13	6	-0.02	0.02	-0.11	-0.03	-0.05	0.03	-0.03	-0.01	-0.11
14	6	0.02	0.00	-0.03	-0.18	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.08
15	6	0.01	0.00	0.06	0.03	-0.03	0.03	-0.03	-0.01	-0.06
16	6	-0.02	-0.02	-0.03	0.09	0.11	-0.04	0.03	0.03	0.05
17	7	-0.09	-0.04	-0.16	0.14	-0.14	-0.09	-0.04	-0.05	-0.13
18	8	0.03	-0.01	0.05	-0.01	0.22	-0.06	0.02	0.04	0.02
19	8	0.03	0.04	0.03	-0.11	-0.18	0.13	-0.01	0.00	0.05
20	1	-0.08	0.01	-0.30	0.05	0.14	-0.17	0.11	0.00	0.36
21	1	-0.11	0.05	-0.47	-0.24	-0.04	-0.05	-0.04	-0.02	0.05
22	1	-0.04	-0.01	-0.29	-0.11	0.34	0.13	-0.11	0.08	-0.35
23	1	-0.06	0.03	-0.26	-0.10	-0.16	-0.17	0.08	-0.05	0.40
24	1	0.07	-0.03	0.20	-0.19	0.04	-0.08	0.07	0.00	0.38
25	1	0.01	-0.01	0.17	0.12	-0.01	-0.15	0.12	-0.04	0.35
26	1	0.05	0.03	-0.01	-0.17	-0.03	0.07	0.02	-0.01	0.10
27	1	-0.05	0.03	-0.08	0.11	-0.26	-0.07	-0.01	-0.05	-0.05
28	1	-0.13	-0.02	-0.41	0.08	0.11	-0.17	0.08	0.03	0.16
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			31			32			33	
			A			A			A	
Frequencies	--		786.9040			828.0370			835.0617	
Red. masses	--		6.7746			2.5922			1.8466	
Frc consts	--		2.4716			1.0472			0.7587	
IR Inten	--		19.8366			4.7591			10.0226	

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.21	-0.03	-0.01	0.14	0.02	0.01	-0.06	-0.01
2	6	0.04	0.29	0.02	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.00
3	6	0.11	0.06	-0.03	-0.04	0.05	0.02	0.03	-0.03	0.03
4	6	0.01	0.01	0.00	-0.07	-0.03	-0.02	0.03	0.02	-0.09
5	6	-0.01	-0.05	-0.02	0.03	-0.05	-0.02	0.00	0.03	0.00

6	6	-0.02	-0.12	0.02	0.02	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00
7	6	-0.22	-0.09	0.05	0.05	0.03	-0.01	-0.02	-0.02	0.01
8	6	-0.08	0.01	0.05	-0.06	-0.04	0.07	0.08	0.02	0.09
9	6	-0.08	-0.06	0.00	-0.05	0.03	0.00	0.02	-0.01	-0.03
10	6	0.05	0.14	-0.01	-0.02	0.14	0.04	0.02	-0.08	0.03
11	6	0.05	0.05	0.00	0.08	-0.10	0.00	-0.04	0.06	0.04
12	6	-0.03	-0.05	0.01	0.10	-0.12	0.00	-0.04	0.06	0.05
13	6	-0.07	0.06	0.00	-0.02	-0.06	-0.03	-0.01	0.03	-0.06
14	6	0.01	0.10	0.01	-0.05	0.05	0.00	0.00	-0.02	0.00
15	6	0.15	0.10	-0.06	0.07	0.04	-0.08	-0.07	-0.02	-0.06
16	6	-0.04	-0.21	0.01	0.01	-0.05	-0.04	-0.02	0.03	-0.04
17	7	0.16	-0.08	-0.05	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00
18	8	0.05	0.17	-0.09	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01
19	8	-0.11	-0.13	0.10	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
20	1	-0.06	-0.21	0.01	-0.19	0.18	-0.08	0.06	-0.06	-0.18
21	1	0.17	0.29	-0.06	0.02	-0.03	0.04	-0.02	0.00	-0.04
22	1	-0.17	-0.24	-0.06	0.04	0.05	0.02	-0.03	-0.02	-0.01
23	1	0.13	0.13	-0.02	-0.21	0.16	-0.15	0.03	-0.08	-0.27
24	1	0.02	0.00	0.02	-0.06	-0.23	-0.15	-0.04	0.13	-0.19
25	1	0.08	0.08	0.02	-0.02	-0.23	-0.15	-0.02	0.13	-0.06
26	1	-0.01	-0.04	0.15	0.11	-0.08	0.42	0.18	-0.10	0.37
27	1	0.11	0.26	0.06	0.21	0.05	0.34	0.11	-0.01	0.49
28	1	-0.17	-0.19	0.17	0.09	-0.04	0.40	0.14	0.03	0.52
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			34			35			36	
			A			A			A	
Frequencies	--	859.5078			867.7178			868.9296		
Red. masses	--	2.5128			1.9513			3.9661		
Frc consts	--	1.0937			0.8656			1.7643		
IR Inten	--	4.4411			1.6436			4.2434		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.03	0.08	-0.01	0.00	-0.03	0.01	-0.02	0.05
2	6	-0.01	0.00	-0.03	0.02	-0.01	0.05	0.01	0.00	-0.06
3	6	-0.02	0.01	-0.12	-0.01	-0.01	-0.04	0.00	-0.03	0.00
4	6	0.08	0.00	0.16	-0.03	0.00	0.10	-0.16	0.00	0.02
5	6	0.00	0.01	-0.13	-0.07	0.01	-0.09	-0.16	-0.01	0.05
6	6	0.04	-0.02	0.10	-0.03	0.02	0.02	-0.10	0.05	0.07
7	6	-0.04	-0.02	-0.06	0.03	0.02	0.01	0.08	0.07	-0.05
8	6	0.00	0.01	-0.14	-0.04	0.01	-0.09	-0.06	0.03	0.06
9	6	0.03	-0.02	0.10	0.02	0.02	0.05	0.01	0.07	-0.02
10	6	-0.01	-0.02	-0.03	0.03	-0.01	0.03	0.05	-0.01	-0.02
11	6	-0.01	0.03	0.05	0.04	-0.03	0.07	0.10	-0.09	-0.04
12	6	0.00	0.01	0.05	-0.02	0.01	-0.08	0.00	0.00	0.07
13	6	0.01	0.01	0.04	0.04	-0.01	0.11	0.02	0.01	-0.09
14	6	-0.04	0.02	-0.03	0.05	-0.03	-0.02	0.19	-0.09	-0.01
15	6	0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.00	-0.12	-0.04	0.02
16	6	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	0.03	-0.06	-0.02	0.10	0.01
17	7	-0.03	0.00	-0.03	0.03	-0.01	0.00	0.09	-0.05	-0.03
18	8	0.00	-0.02	0.02	0.01	0.03	-0.02	0.06	0.10	-0.06
19	8	0.01	0.03	0.00	-0.01	-0.02	0.01	-0.05	-0.09	0.05
20	1	-0.06	0.01	-0.34	0.10	-0.04	0.41	-0.10	0.02	-0.43
21	1	0.16	-0.04	0.52	-0.09	0.02	-0.26	0.00	-0.01	0.40
22	1	0.02	-0.01	0.21	-0.02	0.00	-0.23	0.18	0.00	0.19
23	1	-0.01	-0.01	-0.18	-0.14	0.02	-0.49	-0.06	0.00	0.11
24	1	-0.01	0.03	0.08	-0.02	0.01	-0.27	0.19	0.01	0.02
25	1	-0.12	0.08	-0.51	0.06	-0.04	0.29	-0.11	0.02	-0.35
26	1	0.08	-0.06	0.26	-0.03	0.01	-0.19	0.22	0.06	-0.17
27	1	0.05	-0.01	0.11	0.04	0.03	0.26	-0.16	0.07	0.06
28	1	-0.03	-0.01	-0.03	0.09	0.03	0.26	0.08	0.09	-0.04
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			37			38			39	
			A			A			A	
Frequencies	--	905.7351			922.2427			946.4076		

Red. masses	--	1.5387			1.5595			1.4067		
Frc consts	--	0.7437			0.7815			0.7423		
IR Inten	--	48.7260			133.6562			91.4504		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.06	-0.01	0.00	-0.04
2	6	0.02	-0.01	0.06	0.02	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.02
3	6	-0.02	0.00	-0.05	-0.03	0.00	-0.10	0.01	-0.01	0.03
4	6	-0.01	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00
5	6	-0.01	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.00	-0.01
6	6	-0.03	0.01	-0.06	-0.01	0.00	-0.03	-0.02	0.01	0.03
7	6	0.03	0.01	0.04	0.02	0.00	0.06	0.01	0.01	-0.02
8	6	-0.01	0.01	-0.04	0.01	-0.01	0.03	0.02	0.01	0.01
9	6	0.02	0.01	0.09	-0.02	0.00	-0.08	-0.01	0.01	-0.07
10	6	-0.01	0.00	-0.08	0.01	0.00	0.05	0.01	0.00	0.03
11	6	0.00	-0.01	-0.06	0.01	0.00	0.04	0.02	-0.01	0.03
12	6	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.07	-0.02	0.01	-0.03
13	6	0.03	0.00	0.04	-0.01	0.00	-0.05	0.04	0.00	0.04
14	6	-0.01	0.00	-0.07	0.00	0.01	0.01	-0.03	0.02	-0.09
15	6	-0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.03	0.00	-0.01	0.03
16	6	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.05	0.00	0.00	0.08
17	7	0.02	0.00	0.02	0.01	0.00	0.02	0.01	-0.01	-0.01
18	8	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01
19	8	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
20	1	0.03	-0.01	0.06	-0.05	0.03	-0.24	0.07	-0.03	0.21
21	1	-0.11	0.02	-0.35	-0.10	0.03	-0.41	0.01	-0.01	0.11
22	1	-0.05	0.01	-0.31	-0.10	0.00	-0.45	0.05	-0.02	0.13
23	1	0.09	-0.02	0.41	-0.05	0.01	-0.24	-0.04	0.00	-0.14
24	1	0.12	0.01	0.38	-0.08	0.00	-0.28	-0.02	0.02	-0.22
25	1	-0.05	0.01	-0.15	-0.11	0.04	-0.43	0.01	-0.03	0.18
26	1	0.23	-0.11	0.45	0.02	0.03	0.01	0.34	-0.11	0.66
27	1	0.06	0.02	0.27	-0.10	-0.03	-0.32	-0.10	-0.01	-0.24
28	1	0.00	0.01	-0.04	-0.04	0.00	-0.17	-0.09	-0.01	-0.37
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

					40			41		42
					A			A		A
Frequencies	--	988.6239			1016.0478			1031.3309		
Red. masses	--	4.7758			1.4239			1.4614		
Frc consts	--	2.7502			0.8661			0.9158		
IR Inten	--	2.0376			28.1212			3.9817		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.15	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.08
2	6	-0.07	-0.19	0.03	-0.01	-0.02	0.00	-0.03	-0.02	-0.08
3	6	-0.04	0.09	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
4	6	0.01	0.25	0.01	0.02	0.01	0.00	0.02	0.01	0.00
5	6	0.00	0.09	0.00	-0.02	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00
6	6	0.09	0.01	-0.02	-0.03	0.01	0.01	-0.04	0.02	-0.01
7	6	-0.02	0.02	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.04	0.00	0.10
8	6	-0.01	0.24	0.01	0.03	0.01	0.00	0.04	0.02	-0.01
9	6	-0.02	0.08	-0.01	0.01	0.01	0.02	0.00	0.01	0.00
10	6	0.02	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
11	6	0.08	-0.12	-0.02	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.01
12	6	0.10	-0.13	-0.03	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.01	-0.08
13	6	-0.06	0.07	0.02	0.02	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.01
14	6	0.05	0.03	0.00	-0.03	0.04	-0.01	-0.03	0.04	0.01
15	6	0.00	0.03	-0.01	0.03	-0.02	0.10	-0.01	-0.01	-0.01
16	6	-0.06	-0.18	0.03	-0.04	-0.04	-0.11	0.00	-0.04	0.00
17	7	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
18	8	-0.02	-0.02	0.02	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01
19	8	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
20	1	-0.18	-0.14	0.05	0.02	-0.01	0.05	-0.10	0.04	-0.44
21	1	-0.06	-0.19	-0.12	-0.03	-0.02	0.02	0.05	-0.05	0.42
22	1	-0.16	0.38	0.13	0.02	-0.01	0.00	-0.11	-0.02	-0.59
23	1	-0.18	-0.14	-0.01	-0.04	0.01	-0.07	0.00	0.00	0.03

24	1	0.18	0.01	-0.07	0.08	0.02	0.21	0.00	0.01	-0.04
25	1	0.24	0.07	-0.09	-0.02	-0.01	-0.02	0.09	-0.06	0.44
26	1	-0.02	-0.01	-0.06	0.08	0.09	0.12	-0.01	0.06	0.01
27	1	-0.13	0.35	0.06	-0.20	-0.09	-0.64	0.01	-0.01	0.05
28	1	-0.08	-0.19	-0.07	0.16	-0.04	0.62	0.03	-0.05	-0.04
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			43			44			45	
			A			A			A	
Frequencies	--	1041.8744			1049.6605			1053.1104		
Red. masses	--	3.0150			1.4303			1.3836		
Frc consts	--	1.9283			0.9285			0.9041		
IR Inten	--	8.3607			0.1759			1.4390		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	0.01	-0.04	-0.02	0.01	-0.10	0.00	0.00	-0.01
2	6	0.00	-0.06	0.02	-0.03	0.01	-0.09	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	-0.03	0.00	0.01	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00
4	6	0.08	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
5	6	-0.08	-0.03	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.02
6	6	-0.14	0.05	0.05	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.01
7	6	0.05	0.03	-0.05	0.02	-0.01	0.08	0.00	0.00	0.00
8	6	0.13	0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.03	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02
10	6	0.00	0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.00	-0.12
11	6	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.12
12	6	-0.01	0.01	0.06	0.03	-0.01	0.08	0.00	0.00	0.00
13	6	0.07	0.00	-0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.11	0.18	0.07	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
15	6	-0.07	-0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02
16	6	0.05	-0.17	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.03
17	7	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	8	0.04	0.03	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.10	-0.02	0.23	0.12	-0.05	0.55	0.01	-0.01	0.04
21	1	-0.17	-0.04	-0.09	0.11	-0.03	0.45	0.01	0.00	0.01
22	1	0.16	-0.09	0.18	-0.11	0.00	-0.45	-0.01	0.00	-0.01
23	1	0.00	0.05	0.09	-0.01	-0.01	-0.03	0.15	-0.03	0.63
24	1	-0.03	0.03	-0.12	0.01	0.00	0.03	-0.18	-0.01	-0.68
25	1	-0.15	-0.04	-0.24	-0.09	0.05	-0.43	0.00	0.01	-0.02
26	1	-0.10	0.45	-0.22	-0.02	-0.02	-0.04	0.01	-0.02	0.02
27	1	0.08	-0.13	0.34	0.00	0.02	0.02	-0.03	-0.01	-0.12
28	1	0.20	-0.20	-0.23	-0.02	0.01	-0.02	0.02	0.01	0.18
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			46			47			48	
			A			A			A	
Frequencies	--	1091.1453			1146.7401			1189.5535		
Red. masses	--	2.6401			2.4968			2.2388		
Frc consts	--	1.8520			1.9344			1.8665		
IR Inten	--	2.5200			2.0554			10.5862		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	-0.04	0.00	-0.03	0.11	0.02	0.00	0.03	0.00
2	6	0.02	0.09	0.00	-0.02	0.06	0.01	0.08	-0.10	-0.03
3	6	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.08	-0.01	0.05	0.00	-0.01
4	6	-0.11	-0.04	0.02	0.06	-0.13	-0.02	0.02	-0.07	-0.01
5	6	0.04	0.03	-0.01	0.02	-0.09	-0.01	0.08	0.03	-0.01
6	6	0.15	-0.07	-0.04	-0.02	-0.03	0.01	-0.08	0.16	0.02
7	6	-0.02	-0.02	0.01	0.04	0.00	-0.02	-0.13	0.00	0.04
8	6	-0.12	-0.03	0.03	-0.05	0.15	0.02	-0.05	0.00	0.01
9	6	0.04	0.03	0.00	0.01	0.08	0.00	-0.02	0.02	0.01
10	6	0.00	-0.04	0.00	0.05	-0.10	-0.02	0.00	-0.05	0.00
11	6	-0.02	0.00	0.01	-0.05	0.10	0.02	-0.02	0.01	0.00
12	6	0.01	-0.01	-0.01	0.05	-0.10	-0.02	-0.02	-0.02	0.00
13	6	0.03	0.04	0.01	-0.05	0.06	0.02	-0.02	0.02	0.01
14	6	0.05	0.15	-0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.02	0.01	-0.01

15	6	-0.12	-0.10	0.03	-0.02	0.02	0.01	-0.02	0.01	0.01
16	6	0.09	-0.04	-0.03	-0.01	-0.05	-0.01	0.03	0.00	-0.01
17	7	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.00
18	8	-0.04	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.04	0.02	-0.02
19	8	0.00	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.08	0.02
20	1	-0.09	-0.03	0.01	-0.26	0.14	0.07	-0.05	0.04	0.02
21	1	0.11	0.09	0.00	-0.33	0.09	0.07	0.74	-0.17	-0.19
22	1	-0.06	0.07	-0.03	0.17	-0.26	-0.02	-0.25	0.22	0.06
23	1	-0.06	-0.04	0.02	0.31	-0.13	-0.06	0.10	-0.06	-0.03
24	1	-0.03	-0.01	0.00	0.06	0.29	-0.02	-0.06	-0.04	0.03
25	1	0.02	-0.02	0.04	-0.09	-0.31	0.00	-0.11	-0.15	0.01
26	1	0.38	0.57	0.00	-0.08	-0.16	0.02	0.03	0.01	0.01
27	1	-0.11	-0.15	0.04	-0.20	0.38	0.00	-0.09	0.14	0.00
28	1	0.53	-0.09	-0.10	0.16	-0.07	-0.02	0.27	-0.02	-0.05
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

49

50

51

		A			A			A		
Frequencies	--	1196.4093			1212.7035			1227.9315		
Red. masses	--	1.4579			1.4606			1.4687		
Frc consts	--	1.2295			1.2656			1.3047		
IR Inten	--	1.5621			18.8463			3.1784		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	0.05	-0.01	-0.03	0.00	0.01	0.02	0.02	0.00
2	6	0.02	0.04	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.02	-0.01
3	6	0.03	-0.06	-0.01	0.02	-0.02	-0.01	0.05	0.00	-0.01
4	6	-0.02	0.01	0.01	0.02	-0.05	-0.01	-0.01	0.03	0.00
5	6	-0.03	0.06	0.01	0.01	0.03	0.00	-0.05	-0.10	0.01
6	6	0.05	-0.03	-0.01	0.00	0.04	0.00	0.01	-0.07	-0.01
7	6	-0.03	-0.01	0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.06	0.01
8	6	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.04	0.01	-0.02	0.08	0.01
9	6	-0.01	0.05	0.00	-0.07	0.02	0.02	0.00	-0.02	0.00
10	6	-0.02	-0.04	0.00	-0.03	-0.06	0.00	0.04	0.03	-0.01
11	6	0.04	-0.01	-0.01	0.06	0.02	-0.01	-0.05	0.01	0.01
12	6	-0.06	0.00	0.02	0.03	-0.02	-0.01	-0.03	-0.02	0.00
13	6	0.03	-0.06	-0.01	0.04	0.05	0.00	0.01	0.01	0.00
14	6	-0.03	0.00	0.02	0.01	0.03	0.00	0.01	0.00	0.00
15	6	0.02	0.03	0.00	0.05	-0.06	-0.03	0.00	-0.01	-0.01
16	6	-0.01	-0.04	0.00	-0.05	0.03	0.02	-0.01	0.01	0.01
17	7	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
18	8	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01
19	8	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.02	-0.01
20	1	0.57	0.00	-0.13	-0.23	0.03	0.05	0.16	0.01	-0.03
21	1	0.03	0.04	0.00	0.03	0.00	-0.01	0.03	-0.03	0.01
22	1	-0.06	0.06	0.01	0.02	-0.12	0.00	-0.21	0.53	0.04
23	1	-0.35	-0.01	0.09	-0.22	-0.05	0.06	0.46	-0.01	-0.11
24	1	0.21	0.22	-0.06	0.26	0.30	-0.06	-0.13	-0.10	0.03
25	1	-0.39	-0.43	0.04	-0.02	-0.09	0.00	-0.21	-0.28	0.02
26	1	-0.10	-0.06	-0.01	0.06	0.13	-0.05	0.11	0.15	-0.03
27	1	-0.04	0.16	0.01	0.33	-0.63	-0.02	0.14	-0.30	-0.02
28	1	0.03	-0.04	-0.01	-0.35	0.06	0.06	-0.27	0.03	0.06
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

52

53

54

		A			A			A		
Frequencies	--	1240.2169			1244.7638			1255.3634		
Red. masses	--	1.7747			1.7360			7.6759		
Frc consts	--	1.6083			1.5848			7.1272		
IR Inten	--	127.5018			18.7826			260.7232		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.04	-0.01	-0.02	-0.05	0.00	-0.01	0.05	0.01
2	6	0.01	0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	0.01	-0.06	0.00
3	6	-0.09	-0.01	0.02	-0.03	0.03	0.01	0.14	-0.02	-0.04
4	6	-0.04	0.05	0.01	-0.03	-0.05	0.00	0.05	-0.08	-0.02
5	6	0.09	0.07	-0.01	-0.07	-0.04	0.01	-0.04	0.01	0.02

6	6	-0.05	0.04	0.01	0.03	-0.06	-0.01	-0.11	0.15	0.03
7	6	0.00	-0.01	-0.01	0.03	0.03	0.00	-0.06	-0.02	0.01
8	6	-0.02	0.04	0.01	0.06	-0.06	-0.01	0.01	-0.02	0.00
9	6	-0.06	-0.02	0.02	-0.04	-0.01	0.01	0.05	0.02	-0.01
10	6	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00
11	6	0.00	-0.03	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00
12	6	0.02	-0.04	-0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.02	0.02	0.01
13	6	0.08	0.09	-0.02	0.12	0.13	-0.03	-0.06	-0.04	0.01
14	6	-0.01	0.01	0.01	-0.04	0.03	0.02	0.01	0.00	0.00
15	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	-0.01
16	6	0.01	0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.00
17	7	0.06	-0.05	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.43	-0.22	-0.13
18	8	-0.03	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.01	-0.24	-0.10	0.15
19	8	-0.01	0.04	-0.01	-0.01	0.02	0.00	-0.07	0.24	-0.06
20	1	0.27	-0.08	-0.07	-0.25	-0.04	0.05	-0.40	0.11	0.10
21	1	0.04	0.01	-0.02	0.22	0.00	-0.05	0.13	-0.08	-0.05
22	1	0.19	-0.46	-0.03	-0.13	0.39	0.02	-0.18	0.25	0.10
23	1	0.34	-0.06	-0.09	-0.02	0.02	0.01	-0.28	0.03	0.06
24	1	-0.24	-0.39	0.07	0.16	0.21	-0.05	0.07	0.12	0.00
25	1	-0.18	-0.33	0.01	0.00	-0.07	-0.01	0.05	0.13	0.00
26	1	-0.16	-0.18	0.01	-0.45	-0.52	0.06	0.09	0.11	-0.02
27	1	0.08	-0.21	-0.02	-0.04	0.02	0.00	-0.06	0.16	0.02
28	1	0.10	0.02	-0.02	0.28	0.00	-0.07	-0.11	-0.01	0.02
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			55			56			57	
			A			A			A	
Frequencies	--	1286.3505			1293.1406			1361.9922		
Red. masses	--	1.9361			1.7705			2.9412		
Frc consts	--	1.8876			1.7444			3.2146		
IR Inten	--	45.7179			5.9328			33.3573		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.05	0.01
2	6	0.00	-0.05	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.05	0.08	-0.01
3	6	0.17	-0.01	-0.04	0.10	-0.03	-0.03	-0.01	-0.16	-0.01
4	6	0.04	0.07	-0.01	-0.04	0.00	0.01	-0.07	-0.08	0.01
5	6	-0.01	0.07	0.01	0.01	0.05	0.00	-0.07	0.17	0.02
6	6	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.02	-0.01	0.04	-0.05	-0.01
7	6	-0.04	-0.03	0.01	-0.04	-0.03	0.01	-0.02	0.00	0.01
8	6	-0.04	-0.06	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.08	0.08	-0.01
9	6	-0.14	-0.01	0.04	0.16	-0.04	-0.04	-0.03	0.13	0.01
10	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.00	0.05	-0.05	-0.01
11	6	0.03	-0.05	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.01
12	6	-0.03	0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.00
13	6	0.02	-0.04	-0.01	0.03	0.09	0.00	0.10	-0.09	-0.03
14	6	0.00	0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.09	-0.04	0.02
15	6	0.02	0.02	0.00	-0.06	-0.04	0.02	0.03	0.04	-0.01
16	6	0.01	0.04	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.06	0.00
17	7	-0.01	0.01	0.00	-0.03	0.01	0.01	-0.03	-0.04	0.03
18	8	0.01	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.01	0.03	0.02	-0.02
19	8	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.03	-0.01
20	1	-0.32	0.07	0.08	-0.36	0.04	0.09	-0.35	0.09	0.09
21	1	-0.62	0.00	0.15	-0.27	0.00	0.07	0.27	0.06	-0.06
22	1	-0.08	0.05	0.02	-0.05	-0.03	0.01	-0.08	0.12	0.01
23	1	0.26	-0.05	-0.06	-0.37	0.08	0.08	0.27	-0.08	-0.07
24	1	0.02	-0.08	-0.01	-0.26	-0.32	0.06	-0.26	-0.44	0.06
25	1	-0.11	-0.05	0.02	-0.23	-0.31	0.02	0.22	0.35	-0.02
26	1	-0.04	-0.05	0.01	-0.15	-0.19	0.03	-0.03	0.06	-0.01
27	1	0.06	-0.06	-0.03	-0.11	0.06	0.03	0.03	0.04	-0.01
28	1	0.51	0.00	-0.12	-0.40	0.01	0.09	-0.24	-0.04	0.06
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			58			59			60	
			A			A			A	
Frequencies	--	1393.2443			1408.6324			1428.4838		





24	1	0.00	-0.11	0.01	-0.23	-0.28	0.05	-0.16	-0.28	0.02
25	1	-0.20	-0.20	0.04	0.19	0.26	-0.02	0.08	-0.01	-0.01
26	1	0.33	0.49	-0.08	-0.06	-0.15	0.02	0.20	0.29	-0.04
27	1	-0.01	0.24	0.01	0.18	-0.40	-0.06	-0.09	0.25	0.03
28	1	0.25	0.02	-0.06	0.38	-0.08	-0.09	-0.12	0.06	0.03
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			64			65			66	
			A			A			A	
Frequencies	--	1472.7634			1495.5667			1513.6184		
Red. masses	--	2.3925			3.4355			4.7211		
Frc consts	--	3.0575			4.5274			6.3727		
IR Inten	--	15.8264			2.6439			69.5653		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	-0.02	0.01	0.07	-0.10	-0.02	0.16	-0.02	-0.04
2	6	0.04	-0.02	-0.01	-0.06	0.00	0.02	0.06	-0.06	-0.02
3	6	0.04	0.15	0.00	-0.04	0.10	0.02	-0.07	0.17	0.03
4	6	-0.03	-0.07	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.02	-0.13	-0.01
5	6	0.07	-0.03	-0.02	0.04	-0.12	-0.02	0.03	0.09	0.00
6	6	-0.03	0.07	0.01	-0.05	-0.02	0.01	0.00	-0.04	0.00
7	6	0.00	-0.08	0.00	0.06	-0.01	-0.02	-0.04	0.06	0.01
8	6	-0.08	-0.01	0.02	-0.07	-0.05	0.01	0.02	-0.15	-0.01
9	6	-0.03	0.10	0.01	-0.03	0.16	0.01	0.04	0.20	-0.01
10	6	-0.01	-0.05	0.00	0.12	-0.11	-0.03	0.12	0.02	-0.03
11	6	0.00	0.03	0.00	0.02	0.16	0.00	-0.16	-0.13	0.03
12	6	-0.03	-0.03	0.00	0.05	0.16	0.00	-0.09	-0.03	0.02
13	6	0.13	-0.02	-0.04	0.06	-0.11	-0.02	-0.04	0.07	0.02
14	6	-0.04	0.03	0.01	-0.05	-0.03	0.02	0.03	-0.09	-0.02
15	6	0.00	-0.07	0.00	0.07	0.00	-0.03	-0.11	0.23	0.04
16	6	0.07	0.00	-0.02	-0.10	-0.01	0.03	0.03	-0.14	-0.01
17	7	-0.03	-0.08	0.04	0.02	0.06	-0.03	0.01	0.00	0.00
18	8	0.03	0.02	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.03	-0.01	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
20	1	0.39	-0.07	-0.10	-0.31	-0.07	0.07	-0.15	0.02	0.04
21	1	-0.45	0.02	0.11	0.07	-0.01	-0.02	-0.27	-0.03	0.07
22	1	-0.14	0.22	0.04	0.03	0.10	0.00	0.04	-0.15	-0.01
23	1	0.14	-0.07	-0.04	-0.38	-0.07	0.08	0.09	0.04	-0.01
24	1	0.05	0.09	0.00	-0.38	-0.37	0.09	0.14	0.30	-0.03
25	1	0.18	0.26	-0.02	-0.29	-0.30	0.04	-0.09	-0.02	0.02
26	1	-0.12	-0.06	0.02	0.03	0.11	-0.03	0.10	-0.04	0.01
27	1	-0.15	0.24	0.04	0.06	0.06	-0.01	0.22	-0.55	-0.08
28	1	-0.42	0.05	0.11	0.12	-0.03	-0.03	-0.11	-0.16	0.03
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			67			68			69	
			A			A			A	
Frequencies	--	1533.3853			1566.5903			1619.3283		
Red. masses	--	3.2233			4.4631			5.9691		
Frc consts	--	4.4653			6.4535			9.2221		
IR Inten	--	6.0991			25.9547			141.3830		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.06	0.01	0.19	0.01	-0.04	-0.01	-0.04	0.00
2	6	0.00	-0.10	0.00	-0.12	-0.01	0.03	0.27	0.01	-0.07
3	6	0.10	0.02	-0.02	0.00	0.08	0.00	-0.21	-0.06	0.05
4	6	0.02	0.00	0.00	0.01	-0.09	-0.01	0.02	0.03	0.00
5	6	-0.11	-0.05	0.02	0.01	0.07	0.00	-0.15	-0.12	0.03
6	6	0.10	-0.06	-0.02	-0.07	-0.13	0.02	0.16	0.21	-0.04
7	6	-0.10	0.20	0.03	0.06	0.07	-0.01	-0.11	-0.08	0.03
8	6	0.01	-0.06	0.00	0.03	0.09	0.00	0.12	0.04	-0.03
9	6	-0.11	0.03	0.03	-0.15	-0.05	0.04	-0.20	-0.04	0.05
10	6	0.15	-0.03	-0.04	-0.05	-0.04	0.01	0.18	0.01	-0.04
11	6	-0.02	0.05	0.01	0.09	0.05	-0.02	-0.06	0.01	0.02
12	6	-0.08	-0.13	0.01	-0.11	0.01	0.03	0.10	0.10	-0.02
13	6	0.05	0.11	0.00	-0.07	-0.15	0.00	-0.14	-0.09	0.03
14	6	-0.04	-0.01	0.01	0.12	0.17	-0.03	0.07	0.07	-0.02



6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.06	0.05	0.04	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
15	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.03	-0.02
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.00
17	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	-0.01	0.00	0.06	0.51	0.03	0.00	-0.01	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.09	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
25	1	-0.02	0.01	0.01	0.66	-0.49	-0.21	-0.01	0.01	0.00
26	1	0.69	-0.54	-0.44	0.02	-0.01	-0.01	-0.09	0.07	0.06
27	1	-0.13	-0.06	0.04	-0.01	-0.01	0.00	-0.69	-0.34	0.24
28	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.57	-0.01
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			76			77			78	
			A			A			A	
Frequencies	--	3221.1083			3224.5735			3227.3541		
Red. masses	--	1.0924			1.0942			1.0963		
Frc consts	--	6.6781			6.7034			6.7278		
IR Inten	--	3.5835			1.1432			6.3478		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.00	-0.01	-0.06	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.07	0.00	0.00	-0.04	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.01	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.03	-0.02	-0.01
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.01	0.00	-0.06	-0.44	-0.03	0.09	0.72	0.04
21	1	0.00	0.02	0.00	0.09	0.82	0.03	0.06	0.51	0.02
22	1	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.08	0.04	-0.11	-0.05	0.03
23	1	0.10	0.97	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00
24	1	0.11	-0.09	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.01	0.00	0.00	0.23	-0.17	-0.07	-0.33	0.24	0.10
26	1	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
27	1	-0.11	-0.05	0.04	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.01
28	1	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00
29	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			79			80			81	
			A			A			A	
Frequencies	--	3233.3436			3262.0696			3282.7214		



**Table S29.** Cartesian coordinates of optimized structure for (13-C<sub>10</sub>O)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	2.634772	2.568746	-0.753323
2	6	0	0.227266	3.179610	-0.527289
3	6	0	1.275395	2.244696	-0.384013
4	6	0	-1.088171	2.833430	-0.194913
5	1	0	0.443923	4.170146	-0.917956
6	6	0	3.641741	1.645971	-0.625920
7	1	0	2.842107	3.564252	-1.136664
8	6	0	3.373618	0.318910	-0.119223
9	6	0	2.033160	-0.027681	0.259588
10	6	0	4.399759	-0.646862	0.012053
11	1	0	4.661257	1.898377	-0.905679
12	6	0	-1.416385	1.565079	0.327585
13	6	0	-0.375525	0.607266	0.518924
14	6	0	-2.883951	1.307282	0.639648
15	1	0	-1.878988	3.564014	-0.348233
16	6	0	0.974388	0.937438	0.132667
17	6	0	-0.604060	-0.731528	1.074838
18	6	0	1.768563	-1.347817	0.764017
19	6	0	-3.250756	1.238374	2.131926
20	8	0	-3.307628	0.034685	-0.062175
21	1	0	-3.468613	2.107181	0.170168
22	6	0	4.127796	-1.934054	0.507552
23	1	0	5.414562	-0.382445	-0.274676
24	6	0	0.427722	-1.662163	1.175998
25	6	0	2.822027	-2.285596	0.882103
26	1	0	4.932519	-2.656663	0.603717
27	1	0	0.237787	-2.625540	1.645123
28	1	0	2.615190	-3.279237	1.272101
29	1	0	-1.545535	-0.945564	1.573489
30	1	0	-4.326859	1.066364	2.264844
31	1	0	-3.008808	2.196145	2.607227
32	1	0	-2.704181	0.455562	2.665362
33	1	0	-4.279848	-0.076783	-0.021802
34	47	0	-1.744631	-1.451062	-0.928360

**Table S30. Vibrational frequencies for (13-C<sub>10</sub>O)**

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	37.6464			50.0526			83.0126		
Red. masses	--	9.0049			8.2853			4.0545		
Frc consts	--	0.0075			0.0122			0.0165		
IR Inten	--	0.0942			0.4131			0.0241		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.09	0.11	0.17	0.05	0.03	0.01	0.01	0.03	0.09
2	6	0.09	0.13	0.13	0.02	-0.04	-0.07	-0.02	0.00	-0.03
3	6	0.08	0.11	0.11	0.04	-0.01	-0.05	-0.01	0.01	0.02
4	6	0.07	0.12	0.05	0.03	-0.05	-0.06	-0.02	-0.02	-0.08
5	1	0.12	0.15	0.19	0.01	-0.04	-0.08	-0.01	0.00	-0.03
6	6	0.07	0.09	0.13	0.07	0.07	0.08	0.01	0.03	0.11
7	1	0.12	0.14	0.25	0.03	0.03	0.01	0.02	0.04	0.12
8	6	0.04	0.05	0.02	0.09	0.06	0.09	-0.01	0.01	0.05
9	6	0.02	0.05	-0.03	0.08	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00
10	6	0.01	0.02	-0.04	0.13	0.11	0.18	-0.02	0.00	0.02
11	1	0.09	0.09	0.17	0.08	0.10	0.14	0.02	0.05	0.16
12	6	0.04	0.09	-0.04	0.05	-0.05	-0.05	-0.02	-0.01	-0.06
13	6	0.03	0.08	-0.04	0.05	-0.05	-0.08	-0.02	0.00	-0.03
14	6	0.03	0.08	-0.12	0.07	-0.02	0.06	-0.01	0.01	0.00
15	1	0.09	0.13	0.05	0.02	-0.06	-0.05	-0.03	-0.03	-0.11
16	6	0.04	0.08	0.02	0.06	-0.02	-0.05	-0.02	0.00	0.00
17	6	0.00	0.07	-0.08	0.07	-0.07	-0.11	-0.03	0.00	-0.02
18	6	-0.01	0.02	-0.12	0.10	0.01	-0.01	-0.03	-0.01	-0.04
19	6	-0.05	0.08	-0.14	0.20	-0.04	0.10	0.07	0.28	0.03
20	8	0.04	0.09	-0.14	-0.04	0.01	0.07	0.00	-0.14	0.26
21	1	0.06	0.09	-0.14	0.05	0.01	0.13	-0.05	-0.09	-0.13
22	6	-0.02	-0.01	-0.14	0.14	0.11	0.18	-0.04	-0.02	-0.05
23	1	0.02	0.02	-0.01	0.14	0.15	0.26	-0.01	0.01	0.05
24	6	-0.02	0.03	-0.13	0.09	-0.04	-0.08	-0.03	-0.01	-0.03
25	6	-0.03	-0.01	-0.18	0.13	0.05	0.08	-0.04	-0.03	-0.07
26	1	-0.04	-0.04	-0.19	0.17	0.14	0.25	-0.05	-0.04	-0.07
27	1	-0.03	0.03	-0.15	0.09	-0.05	-0.11	-0.04	-0.01	-0.04
28	1	-0.06	-0.03	-0.25	0.14	0.05	0.07	-0.06	-0.04	-0.11
29	1	0.01	0.09	-0.05	0.07	-0.09	-0.12	-0.03	0.02	-0.02
30	1	-0.05	0.09	-0.19	0.21	-0.02	0.19	0.09	0.26	0.13
31	1	-0.06	0.07	-0.12	0.27	-0.05	0.09	0.07	0.37	-0.16
32	1	-0.08	0.07	-0.11	0.23	-0.06	0.03	0.15	0.39	0.14
33	1	0.03	0.15	-0.23	-0.04	0.05	0.14	0.01	-0.20	0.39
34	47	-0.06	-0.16	0.08	-0.17	-0.01	-0.05	0.03	-0.02	-0.03
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	101.3472			123.2503			144.3548		
Red. masses	--	6.6544			4.4309			5.2652		
Frc consts	--	0.0403			0.0397			0.0646		
IR Inten	--	0.5893			1.6365			5.6245		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	-0.03	-0.13	0.01	0.00	0.02	0.03	0.04	0.08
2	6	0.04	0.11	0.16	0.03	0.00	0.14	0.00	0.00	-0.10
3	6	0.00	0.04	0.00	0.02	0.00	0.08	0.02	0.04	0.05
4	6	0.05	0.14	0.23	0.02	-0.03	0.08	-0.01	-0.01	-0.13
5	1	0.06	0.13	0.23	0.02	0.03	0.20	-0.01	-0.03	-0.18
6	6	-0.04	-0.07	-0.19	0.00	-0.01	-0.09	0.01	0.02	0.04
7	1	-0.01	-0.05	-0.18	-0.01	0.01	0.03	0.04	0.04	0.09
8	6	-0.04	-0.03	-0.08	0.03	-0.01	-0.07	0.00	0.01	0.02
9	6	-0.03	0.01	-0.03	0.05	-0.01	0.03	0.02	0.06	0.14

10	6	-0.04	-0.01	0.02	0.04	-0.01	-0.13	-0.05	-0.07	-0.17
11	1	-0.05	-0.11	-0.28	-0.02	-0.02	-0.16	0.01	0.00	0.02
12	6	0.02	0.10	0.11	0.01	-0.07	-0.01	0.01	0.03	-0.02
13	6	-0.01	0.05	0.00	0.03	-0.05	0.03	0.02	0.06	0.07
14	6	0.03	0.07	0.09	-0.03	-0.03	-0.12	0.04	-0.01	0.04
15	1	0.07	0.20	0.35	0.02	-0.03	0.09	-0.03	-0.05	-0.23
16	6	-0.02	0.03	-0.02	0.03	-0.02	0.05	0.03	0.07	0.12
17	6	-0.05	0.04	-0.06	0.06	-0.05	0.05	0.00	0.08	0.09
18	6	-0.04	0.04	0.05	0.09	0.01	0.09	0.01	0.09	0.19
19	6	0.04	0.07	0.10	-0.17	0.16	-0.15	0.14	-0.11	0.06
20	8	0.09	0.04	0.10	-0.01	-0.11	0.03	0.04	0.01	-0.02
21	1	0.00	0.04	0.09	0.03	-0.08	-0.28	-0.02	-0.01	0.12
22	6	-0.03	0.05	0.17	0.08	0.02	-0.04	-0.07	-0.06	-0.16
23	1	-0.04	-0.04	-0.01	0.01	-0.02	-0.23	-0.08	-0.14	-0.33
24	6	-0.05	0.04	0.00	0.10	0.00	0.12	0.01	0.11	0.21
25	6	-0.03	0.07	0.17	0.11	0.03	0.08	-0.03	0.03	0.07
26	1	-0.02	0.07	0.27	0.09	0.02	-0.07	-0.10	-0.12	-0.31
27	1	-0.07	0.05	0.00	0.12	0.02	0.16	0.00	0.12	0.23
28	1	-0.03	0.10	0.26	0.15	0.05	0.15	-0.03	0.05	0.11
29	1	-0.07	0.04	-0.10	0.05	-0.06	0.04	-0.04	0.06	0.00
30	1	0.05	0.00	0.11	-0.20	0.26	-0.23	0.17	-0.25	0.13
31	1	-0.02	0.09	0.08	-0.14	0.19	-0.22	0.05	-0.09	0.07
32	1	0.10	0.12	0.11	-0.28	0.16	-0.02	0.27	-0.05	0.01
33	1	0.08	0.04	0.08	0.00	-0.14	0.07	0.04	0.01	-0.02
34	47	0.01	-0.09	-0.09	-0.05	0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.06

		7	8	9
		A	A	A
Frequencies	--	181.8390	201.5594	232.7015
Red. masses	--	4.0554	1.2196	3.3225
Frc consts	--	0.0790	0.0292	0.1060
IR Inten	--	7.2093	3.2895	3.7713

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.05	0.13	0.00	0.01	0.04	-0.06	-0.01	0.05
2	6	0.02	0.06	0.14	-0.01	-0.01	0.00	-0.03	-0.06	-0.03
3	6	0.00	0.03	0.06	-0.01	0.00	0.01	-0.05	-0.06	0.02
4	6	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.04	0.00
5	1	0.05	0.12	0.30	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.08	-0.06
6	6	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.02	-0.04	0.02	0.03
7	1	0.05	0.09	0.27	0.00	0.03	0.07	-0.09	0.01	0.09
8	6	-0.04	-0.04	-0.11	-0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.00	-0.01
9	6	-0.03	-0.03	-0.10	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	0.02
10	6	-0.04	-0.04	-0.09	-0.01	0.00	-0.04	0.00	0.03	-0.07
11	1	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.03	-0.04	0.05	0.05
12	6	-0.03	-0.04	-0.16	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	0.04
13	6	-0.03	-0.04	-0.15	-0.01	-0.01	-0.02	-0.04	-0.06	0.02
14	6	-0.01	-0.06	-0.08	-0.01	0.03	0.01	-0.03	0.11	0.03
15	1	0.00	0.03	0.04	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.04	-0.01
16	6	-0.03	-0.03	-0.10	-0.01	-0.01	-0.01	-0.04	-0.06	0.02
17	6	-0.03	-0.02	-0.09	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.10	-0.02
18	6	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	0.04	-0.04	0.04
19	6	0.21	-0.06	-0.03	0.01	0.02	0.02	0.02	0.15	0.05
20	8	-0.07	-0.05	-0.04	-0.05	0.05	0.00	-0.08	0.21	-0.08
21	1	-0.06	-0.06	-0.01	0.02	0.06	0.04	0.04	0.19	0.08
22	6	-0.02	0.01	0.06	0.00	0.00	-0.01	0.06	0.04	-0.04
23	1	-0.05	-0.07	-0.13	-0.01	-0.01	-0.06	-0.02	0.06	-0.13
24	6	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.07	0.00
25	6	0.00	0.04	0.13	0.01	0.01	0.03	0.09	0.01	0.04
26	1	-0.01	0.03	0.13	0.01	0.01	-0.01	0.09	0.06	-0.06
27	1	0.00	0.05	0.10	0.01	0.00	0.03	0.04	-0.09	-0.02
28	1	0.01	0.09	0.26	0.02	0.02	0.06	0.15	0.01	0.07
29	1	-0.03	0.00	-0.07	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.13	-0.02
30	1	0.27	-0.26	0.15	-0.07	0.57	0.03	0.08	-0.19	0.10
31	1	0.11	0.02	-0.12	0.54	-0.17	0.15	-0.28	0.30	-0.09



32	1	0.45	0.09	-0.06	-0.39	-0.35	-0.11	0.31	0.41	0.14
33	1	-0.07	-0.04	0.00	-0.05	0.05	0.05	-0.10	0.30	-0.18
34	47	0.01	0.02	0.04	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.02	-0.01
			10			11			12	
			A			A			A	
Frequencies	--	239.0740			263.3892			289.7359		
Red. masses	--	3.6540			4.1526			4.8410		
Frc consts	--	0.1230			0.1697			0.2394		
IR Inten	--	3.7107			1.5258			3.6970		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	-0.05	-0.14	-0.04	-0.04	-0.09	-0.05	0.03	0.10
2	6	0.00	0.02	0.10	0.00	0.02	0.07	-0.01	0.00	0.03
3	6	-0.01	0.02	0.09	-0.04	-0.06	-0.15	-0.03	0.00	0.10
4	6	-0.01	-0.01	0.01	0.02	0.05	0.15	-0.02	-0.05	-0.10
5	1	0.01	0.02	0.10	0.03	0.07	0.21	0.01	-0.01	0.02
6	6	-0.06	-0.04	-0.13	0.00	0.04	0.11	-0.07	-0.01	-0.06
7	1	-0.11	-0.12	-0.34	-0.05	-0.04	-0.11	-0.05	0.07	0.20
8	6	0.00	0.04	0.10	0.01	0.03	0.10	-0.07	-0.04	-0.14
9	6	0.01	0.05	0.17	-0.01	-0.02	-0.04	-0.06	-0.08	-0.15
10	6	0.00	0.05	0.08	0.02	0.05	0.11	-0.01	0.07	0.07
11	1	-0.10	-0.10	-0.33	0.03	0.09	0.23	-0.08	-0.01	-0.07
12	6	-0.01	-0.04	-0.07	-0.01	-0.02	-0.04	0.04	0.00	0.03
13	6	-0.01	-0.01	0.05	-0.03	-0.06	-0.12	0.01	0.01	0.15
14	6	0.00	-0.02	-0.10	0.00	0.00	-0.02	0.07	0.01	-0.02
15	1	-0.02	-0.02	-0.01	0.05	0.13	0.36	-0.06	-0.12	-0.24
16	6	0.01	0.04	0.16	-0.04	-0.07	-0.17	-0.03	-0.03	0.02
17	6	-0.02	-0.04	-0.02	0.02	0.02	0.10	0.04	0.05	0.27
18	6	0.00	0.00	0.04	0.01	0.01	0.05	-0.04	-0.08	-0.14
19	6	0.20	0.05	-0.05	0.06	0.02	-0.01	0.11	0.05	-0.02
20	8	-0.06	-0.01	-0.07	-0.01	0.02	-0.05	0.14	0.01	-0.08
21	1	-0.01	-0.01	-0.07	0.00	0.01	0.00	0.05	-0.01	-0.03
22	6	0.00	0.01	-0.03	-0.02	-0.03	-0.12	0.03	0.08	0.11
23	1	0.00	0.06	0.07	0.04	0.10	0.22	0.02	0.15	0.24
24	6	-0.01	-0.04	-0.04	0.05	0.08	0.25	0.00	0.00	0.11
25	6	-0.01	-0.03	-0.10	-0.01	-0.04	-0.10	-0.01	-0.03	-0.11
26	1	-0.01	-0.01	-0.11	-0.04	-0.07	-0.25	0.08	0.16	0.30
27	1	-0.03	-0.08	-0.13	0.10	0.16	0.44	0.05	0.03	0.20
28	1	-0.03	-0.09	-0.25	-0.01	-0.06	-0.16	0.03	-0.04	-0.11
29	1	-0.03	-0.08	-0.06	0.03	0.07	0.15	0.07	0.07	0.33
30	1	0.20	0.20	0.14	0.07	0.04	0.05	0.10	0.17	0.05
31	1	0.42	0.03	-0.12	0.10	0.03	-0.04	0.24	0.04	-0.07
32	1	0.18	-0.01	-0.12	0.08	0.03	-0.01	0.05	0.02	-0.01
33	1	-0.07	0.03	-0.06	0.00	0.00	-0.02	0.14	-0.02	-0.16
34	47	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	-0.02
			13			14			15	
			A			A			A	
Frequencies	--	314.7867			331.8570			379.4854		
Red. masses	--	4.0425			1.2240			3.9782		
Frc consts	--	0.2360			0.0794			0.3375		
IR Inten	--	15.3781			125.9908			13.5679		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.08	0.00	-0.02	0.02	0.01	0.00	0.01	0.02	-0.06
2	6	-0.03	-0.01	-0.07	-0.01	0.00	0.01	-0.08	-0.03	-0.01
3	6	-0.07	-0.05	-0.09	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.10
4	6	0.02	0.04	0.09	-0.01	-0.02	0.00	-0.04	-0.06	0.13
5	1	-0.01	-0.04	-0.11	-0.03	0.00	0.01	-0.18	-0.02	-0.03
6	6	-0.05	0.05	0.11	0.02	0.00	-0.01	0.07	0.07	0.09
7	1	-0.09	0.00	-0.01	0.03	0.01	0.00	0.02	0.02	-0.06
8	6	-0.06	0.03	0.04	0.02	0.00	-0.01	0.08	0.01	-0.02
9	6	-0.04	-0.01	0.04	0.01	0.01	-0.02	0.05	0.05	-0.06
10	6	-0.06	0.01	-0.09	0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.10	-0.06
11	1	-0.03	0.09	0.22	0.02	0.00	-0.01	0.09	0.16	0.23
12	6	0.07	0.02	0.06	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.07	0.10

13	6	0.00	-0.03	0.02	0.02	0.00	0.00	0.07	0.03	0.14
14	6	0.10	-0.03	-0.04	-0.01	-0.04	0.02	-0.03	-0.10	-0.03
15	1	0.00	0.04	0.18	-0.01	-0.02	0.01	-0.07	-0.08	0.18
16	6	-0.03	-0.03	-0.01	0.02	0.01	-0.01	0.05	0.05	0.01
17	6	-0.03	-0.07	-0.06	0.00	0.02	0.01	0.05	0.04	0.11
18	6	-0.02	-0.02	0.04	0.00	0.02	-0.01	-0.01	0.06	-0.09
19	6	0.09	0.05	-0.06	0.00	0.02	0.03	0.07	0.08	0.00
20	8	0.27	-0.08	-0.03	-0.05	-0.05	0.04	-0.12	-0.01	-0.15
21	1	0.07	-0.10	-0.12	0.01	-0.03	0.01	0.03	-0.06	-0.03
22	6	-0.02	0.03	-0.04	-0.01	-0.01	0.01	-0.06	-0.06	0.06
23	1	-0.09	0.00	-0.21	0.02	-0.02	0.03	0.02	-0.21	-0.10
24	6	-0.05	-0.08	-0.08	0.00	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.09
25	6	0.01	0.03	0.10	-0.02	0.00	-0.01	-0.08	0.03	0.07
26	1	-0.01	0.03	-0.09	-0.02	-0.02	0.02	-0.09	-0.08	0.14
27	1	-0.07	-0.12	-0.17	0.01	0.02	0.02	0.05	-0.04	-0.17
28	1	0.06	0.05	0.17	-0.04	0.00	-0.01	-0.14	0.09	0.18
29	1	-0.04	-0.09	-0.09	-0.01	0.03	0.00	0.06	0.05	0.13
30	1	0.07	0.20	-0.04	0.00	0.04	0.03	0.08	0.16	0.17
31	1	0.24	0.03	-0.10	0.02	0.04	-0.02	0.17	0.17	-0.22
32	1	-0.01	-0.01	-0.05	-0.02	0.03	0.05	0.11	0.18	0.11
33	1	0.24	0.08	-0.52	-0.15	0.49	-0.84	-0.08	-0.22	0.30
34	47	-0.02	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01

		16			17			18		
		A			A			A		
Frequencies	--	402.5946			410.2571			458.7892		
Red. masses	--	4.7849			6.4616			3.6996		
Frc consts	--	0.4569			0.6408			0.4588		
IR Inten	--	5.0442			2.0304			1.6303		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.11	-0.04	0.11	0.04	-0.08	-0.09	0.01	-0.13
2	6	0.05	0.03	-0.02	0.21	-0.10	0.02	-0.02	0.13	0.16
3	6	-0.02	-0.06	-0.06	0.15	-0.10	-0.04	-0.05	0.06	0.00
4	6	0.01	0.17	0.02	0.22	-0.10	0.02	-0.04	-0.05	-0.15
5	1	0.15	0.01	-0.02	0.21	-0.09	0.05	0.00	0.21	0.38
6	6	0.00	-0.05	0.14	0.09	0.08	0.02	-0.06	0.06	0.08
7	1	0.01	-0.12	-0.06	0.01	0.05	-0.09	-0.11	-0.06	-0.31
8	6	-0.03	-0.06	0.03	-0.10	0.12	-0.02	0.01	0.04	0.11
9	6	-0.04	-0.07	-0.01	-0.07	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.03
10	6	0.04	0.00	-0.09	-0.11	0.18	-0.08	-0.04	-0.05	-0.02
11	1	0.03	-0.02	0.29	0.14	-0.03	0.12	-0.06	0.09	0.07
12	6	-0.08	0.15	-0.01	0.09	-0.08	0.00	0.06	-0.05	-0.10
13	6	-0.06	0.14	0.13	0.03	-0.08	0.08	0.07	-0.02	0.02
14	6	-0.11	0.05	-0.09	0.06	0.00	-0.04	0.09	0.06	0.01
15	1	0.07	0.24	0.01	0.26	-0.06	0.02	-0.11	-0.15	-0.24
16	6	-0.04	-0.01	0.06	0.01	-0.05	0.02	0.01	0.00	-0.06
17	6	0.02	0.11	0.12	-0.09	-0.05	0.11	0.08	0.01	0.11
18	6	0.04	-0.10	-0.06	-0.15	0.01	-0.01	0.01	-0.04	-0.05
19	6	0.06	-0.07	-0.07	0.01	-0.06	-0.06	-0.03	-0.03	-0.04
20	8	-0.12	-0.08	0.08	-0.14	-0.01	0.08	0.01	0.08	0.10
21	1	-0.19	-0.01	-0.10	0.13	0.04	-0.05	0.14	0.10	0.03
22	6	0.16	0.03	0.00	-0.12	0.22	-0.04	-0.03	-0.06	-0.01
23	1	0.00	0.09	-0.18	-0.13	0.17	-0.11	-0.05	-0.12	-0.11
24	6	-0.02	0.01	-0.07	-0.13	-0.09	0.02	0.02	-0.07	-0.06
25	6	0.15	-0.01	0.02	-0.08	0.12	0.00	0.00	-0.03	0.11
26	1	0.19	0.07	0.04	-0.10	0.24	-0.03	-0.03	-0.07	-0.07
27	1	-0.11	0.00	-0.11	-0.07	-0.12	-0.02	0.02	-0.09	-0.11
28	1	0.24	0.01	0.11	0.04	0.11	0.04	-0.01	0.03	0.25
29	1	0.05	0.04	0.14	-0.12	0.01	0.09	0.10	0.03	0.14
30	1	0.09	-0.12	0.08	0.01	-0.15	-0.14	-0.04	-0.13	-0.23
31	1	0.13	-0.14	0.03	-0.10	-0.08	0.03	-0.18	-0.07	0.12
32	1	0.15	-0.14	-0.28	0.02	-0.07	-0.08	-0.07	-0.07	-0.05
33	1	-0.15	0.08	-0.12	-0.15	0.12	0.16	-0.01	0.20	0.02
34	47	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies	--	465.6855			472.2378			507.2626		
Red. masses	--	4.4817			4.1962			4.6789		
Frc consts	--	0.5726			0.5514			0.7093		
IR Inten	--	9.4133			4.0040			1.8841		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.12	-0.04	-0.10	-0.07	0.05	-0.15	0.06	0.04
2	6	0.07	-0.08	0.17	0.00	-0.07	0.00	-0.03	-0.11	0.01
3	6	0.04	-0.11	0.06	-0.08	-0.12	0.05	-0.06	-0.11	0.03
4	6	-0.02	-0.06	-0.13	0.01	0.02	0.02	-0.03	0.03	0.04
5	1	0.15	-0.03	0.34	0.09	-0.11	-0.04	0.07	-0.14	-0.01
6	6	0.10	-0.02	0.01	0.06	0.08	-0.04	-0.09	0.12	-0.04
7	1	-0.07	-0.15	-0.16	-0.24	-0.02	0.10	-0.27	0.10	0.10
8	6	0.09	0.03	0.08	0.15	0.04	-0.07	0.10	0.03	-0.03
9	6	0.03	0.01	-0.02	0.09	0.08	-0.05	0.13	-0.10	0.08
10	6	0.10	0.03	-0.04	0.08	-0.07	0.01	0.10	0.01	-0.06
11	1	0.08	0.00	-0.05	0.01	0.26	-0.06	-0.13	0.24	-0.09
12	6	-0.11	0.00	-0.05	-0.02	0.02	0.00	0.08	0.00	-0.04
13	6	-0.09	0.01	-0.02	-0.09	-0.07	0.06	0.11	0.06	-0.08
14	6	-0.08	-0.04	0.09	-0.02	0.13	-0.08	0.11	-0.05	0.01
15	1	0.04	-0.02	-0.26	0.04	0.05	0.03	-0.01	0.05	0.11
16	6	-0.04	-0.09	-0.04	-0.06	-0.07	0.05	0.13	-0.11	0.02
17	6	-0.10	0.07	0.05	-0.08	-0.09	0.03	-0.07	0.20	-0.02
18	6	-0.03	0.06	-0.04	0.02	0.15	-0.05	-0.05	-0.11	0.05
19	6	-0.04	0.05	0.16	0.04	-0.05	-0.12	0.00	-0.01	-0.02
20	8	0.12	-0.02	-0.11	0.04	0.04	0.13	-0.06	0.01	0.01
21	1	-0.17	-0.08	0.13	-0.02	0.11	-0.12	0.16	0.00	0.03
22	6	0.02	0.04	-0.07	-0.06	-0.05	0.04	0.00	0.04	0.03
23	1	0.08	0.00	-0.12	0.13	-0.19	0.07	0.12	-0.08	-0.08
24	6	-0.08	0.07	-0.09	0.06	0.08	-0.02	-0.18	0.08	-0.01
25	6	0.02	0.12	0.03	-0.09	0.07	-0.02	0.00	-0.09	0.00
26	1	-0.04	-0.03	-0.12	-0.14	-0.12	0.10	0.01	0.05	0.07
27	1	-0.07	0.06	-0.12	0.23	0.03	-0.04	-0.35	0.13	0.02
28	1	0.06	0.14	0.11	-0.22	0.09	-0.02	0.11	-0.14	-0.06
29	1	-0.08	0.05	0.08	-0.04	-0.23	0.04	-0.11	0.35	-0.05
30	1	-0.05	0.17	0.23	0.07	-0.18	-0.11	-0.02	-0.01	-0.16
31	1	0.06	0.10	0.00	0.01	-0.16	0.10	-0.08	0.01	-0.03
32	1	-0.08	0.09	0.26	0.12	-0.15	-0.36	-0.08	0.02	0.10
33	1	0.14	-0.22	-0.15	0.03	0.11	-0.02	-0.06	0.09	0.14
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
		22			23			24		
		A			A			A		
Frequencies	--	528.8334			534.6999			538.9702		
Red. masses	--	3.8372			3.8104			5.3562		
Frc consts	--	0.6323			0.6419			0.9167		
IR Inten	--	2.8964			1.1457			2.1681		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	-0.01	0.03	-0.03	-0.02	-0.16	0.03	0.18	-0.01
2	6	-0.01	0.00	-0.03	0.02	-0.05	0.00	0.10	-0.08	0.02
3	6	-0.01	0.00	-0.06	0.04	0.02	0.15	0.06	-0.08	-0.04
4	6	0.01	0.01	0.05	0.01	0.01	0.00	0.04	0.04	-0.03
5	1	-0.01	0.04	0.05	0.01	-0.12	-0.21	0.17	-0.07	0.09
6	6	0.01	-0.03	0.01	0.03	0.10	0.12	0.05	0.20	-0.13
7	1	0.05	-0.01	0.04	-0.14	-0.11	-0.46	-0.13	0.26	0.09
8	6	0.00	0.01	0.06	-0.01	0.04	-0.01	-0.03	0.15	-0.04
9	6	0.02	0.10	0.21	-0.01	-0.05	-0.11	0.04	-0.02	0.06
10	6	-0.04	-0.06	-0.17	-0.06	-0.02	-0.07	-0.18	0.00	0.05
11	1	0.01	-0.06	-0.03	0.05	0.12	0.18	0.05	0.16	-0.16
12	6	-0.03	-0.05	-0.13	-0.02	0.01	-0.02	-0.11	0.08	0.00
13	6	-0.04	-0.08	-0.15	-0.02	0.00	-0.06	-0.06	0.04	0.01
14	6	-0.01	0.02	0.02	-0.02	0.00	0.01	-0.16	0.04	0.00
15	1	0.04	0.09	0.27	0.03	0.02	-0.05	0.14	0.14	-0.06

16	6	-0.02	0.02	0.01	0.04	0.05	0.20	-0.02	-0.08	-0.05
17	6	0.04	0.01	0.13	-0.02	-0.04	-0.17	0.11	0.02	0.05
18	6	-0.02	-0.01	-0.10	-0.01	-0.08	-0.15	0.11	-0.09	0.06
19	6	-0.02	0.00	0.04	-0.02	0.01	0.03	-0.02	0.01	0.06
20	8	0.05	0.03	0.01	0.03	0.00	-0.01	0.03	-0.04	-0.03
21	1	-0.03	0.02	0.06	-0.05	-0.01	0.03	-0.24	-0.02	-0.01
22	6	0.04	0.07	0.20	-0.01	0.01	0.06	-0.10	-0.07	0.04
23	1	-0.11	-0.15	-0.47	-0.05	-0.05	-0.06	-0.15	-0.12	0.06
24	6	0.02	-0.02	-0.01	0.05	0.07	0.14	0.10	-0.03	-0.07
25	6	-0.03	-0.01	-0.13	-0.01	-0.07	0.00	-0.01	-0.24	0.09
26	1	0.07	0.14	0.41	0.05	0.10	0.21	0.03	0.05	-0.08
27	1	0.08	0.00	0.06	0.11	0.22	0.46	0.02	-0.06	-0.17
28	1	-0.08	-0.06	-0.26	0.03	-0.01	0.16	-0.04	-0.25	0.04
29	1	0.10	0.07	0.25	0.00	-0.01	-0.12	0.14	-0.08	0.08
30	1	-0.03	-0.01	-0.01	-0.02	0.02	0.04	0.01	0.02	0.24
31	1	-0.05	0.00	0.06	0.00	0.01	0.01	0.10	-0.01	0.04
32	1	-0.05	-0.01	0.06	-0.02	0.01	0.04	0.08	-0.01	-0.07
33	1	0.05	0.01	-0.07	0.03	-0.04	-0.04	0.04	-0.15	-0.15
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		25			26			27		
		A			A			A		
Frequencies	--	577.1563			580.4569			587.5134		
Red. masses	--	5.0085			3.3597			5.3393		
Frc consts	--	0.9830			0.6669			1.0859		
IR Inten	--	3.1110			9.2724			4.4853		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.13	0.12	-0.11	0.06	0.05	0.05	-0.07	0.04	0.02
2	6	-0.10	0.06	0.05	-0.07	-0.07	-0.10	0.09	0.22	-0.14
3	6	0.04	0.11	-0.10	0.05	0.08	0.13	-0.05	0.07	0.04
4	6	-0.11	-0.05	0.00	-0.03	-0.02	0.11	0.10	0.22	-0.06
5	1	-0.24	0.13	0.15	-0.18	-0.14	-0.33	0.22	0.16	-0.23
6	6	0.13	0.09	-0.01	0.02	-0.03	-0.09	-0.01	0.08	-0.05
7	1	0.19	0.14	-0.06	0.05	-0.02	-0.15	-0.13	0.03	-0.05
8	6	0.11	-0.02	-0.10	0.04	0.05	0.17	0.12	0.04	0.03
9	6	0.04	-0.05	0.01	-0.01	-0.03	-0.03	0.04	0.00	-0.03
10	6	0.15	-0.02	-0.04	0.03	0.02	0.03	0.11	-0.04	0.00
11	1	0.18	0.11	0.15	-0.04	-0.18	-0.43	-0.07	0.16	-0.20
12	6	-0.09	-0.03	0.00	-0.03	-0.02	0.05	0.08	0.11	-0.05
13	6	-0.03	-0.02	0.06	-0.02	-0.04	-0.12	-0.06	-0.10	0.00
14	6	-0.11	0.09	-0.04	-0.05	0.04	-0.04	0.05	-0.08	0.06
15	1	-0.14	-0.08	-0.02	-0.03	0.00	0.15	0.07	0.20	0.00
16	6	0.04	0.05	0.00	0.01	0.01	-0.03	-0.03	-0.02	0.01
17	6	-0.15	-0.08	0.02	0.02	0.05	0.10	-0.11	-0.18	0.12
18	6	-0.08	-0.10	0.11	-0.05	-0.08	-0.14	-0.05	-0.04	-0.04
19	6	0.01	-0.01	-0.03	0.03	-0.01	-0.06	-0.04	0.01	0.11
20	8	0.09	0.05	0.05	0.03	0.03	0.04	-0.09	-0.11	-0.09
21	1	-0.13	0.07	-0.06	-0.03	0.04	-0.07	-0.03	-0.11	0.10
22	6	0.06	0.01	0.03	-0.01	-0.02	-0.09	0.00	-0.04	-0.01
23	1	0.18	-0.06	0.01	0.01	-0.01	-0.06	0.14	-0.13	-0.01
24	6	-0.17	-0.14	0.11	-0.05	-0.03	-0.03	-0.05	-0.16	0.06
25	6	0.02	-0.06	-0.04	0.03	0.04	0.12	-0.01	0.01	0.04
26	1	0.04	0.00	0.11	-0.04	-0.07	-0.21	-0.05	-0.10	-0.02
27	1	-0.23	-0.15	0.07	-0.03	0.04	0.13	0.08	-0.17	0.09
28	1	0.13	-0.12	-0.14	0.10	0.11	0.35	0.02	0.03	0.12
29	1	-0.22	-0.04	-0.10	0.07	0.14	0.23	-0.09	-0.16	0.18
30	1	0.04	-0.07	0.11	0.05	-0.06	0.03	-0.07	0.11	0.03
31	1	0.07	-0.08	0.07	0.06	-0.05	0.00	-0.04	0.08	-0.03
32	1	0.12	-0.07	-0.23	0.10	-0.04	-0.18	-0.14	0.07	0.31
33	1	0.10	-0.07	-0.08	0.03	0.01	-0.03	-0.10	-0.06	0.03
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		28			29			30		
		A			A			A		
Frequencies	--	647.5176			694.2219			708.4315		

Red. masses	--	4.0017		4.7836		6.0238				
Frc consts	--	0.9886		1.3583		1.7812				
IR Inten	--	8.4683		10.1366		1.5525				
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z			
1	6	0.00	0.01	0.02	-0.09	-0.03	0.00	-0.12	0.19	-0.05
2	6	0.01	0.03	0.06	0.04	-0.02	0.01	0.16	0.00	-0.03
3	6	0.00	0.01	0.02	0.01	0.00	0.05	0.05	0.06	-0.02
4	6	0.00	-0.04	-0.08	0.02	0.03	-0.02	0.27	-0.21	0.03
5	1	0.00	0.02	0.02	0.09	-0.06	-0.07	0.03	0.02	-0.04
6	6	0.00	0.00	-0.02	-0.14	-0.04	0.07	-0.26	0.06	0.04
7	1	-0.02	-0.02	-0.08	-0.04	-0.06	-0.05	-0.10	0.18	-0.06
8	6	0.04	0.06	0.17	0.04	-0.07	-0.02	-0.04	-0.07	0.02
9	6	0.01	0.01	0.04	0.05	-0.06	0.00	-0.05	0.04	0.00
10	6	-0.01	-0.03	-0.10	0.11	0.03	-0.04	0.08	-0.11	0.02
11	1	-0.04	-0.07	-0.23	-0.15	0.03	0.09	-0.27	0.09	0.05
12	6	0.05	0.10	0.30	-0.02	0.04	0.03	-0.01	-0.10	0.03
13	6	0.00	0.01	0.04	0.13	0.02	-0.07	-0.02	-0.03	-0.01
14	6	0.00	0.00	-0.02	-0.19	0.11	-0.03	-0.11	0.07	-0.02
15	1	-0.07	-0.18	-0.45	0.06	0.05	-0.11	0.31	-0.18	0.04
16	6	-0.04	-0.07	-0.21	0.13	-0.01	-0.03	-0.02	0.07	-0.02
17	6	-0.04	-0.04	-0.11	0.24	0.00	-0.02	-0.09	0.06	0.02
18	6	-0.01	-0.02	-0.03	-0.07	0.02	0.06	-0.01	0.06	-0.01
19	6	0.03	0.00	-0.07	-0.04	0.02	0.06	-0.02	0.00	0.04
20	8	-0.05	-0.05	-0.01	0.01	-0.04	-0.02	0.02	-0.03	-0.01
21	1	0.04	-0.02	-0.10	-0.21	0.04	-0.11	-0.08	0.05	-0.08
22	6	0.03	0.03	0.11	-0.15	0.12	0.00	0.19	-0.18	0.03
23	1	-0.08	-0.15	-0.44	0.15	-0.06	0.01	0.05	0.00	0.01
24	6	0.01	0.04	0.08	0.04	-0.18	0.04	-0.07	0.09	-0.03
25	6	-0.01	-0.03	-0.08	-0.13	0.12	-0.03	0.07	0.05	-0.03
26	1	0.03	0.04	0.12	-0.28	0.00	0.07	0.12	-0.25	0.06
27	1	0.03	0.10	0.22	0.01	-0.19	0.00	-0.08	0.09	-0.05
28	1	-0.03	-0.08	-0.21	-0.09	0.09	-0.09	-0.07	0.08	-0.03
29	1	-0.02	-0.01	-0.06	0.18	0.09	-0.11	-0.10	0.08	-0.01
30	1	0.05	-0.01	0.06	0.01	-0.07	0.35	0.01	-0.06	0.23
31	1	0.10	-0.01	-0.08	0.09	-0.06	0.14	0.06	-0.05	0.10
32	1	0.10	0.01	-0.13	0.17	-0.04	-0.24	0.11	-0.03	-0.14
33	1	-0.05	0.01	0.06	0.02	-0.19	-0.15	0.03	-0.15	-0.09
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			31			32			33	
			A			A			A	
Frequencies	--	718.7619		778.3822		783.4023				
Red. masses	--	3.7832		2.9490		4.6072				
Frc consts	--	1.1516		1.0527		1.6659				
IR Inten	--	9.9568		22.8377		2.3658				
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.04	-0.10	-0.01	-0.05	-0.04	-0.04	-0.19	0.09
2	6	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.06	0.06	0.00	0.23	-0.10
3	6	0.04	0.08	0.23	-0.03	-0.01	-0.06	-0.09	0.08	0.00
4	6	-0.01	0.02	0.03	0.01	-0.03	-0.05	0.12	-0.13	0.04
5	1	-0.08	-0.14	-0.41	-0.01	0.04	0.00	-0.13	0.27	-0.06
6	6	0.06	0.05	0.10	0.02	-0.01	-0.02	0.07	-0.05	0.01
7	1	-0.07	-0.13	-0.36	0.04	0.07	0.28	0.00	-0.23	0.01
8	6	-0.03	-0.02	-0.12	-0.02	-0.03	-0.13	0.05	0.05	0.00
9	6	-0.02	0.00	-0.05	0.04	0.07	0.19	0.07	-0.02	-0.05
10	6	-0.03	-0.01	-0.02	0.00	0.02	0.03	-0.03	0.09	-0.03
11	1	0.07	0.06	0.16	0.08	0.13	0.32	0.01	0.04	-0.10
12	6	0.02	0.03	0.08	0.03	0.05	0.17	0.04	-0.12	-0.01
13	6	-0.06	-0.07	-0.17	-0.04	-0.07	-0.16	0.03	-0.06	0.04
14	6	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.09	0.10	-0.02
15	1	-0.05	-0.07	-0.18	-0.05	-0.15	-0.30	-0.01	-0.24	0.20
16	6	-0.04	-0.03	-0.07	0.00	0.02	0.07	0.00	0.00	-0.01
17	6	0.00	0.05	0.14	-0.01	0.01	0.01	-0.05	0.06	0.00
18	6	0.06	0.08	0.21	-0.02	-0.04	-0.10	0.06	-0.05	0.03

19	6	0.02	-0.01	-0.03	0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.02	0.06
20	8	-0.02	-0.01	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	-0.04	-0.02
21	1	0.05	-0.01	0.00	0.03	0.00	-0.05	-0.03	0.07	-0.13
22	6	0.03	0.00	0.05	-0.02	-0.02	-0.09	-0.09	0.12	-0.01
23	1	-0.02	0.03	0.05	0.07	0.13	0.38	-0.02	-0.02	-0.06
24	6	-0.03	-0.01	-0.09	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.14	-0.05
25	6	0.01	-0.03	-0.04	0.01	-0.01	0.04	0.00	-0.18	0.05
26	1	0.05	0.01	0.01	0.04	0.08	0.14	0.02	0.24	-0.11
27	1	-0.09	-0.12	-0.34	0.03	0.10	0.19	-0.09	0.13	-0.11
28	1	-0.06	-0.14	-0.34	0.09	0.10	0.38	0.13	-0.23	-0.01
29	1	0.01	0.05	0.14	0.09	0.13	0.23	-0.08	0.00	-0.08
30	1	0.01	0.01	-0.05	0.02	-0.01	0.06	0.01	-0.09	0.23
31	1	0.01	0.01	-0.06	0.05	-0.01	-0.02	0.03	-0.07	0.20
32	1	0.00	0.01	0.01	0.05	0.00	-0.07	0.12	-0.05	-0.19
33	1	-0.02	0.05	0.04	-0.02	0.00	0.01	0.02	-0.16	-0.09
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			34				35			36
			A				A			A
Frequencies	--		814.8808				826.9829			831.1974
Red. masses	--		1.2779				3.7043			4.6765
Frc consts	--		0.5000				1.4926			1.9036
IR Inten	--		15.3612				24.0525			6.4597

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.02	-0.03	0.05	0.05	-0.04	-0.07	-0.16	0.08
2	6	0.01	0.02	0.02	-0.08	-0.07	0.04	0.00	0.00	-0.01
3	6	-0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.08	-0.05	0.01
4	6	0.01	0.00	0.00	-0.09	0.03	-0.01	0.04	-0.06	0.00
5	1	-0.01	-0.03	-0.11	-0.06	-0.06	0.08	0.02	0.03	0.07
6	6	-0.01	-0.01	-0.05	-0.01	-0.02	-0.01	0.21	0.11	-0.08
7	1	0.05	0.10	0.31	0.10	0.08	0.05	-0.33	-0.10	0.08
8	6	0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.01	0.01	0.09	-0.01
9	6	-0.01	-0.01	-0.04	0.02	-0.02	-0.02	-0.12	0.10	-0.04
10	6	0.02	0.02	0.05	-0.05	0.00	0.03	-0.08	-0.06	0.03
11	1	0.05	0.11	0.29	0.04	-0.09	0.13	0.14	0.28	-0.18
12	6	-0.01	0.00	0.01	0.08	0.02	-0.01	0.02	-0.03	0.01
13	6	-0.01	-0.01	-0.02	0.03	-0.05	-0.03	0.05	0.05	-0.03
14	6	-0.01	-0.03	-0.01	0.10	0.27	0.04	0.02	0.07	0.01
15	1	-0.01	-0.05	-0.11	-0.10	0.04	0.07	0.03	-0.05	0.08
16	6	0.00	0.02	0.05	0.06	-0.03	0.04	-0.09	0.09	0.01
17	6	0.00	0.00	-0.01	-0.07	-0.03	0.04	0.16	0.10	-0.06
18	6	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.03	-0.03	-0.08	-0.01	0.02
19	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.08	0.09	0.00	0.02	0.02
20	8	0.01	0.02	0.01	-0.06	-0.20	-0.11	-0.01	-0.05	-0.03
21	1	-0.01	-0.01	0.02	0.08	0.11	-0.18	0.04	0.04	-0.07
22	6	0.01	0.02	0.05	0.03	-0.01	0.02	0.13	-0.11	0.02
23	1	-0.07	-0.14	-0.40	-0.10	0.00	-0.14	-0.10	0.00	-0.01
24	6	-0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.05	-0.02	-0.11	-0.19	0.09
25	6	0.01	0.02	0.06	0.02	0.03	0.01	0.06	0.07	-0.04
26	1	-0.10	-0.17	-0.48	0.02	-0.06	-0.18	0.14	-0.11	0.01
27	1	0.04	0.09	0.21	0.08	0.03	-0.02	-0.31	-0.14	0.13
28	1	-0.08	-0.15	-0.40	-0.06	-0.01	-0.13	-0.01	0.09	-0.03
29	1	0.07	0.07	0.15	-0.09	-0.07	-0.02	0.02	0.31	-0.24
30	1	0.00	0.01	0.02	0.02	-0.17	-0.09	0.01	-0.06	0.00
31	1	0.01	0.01	-0.05	-0.15	-0.13	0.59	-0.03	-0.04	0.17
32	1	0.00	0.01	0.03	0.04	-0.13	-0.26	0.02	-0.04	-0.09
33	1	0.01	0.01	0.00	-0.07	-0.14	-0.02	-0.02	-0.05	-0.01
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			37				38			39
			A				A			A
Frequencies	--		861.2047				879.1312			885.1121
Red. masses	--		1.6768				2.5129			4.4705
Frc consts	--		0.7327				1.1443			2.0635
IR Inten	--		0.5220				1.7700			12.9576

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.03	0.06	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.04	-0.03
2	6	0.00	-0.01	-0.05	-0.01	-0.01	-0.04	0.01	-0.03	-0.01
3	6	-0.01	-0.02	-0.06	0.01	0.02	0.09	0.02	0.05	0.03
4	6	-0.01	-0.03	-0.08	-0.01	0.01	0.01	0.07	-0.10	0.03
5	1	0.10	0.21	0.58	0.01	0.00	0.02	-0.14	0.00	0.01
6	6	0.00	0.01	0.05	0.02	0.03	0.06	-0.01	0.01	0.01
7	1	-0.06	-0.12	-0.37	-0.08	-0.13	-0.35	0.02	0.03	-0.05
8	6	0.00	-0.01	-0.03	-0.04	-0.04	-0.14	0.05	-0.05	-0.03
9	6	-0.01	-0.02	-0.05	0.04	0.05	0.14	-0.09	0.01	0.07
10	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.03	0.22	0.02	-0.03
11	1	-0.07	-0.12	-0.33	-0.01	-0.02	-0.09	-0.01	0.06	0.06
12	6	0.01	0.03	0.10	0.01	-0.03	-0.06	-0.11	0.00	-0.01
13	6	-0.03	-0.03	-0.07	0.06	0.05	0.12	-0.18	0.07	0.05
14	6	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.15	0.09	0.09
15	1	0.05	0.12	0.32	0.00	0.05	0.14	0.14	-0.02	0.12
16	6	0.01	0.04	0.10	0.00	-0.05	-0.15	-0.20	0.04	-0.04
17	6	0.00	0.00	0.01	-0.04	-0.04	-0.06	0.14	0.05	-0.06
18	6	0.01	0.01	0.03	-0.01	-0.01	-0.06	-0.02	-0.09	0.00
19	6	0.01	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.02	0.08	0.03	-0.04
20	8	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.09	-0.05
21	1	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.03	0.06	0.04	0.13
22	6	-0.01	0.01	0.02	0.02	-0.01	0.00	-0.11	0.07	0.00
23	1	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.06	0.12	0.27	-0.13	-0.03
24	6	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	-0.03	-0.05	0.06	0.00	-0.01
25	6	0.00	0.00	0.03	0.02	0.04	0.06	-0.05	-0.07	0.05
26	1	-0.04	-0.05	-0.14	-0.01	-0.08	-0.22	-0.22	-0.06	-0.03
27	1	0.03	0.06	0.12	0.12	0.23	0.53	-0.09	0.07	0.07
28	1	-0.04	-0.08	-0.22	-0.06	-0.07	-0.26	0.06	-0.12	-0.02
29	1	0.07	0.05	0.15	0.15	0.15	0.36	0.17	-0.12	-0.06
30	1	0.01	0.01	0.02	0.00	-0.03	0.06	0.02	0.02	-0.52
31	1	0.04	0.01	-0.08	0.00	-0.02	0.06	-0.19	0.01	0.14
32	1	0.02	0.02	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.17	-0.04	0.10
33	1	-0.01	0.02	0.02	0.01	-0.03	-0.03	-0.05	0.06	0.06
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

40

A

Frequencies -- 906.3820  
 Red. masses -- 1.6178  
 Frc consts -- 0.7831  
 IR Inten -- 2.1533

41

A

922.9599  
 1.6107  
 0.8084  
 166.6267

42

A

976.5245  
 1.4190  
 0.7973  
 1.6537

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.02	-0.05	-0.01	-0.02	-0.06	0.00	-0.01	-0.04
2	6	-0.01	-0.02	-0.07	-0.01	-0.02	-0.05	0.00	0.01	0.00
3	6	0.02	0.04	0.11	0.01	0.03	0.07	0.00	0.00	0.01
4	6	-0.01	-0.01	-0.06	-0.01	-0.02	-0.05	0.00	-0.01	-0.02
5	1	0.07	0.12	0.34	0.03	0.07	0.21	0.00	0.00	-0.03
6	6	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.06	0.00	0.00	-0.01
7	1	0.01	0.02	0.08	0.06	0.11	0.33	0.04	0.08	0.22
8	6	-0.01	-0.01	-0.04	0.02	0.03	0.08	0.01	0.02	0.05
9	6	0.02	0.02	0.06	-0.01	-0.01	-0.05	0.00	-0.01	0.00
10	6	-0.01	0.02	0.05	-0.01	-0.01	-0.04	-0.03	-0.04	-0.11
11	1	0.06	0.11	0.33	0.06	0.11	0.32	0.00	-0.01	-0.02
12	6	0.01	0.01	0.04	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
13	6	0.01	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	0.00	-0.01	0.00
14	6	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
15	1	0.06	0.18	0.46	0.06	0.14	0.37	0.01	0.03	0.10
16	6	0.00	-0.02	-0.05	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00
17	6	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.02	-0.03	0.01	0.01	0.02
18	6	-0.02	-0.02	-0.08	0.02	0.03	0.09	-0.01	-0.02	-0.05
19	6	-0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
20	8	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.02

22	6	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.01
23	1	-0.06	-0.07	-0.22	0.02	0.03	0.09	0.11	0.20	0.59
24	6	0.01	0.03	0.07	-0.02	-0.03	-0.07	0.00	0.01	0.01
25	6	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.05	0.02	0.05	0.11
26	1	-0.02	-0.06	-0.19	0.06	0.12	0.33	0.01	0.02	0.08
27	1	-0.06	-0.16	-0.34	0.06	0.15	0.33	0.00	0.00	-0.01
28	1	0.02	0.04	0.09	0.03	0.05	0.13	-0.12	-0.20	-0.59
29	1	-0.17	-0.13	-0.35	0.17	0.14	0.39	-0.10	-0.10	-0.24
30	1	0.00	0.03	0.06	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.01
31	1	0.05	0.01	-0.10	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.05
32	1	0.03	0.03	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.00
33	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies	--	983.6789			1005.5229			1018.3761		
Red. masses	--	4.1044			2.5337			1.3843		
Frc consts	--	2.3399			1.5094			0.8459		
IR Inten	--	3.3581			11.7777			2.0686		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.07	-0.12	0.05	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.03
2	6	0.02	-0.15	0.06	0.01	0.10	-0.01	-0.02	-0.03	-0.11
3	6	0.05	0.06	-0.04	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.02
4	6	0.03	-0.02	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.02	0.03	0.11
5	1	-0.07	-0.16	0.00	-0.04	0.06	-0.17	0.09	0.20	0.55
6	6	-0.11	-0.07	0.05	0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.02	-0.05
7	1	0.11	-0.17	0.06	-0.02	0.01	-0.02	-0.03	-0.07	-0.19
8	6	0.06	0.05	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.02
9	6	0.09	0.17	-0.07	0.06	-0.08	0.02	0.01	0.00	0.00
10	6	-0.06	0.02	-0.01	-0.08	-0.01	0.04	-0.01	0.00	0.00
11	1	-0.19	0.13	-0.04	0.02	-0.03	-0.03	0.05	0.11	0.32
12	6	-0.08	0.04	0.00	-0.06	-0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.02
13	6	0.04	0.08	-0.04	0.01	-0.02	0.02	0.00	-0.01	0.00
14	6	-0.01	0.05	0.08	-0.06	0.10	0.18	-0.01	0.01	0.00
15	1	0.23	0.18	-0.07	-0.03	-0.05	0.09	-0.08	-0.22	-0.57
16	6	0.09	0.18	-0.08	0.06	-0.09	0.02	0.01	0.00	0.00
17	6	-0.12	-0.07	0.04	0.02	0.02	0.01	0.00	0.01	0.01
18	6	0.04	0.04	-0.04	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
19	6	0.07	-0.01	-0.07	0.08	-0.04	-0.14	0.01	0.00	0.00
20	8	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.15	0.04	0.24	-0.23	0.12	0.42	-0.04	0.01	0.05
22	6	0.00	0.03	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.02
23	1	-0.03	-0.01	0.07	-0.12	-0.03	-0.09	-0.01	0.00	0.02
24	6	-0.04	-0.11	0.06	-0.02	0.00	-0.04	-0.01	-0.01	-0.01
25	6	0.02	-0.14	0.06	0.01	0.09	-0.05	0.01	0.01	0.02
26	1	0.20	0.23	-0.13	0.00	-0.02	0.04	0.03	0.05	0.12
27	1	0.12	-0.19	-0.02	0.02	0.13	0.23	0.02	0.03	0.08
28	1	0.01	-0.17	0.00	0.01	0.14	0.05	-0.02	-0.03	-0.10
29	1	-0.15	0.12	0.08	-0.05	-0.05	-0.17	-0.05	-0.04	-0.11
30	1	0.02	0.08	-0.33	0.02	0.16	-0.37	0.00	0.01	-0.08
31	1	-0.07	0.04	-0.11	-0.03	0.09	-0.34	-0.03	0.01	0.01
32	1	-0.12	0.02	0.15	-0.10	0.07	0.17	-0.04	-0.01	0.04
33	1	0.00	-0.08	-0.04	0.01	-0.25	-0.13	0.00	-0.03	-0.02
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		46			47			48		
		A			A			A		
Frequencies	--	1027.7886			1040.0786			1050.7047		
Red. masses	--	1.3029			1.3964			1.4321		
Frc consts	--	0.8109			0.8900			0.9315		
IR Inten	--	13.5796			2.3422			1.0010		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.03	-0.09	-0.01	-0.02	-0.07
2	6	0.00	0.01	-0.03	-0.01	-0.02	-0.05	0.00	-0.01	-0.03



3	6	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.03	0.00	0.01	0.02
4	6	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.01	0.04	0.00	0.00	0.02
5	1	0.00	0.07	0.10	0.05	0.09	0.25	0.02	0.05	0.12
6	6	0.01	0.01	0.00	0.01	0.02	0.08	0.02	0.03	0.08
7	1	-0.01	0.03	0.08	0.10	0.16	0.47	0.06	0.12	0.35
8	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03
9	6	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.02	-0.02	-0.03	-0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.03	0.08
11	1	0.01	0.00	-0.04	-0.08	-0.15	-0.42	-0.08	-0.13	-0.40
12	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
13	6	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.02	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
15	1	-0.02	-0.06	-0.08	-0.03	-0.07	-0.19	-0.01	-0.03	-0.07
16	6	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.03	-0.02	-0.08	0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01
18	6	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01
19	6	0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
20	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.06	0.02	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
22	6	0.01	0.01	0.03	0.02	0.03	0.07	-0.02	-0.03	-0.10
23	1	0.02	0.06	0.17	0.03	0.06	0.17	-0.08	-0.15	-0.41
24	6	0.03	0.04	0.08	-0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.01	0.02
25	6	0.01	0.03	-0.01	-0.01	-0.02	-0.05	0.01	0.02	0.05
26	1	-0.06	-0.09	-0.16	-0.07	-0.13	-0.41	0.09	0.18	0.52
27	1	-0.10	-0.23	-0.53	0.03	0.08	0.17	-0.01	-0.04	-0.09
28	1	0.02	0.02	-0.02	0.05	0.10	0.28	-0.05	-0.09	-0.28
29	1	0.26	0.27	0.59	-0.06	-0.06	-0.14	0.02	0.03	0.06
30	1	0.01	0.00	-0.12	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03
31	1	-0.04	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.02
32	1	-0.05	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.01	0.01
33	1	0.00	-0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

49

50

51

		A			A			A		
Frequencies	--	1068.4960			1095.5712			1117.1723		
Red. masses	--	2.3492			1.9689			2.2124		
Frc consts	--	1.5802			1.3924			1.6269		
IR Inten	--	17.6899			35.9352			7.4419		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
2	6	0.00	-0.04	0.01	0.03	0.03	-0.01	0.04	0.02	-0.02
3	6	-0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.03	0.01	0.03	-0.01	0.00
4	6	-0.03	0.05	0.01	-0.04	0.03	-0.02	-0.03	0.04	0.01
5	1	0.13	-0.06	0.03	0.20	-0.02	-0.04	0.20	-0.01	-0.02
6	6	0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
7	1	-0.05	0.03	0.02	-0.04	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01
8	6	-0.04	0.00	0.01	-0.05	0.02	0.00	0.01	0.01	0.00
9	6	-0.09	0.05	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.01	0.01	-0.01
10	6	0.11	0.05	-0.04	0.09	0.09	-0.05	-0.02	-0.02	0.01
11	1	0.04	-0.07	0.00	0.04	-0.08	0.02	-0.04	0.04	-0.01
12	6	0.09	-0.03	-0.06	0.01	-0.02	0.04	-0.05	-0.07	-0.02
13	6	0.06	-0.05	0.02	0.06	-0.05	0.00	-0.02	0.02	0.00
14	6	0.00	0.11	0.12	-0.08	-0.06	-0.01	0.03	-0.12	0.21
15	1	-0.08	-0.03	-0.10	-0.09	0.00	0.07	-0.04	0.02	-0.09
16	6	-0.05	0.04	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.02	-0.01
17	6	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
18	6	-0.02	0.02	0.00	-0.03	0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.00
19	6	-0.09	-0.08	-0.09	0.09	0.06	0.01	-0.04	0.12	-0.12
20	8	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.04	0.01	0.00	0.02	-0.02
21	1	0.06	0.17	0.15	-0.15	-0.07	0.05	0.20	-0.17	-0.06
22	6	0.02	-0.02	0.00	0.07	-0.06	0.01	0.00	0.01	0.00
23	1	0.07	0.17	-0.09	0.00	0.38	-0.13	0.00	-0.07	0.02
24	6	0.01	0.03	0.00	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.01

25	6	-0.04	-0.09	0.04	-0.08	-0.09	0.05	0.01	0.01	0.00
26	1	0.01	-0.05	0.04	0.07	-0.08	0.02	0.02	0.03	-0.01
27	1	0.00	0.01	-0.07	0.05	0.01	0.00	-0.07	0.01	-0.01
28	1	-0.15	-0.08	0.04	-0.38	-0.03	0.08	0.06	0.00	-0.01
29	1	0.04	0.10	0.09	-0.02	0.05	-0.06	0.06	-0.11	0.07
30	1	-0.04	0.13	0.46	0.04	-0.08	-0.43	0.06	-0.24	0.12
31	1	0.27	0.06	-0.53	-0.20	-0.03	0.31	0.09	-0.13	0.29
32	1	0.21	0.18	-0.02	-0.16	-0.12	-0.01	0.23	-0.08	-0.70
33	1	-0.01	-0.07	-0.03	0.03	-0.29	-0.17	0.01	-0.03	0.00
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		52		53		54
		A		A		A
Frequencies	--	1133.8733		1136.7162		1186.3141
Red. masses	--	1.9653		2.7142		1.5916
Frc consts	--	1.4887		2.0663		1.3198
IR Inten	--	20.5682		0.5452		4.2028

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.04	0.01	0.07	0.07	-0.04	0.00	0.05	-0.02
2	6	-0.03	0.03	-0.01	0.03	0.04	-0.02	-0.01	0.04	-0.01
3	6	0.02	0.02	-0.01	-0.03	-0.05	0.02	-0.05	-0.05	0.02
4	6	0.05	-0.05	0.02	-0.03	0.01	0.00	0.03	-0.04	0.01
5	1	-0.31	0.11	0.02	0.23	-0.01	-0.04	-0.07	0.05	-0.01
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.07	0.04	0.04	-0.01	0.00
7	1	0.06	-0.06	0.01	0.38	0.00	-0.07	-0.34	0.14	0.02
8	6	-0.01	0.04	-0.01	0.07	0.05	-0.03	-0.03	-0.03	0.02
9	6	0.08	-0.07	0.01	0.12	0.11	-0.06	0.00	-0.01	0.00
10	6	0.00	0.09	-0.03	-0.04	0.00	0.01	0.03	0.00	0.00
11	1	-0.02	0.05	-0.01	-0.04	-0.28	0.10	0.17	-0.39	0.10
12	6	-0.09	0.03	-0.01	-0.02	-0.03	0.01	-0.02	0.02	-0.01
13	6	-0.06	0.08	-0.02	-0.07	-0.07	0.05	0.02	0.09	-0.03
14	6	0.07	0.01	0.01	0.02	0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.02
15	1	0.10	0.00	-0.04	-0.14	-0.09	0.07	-0.03	-0.11	0.04
16	6	0.06	-0.05	0.01	-0.09	-0.11	0.05	-0.02	-0.03	0.01
17	6	0.01	-0.01	0.00	0.08	0.07	-0.07	-0.07	0.03	0.01
18	6	-0.02	0.01	0.00	0.04	0.06	-0.04	0.06	0.04	-0.02
19	6	-0.04	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.02
20	8	0.01	-0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01
21	1	0.08	-0.03	-0.07	0.04	0.02	-0.03	0.00	-0.04	0.00
22	6	0.08	-0.07	0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.03	0.02	0.00
23	1	-0.11	0.43	-0.13	0.00	-0.13	0.05	0.05	-0.05	0.01
24	6	0.00	-0.03	0.01	-0.07	-0.08	0.06	0.03	-0.08	0.01
25	6	-0.09	0.00	0.02	-0.01	-0.03	0.02	0.01	-0.03	0.01
26	1	0.09	-0.07	0.01	0.26	0.25	-0.13	-0.04	0.02	0.00
27	1	0.04	-0.05	0.00	-0.36	-0.05	0.01	0.52	-0.20	0.00
28	1	-0.51	0.10	0.06	-0.21	0.01	0.02	-0.01	-0.02	0.01
29	1	0.07	-0.13	0.06	0.04	0.39	-0.02	-0.24	0.44	-0.12
30	1	-0.02	0.00	0.18	0.00	0.01	0.06	0.01	-0.04	0.03
31	1	0.08	-0.01	-0.06	0.02	0.00	-0.04	0.02	-0.02	0.04
32	1	0.08	0.04	-0.06	0.01	0.02	0.04	0.02	0.00	-0.07
33	1	-0.03	0.36	0.21	-0.01	0.08	0.05	0.00	0.05	0.03
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		55		56		57
		A		A		A
Frequencies	--	1200.7286		1215.9177		1230.3410
Red. masses	--	1.3479		1.5973		1.2605
Frc consts	--	1.1450		1.3913		1.1242
IR Inten	--	17.7084		7.4482		8.6906

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	-0.04	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00
2	6	0.06	0.02	-0.02	0.06	0.05	-0.03	0.00	0.00	0.00
3	6	0.03	0.01	-0.01	0.05	-0.03	0.00	0.02	0.01	-0.01
4	6	-0.07	-0.02	0.02	-0.07	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.00
5	1	0.34	-0.05	-0.05	0.47	-0.05	-0.06	-0.06	0.01	0.00

6	6	-0.04	0.03	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.01
7	1	0.35	-0.12	-0.02	-0.40	0.10	0.04	0.23	-0.06	-0.02
8	6	0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.05	0.02	0.03	-0.03	0.01
9	6	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.06	-0.07	0.03
10	6	0.00	0.03	-0.01	0.00	-0.03	0.01	0.00	-0.02	0.01
11	1	-0.16	0.37	-0.10	0.05	-0.08	0.02	-0.13	0.39	-0.11
12	6	-0.05	-0.01	0.01	-0.09	-0.07	0.04	0.03	0.02	-0.01
13	6	0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.03	-0.01
14	6	0.01	0.02	-0.01	0.01	0.05	-0.03	0.00	-0.01	0.00
15	1	-0.22	-0.15	0.10	-0.25	-0.17	0.10	-0.08	-0.08	0.05
16	6	-0.01	-0.01	0.01	0.06	0.06	-0.03	-0.03	-0.03	0.02
17	6	-0.03	0.03	0.00	0.01	-0.03	0.01	-0.01	0.01	0.00
18	6	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.01	-0.03	0.02	0.00
19	6	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.00	0.00
20	8	0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.03	-0.02	-0.01	0.01	0.01
21	1	-0.01	-0.01	-0.03	-0.02	0.02	-0.04	0.06	0.03	0.00
22	6	-0.04	-0.04	0.02	0.02	0.03	-0.02	0.02	0.03	-0.01
23	1	-0.05	0.16	-0.05	0.03	-0.13	0.04	0.08	-0.27	0.08
24	6	0.03	-0.02	-0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.02	0.00	-0.01
25	6	0.04	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00
26	1	-0.26	-0.27	0.14	0.25	0.27	-0.14	0.39	0.40	-0.21
27	1	0.28	-0.07	-0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.30	-0.07	-0.03
28	1	0.19	-0.03	-0.02	-0.07	0.00	0.01	-0.32	0.08	0.04
29	1	-0.12	0.27	-0.07	0.06	-0.19	0.05	-0.04	0.09	-0.03
30	1	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.06	-0.02	0.00	-0.01	0.02
31	1	0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.03	-0.05	0.02	-0.01	0.00
32	1	0.00	0.01	0.03	-0.03	0.01	0.11	0.01	0.00	-0.01
33	1	-0.01	0.20	0.12	-0.02	0.37	0.21	0.01	-0.21	-0.12
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

58

59

60

A

A

A

Frequencies	--	1243.5573			1262.4183			1268.4110		
Red. masses	--	1.6264			1.4718			1.9256		
Frc consts	--	1.4818			1.3820			1.8253		
IR Inten	--	26.9623			12.3886			8.1261		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.02	0.06	-0.02
2	6	0.01	0.03	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.03	0.01
3	6	0.08	-0.04	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.12	0.00	0.02
4	6	-0.03	0.00	0.01	-0.02	0.04	-0.01	0.04	-0.06	0.01
5	1	0.11	0.01	-0.02	0.05	0.01	-0.01	0.29	-0.11	-0.01
6	6	-0.03	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.01
7	1	-0.09	-0.01	0.02	-0.10	0.04	0.00	0.10	0.05	-0.04
8	6	-0.02	0.07	-0.02	0.02	-0.06	0.02	0.07	-0.12	0.03
9	6	0.02	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.08	0.02	-0.02
10	6	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.01
11	1	-0.01	-0.09	0.03	0.00	0.07	-0.03	0.02	0.06	-0.03
12	6	0.01	-0.03	0.02	-0.11	-0.09	0.05	0.04	0.07	-0.03
13	6	-0.07	0.12	-0.04	-0.02	-0.05	0.03	-0.03	0.07	-0.02
14	6	0.04	0.01	-0.03	0.05	0.01	-0.03	0.02	-0.01	0.00
15	1	-0.27	-0.23	0.13	0.36	0.43	-0.21	-0.16	-0.26	0.13
16	6	0.02	0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.02	0.00
17	6	-0.03	-0.01	0.01	0.02	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00
18	6	0.07	-0.03	0.00	-0.03	0.02	0.00	-0.10	0.04	0.00
19	6	-0.01	-0.03	0.02	0.00	-0.02	0.02	-0.01	0.00	0.00
20	8	-0.03	0.02	0.03	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.01
21	1	0.37	0.23	-0.07	0.46	0.24	-0.14	-0.01	-0.01	0.03
22	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
23	1	0.03	-0.05	0.01	-0.10	0.21	-0.05	-0.22	0.50	-0.13
24	6	0.00	-0.04	0.02	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01
25	6	0.00	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.01
26	1	-0.16	-0.17	0.09	0.04	0.05	-0.03	0.08	0.09	-0.05
27	1	-0.12	-0.02	0.03	0.19	-0.03	-0.03	0.13	-0.04	-0.01

28	1	-0.12	0.05	0.00	0.11	-0.04	-0.01	0.35	-0.12	-0.03
29	1	0.02	-0.20	0.05	-0.06	0.25	-0.07	0.14	-0.33	0.08
30	1	-0.01	0.03	0.04	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.03
31	1	0.03	0.02	-0.07	0.02	0.01	-0.04	0.02	0.00	-0.02
32	1	0.02	0.03	0.07	0.01	0.02	0.08	0.03	0.00	-0.04
33	1	0.03	-0.56	-0.32	0.02	-0.26	-0.15	0.01	-0.21	-0.13
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			61			62			63	
			A			A			A	
Frequencies	--	1286.8576			1291.3156			1354.3265		
Red. masses	--	1.9324			1.6717			2.0892		
Frc consts	--	1.8854			1.6424			2.2577		
IR Inten	--	8.3322			25.1083			7.8539		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.04	-0.03	0.02
2	6	0.01	0.03	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.03	-0.07	0.02
3	6	0.16	-0.05	-0.01	-0.09	0.01	0.01	0.02	0.12	-0.05
4	6	-0.03	0.03	-0.01	0.02	-0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.00
5	1	-0.53	0.18	0.03	0.27	-0.08	-0.02	0.21	-0.12	0.00
6	6	-0.05	-0.03	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01
7	1	-0.30	0.04	0.04	0.41	-0.11	-0.04	-0.27	0.03	0.04
8	6	0.02	0.05	-0.02	-0.02	0.14	-0.04	0.06	0.03	-0.02
9	6	-0.01	0.07	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.05	-0.07	0.01
10	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.01	-0.04	0.04	0.00
11	1	-0.07	0.00	0.01	0.12	-0.42	0.12	0.09	-0.29	0.08
12	6	0.02	0.02	-0.01	-0.03	-0.02	0.01	0.01	0.06	-0.02
13	6	-0.05	-0.03	0.02	0.02	0.04	-0.02	-0.07	-0.10	0.06
14	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.03	-0.06
15	1	-0.19	-0.13	0.07	0.14	0.10	-0.06	-0.12	-0.11	0.08
16	6	0.02	-0.06	0.02	0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.07	-0.02
17	6	0.05	0.03	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.01
18	6	-0.14	0.04	0.02	-0.12	-0.01	0.03	-0.04	-0.07	0.03
19	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.05	0.04	-0.01
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
21	1	-0.04	-0.03	0.02	0.10	0.06	-0.03	-0.19	0.15	0.57
22	6	0.03	-0.03	0.01	0.05	-0.04	0.00	0.01	-0.03	0.01
23	1	-0.01	0.01	0.00	0.17	-0.39	0.10	-0.03	0.00	0.01
24	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.01	0.04	0.02	-0.02
25	6	-0.01	-0.04	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.02
26	1	0.08	0.00	-0.01	0.06	-0.05	0.00	0.01	-0.02	0.01
27	1	0.33	-0.06	-0.04	0.37	-0.05	-0.05	0.14	0.00	-0.02
28	1	0.52	-0.18	-0.04	0.19	-0.06	-0.01	-0.20	0.09	0.01
29	1	0.07	0.00	-0.01	0.08	-0.21	0.04	-0.07	0.28	-0.08
30	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.12	0.12
31	1	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.11	-0.04	0.08
32	1	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.05	0.02	-0.13
33	1	0.00	-0.05	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.14	-0.08
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			64			65			66	
			A			A			A	
Frequencies	--	1358.1944			1378.8483			1411.7642		
Red. masses	--	1.3472			4.2053			2.7359		
Frc consts	--	1.4642			4.7106			3.2127		
IR Inten	--	1.4465			5.0140			27.8552		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.01	-0.01	0.01	-0.03	0.01	0.03	0.00	-0.01
2	6	-0.01	0.03	-0.01	0.16	0.01	-0.03	0.02	-0.02	0.00
3	6	-0.01	-0.05	0.02	-0.02	0.10	-0.03	0.02	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.12	0.06	-0.03	0.03	-0.01
5	1	-0.08	0.05	0.00	-0.16	0.09	-0.01	-0.11	0.02	0.01
6	6	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.05	-0.03	0.02
7	1	0.11	-0.01	-0.02	-0.28	0.04	0.04	-0.22	0.06	0.02
8	6	-0.03	-0.01	0.01	0.07	-0.03	0.00	0.16	0.02	-0.04

9	6	-0.02	0.03	-0.01	-0.07	-0.03	0.02	0.02	-0.10	0.03
10	6	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.11	-0.04	-0.07	0.07	-0.01
11	1	-0.04	0.12	-0.04	0.05	-0.20	0.06	-0.02	-0.15	0.06
12	6	-0.02	-0.02	0.02	-0.16	0.16	-0.03	0.12	-0.06	0.00
13	6	0.04	0.04	-0.02	0.22	-0.02	-0.04	0.03	0.05	-0.03
14	6	0.01	-0.03	-0.08	0.10	0.00	-0.02	-0.16	-0.02	0.03
15	1	0.06	0.07	-0.01	0.06	0.07	-0.01	0.02	0.09	-0.04
16	6	0.01	-0.03	0.01	-0.06	-0.11	0.05	-0.16	0.06	0.01
17	6	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.05	0.02	0.00	0.03	-0.01
18	6	0.02	0.04	-0.02	-0.02	0.16	-0.05	-0.01	0.00	0.00
19	6	-0.02	0.05	0.00	-0.03	-0.01	0.02	0.06	0.00	-0.01
20	8	0.02	-0.04	0.00	-0.02	0.02	0.01	0.03	-0.04	-0.02
21	1	0.05	0.50	0.76	0.10	-0.08	-0.15	0.39	0.36	-0.03
22	6	-0.01	0.01	0.00	-0.07	-0.07	0.04	-0.04	-0.05	0.02
23	1	0.02	-0.02	0.00	0.11	-0.25	0.06	-0.07	0.07	-0.01
24	6	-0.02	-0.01	0.01	-0.03	0.00	0.01	-0.05	0.00	0.01
25	6	0.00	-0.02	0.01	0.12	-0.05	-0.01	0.08	0.01	-0.02
26	1	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.03	-0.04	0.02
27	1	-0.08	0.01	0.01	-0.43	0.11	0.05	0.24	-0.08	-0.02
28	1	0.09	-0.04	0.00	-0.02	-0.01	0.01	-0.21	0.08	0.01
29	1	0.02	-0.13	0.02	0.09	-0.29	0.10	0.10	-0.28	0.06
30	1	0.00	-0.10	0.07	-0.02	0.00	0.00	0.03	0.06	-0.01
31	1	0.01	0.00	0.07	0.10	-0.01	-0.05	-0.23	0.07	0.00
32	1	0.01	-0.04	-0.15	0.08	0.04	-0.01	-0.15	-0.12	0.01
33	1	0.00	0.10	0.07	0.01	-0.27	-0.16	-0.01	0.31	0.18
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		67			68			69		
		A			A			A		
Frequencies	--	1424.4754			1438.6439			1445.8354		
Red. masses	--	7.1232			1.8053			2.3473		
Frc consts	--	8.5160			2.2015			2.8910		
IR Inten	--	6.0212			4.2987			10.9245		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	0.06	-0.01	-0.07	0.00	0.01	-0.01	0.02	-0.01
2	6	-0.16	0.02	0.02	0.04	-0.04	0.01	0.03	0.00	0.00
3	6	-0.03	-0.01	0.01	0.00	0.08	-0.03	0.01	0.10	-0.03
4	6	0.11	0.03	-0.03	0.00	-0.02	0.01	-0.05	-0.05	0.03
5	1	0.32	-0.11	-0.02	-0.03	-0.02	0.01	0.17	-0.04	-0.02
6	6	0.06	-0.09	0.02	0.03	0.01	-0.01	0.03	-0.07	0.02
7	1	-0.03	0.07	-0.02	0.12	-0.05	0.00	-0.20	0.07	0.01
8	6	0.15	-0.06	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00
9	6	-0.28	0.05	0.04	-0.04	0.06	-0.01	-0.02	0.13	-0.04
10	6	-0.04	0.18	-0.05	0.03	-0.05	0.01	0.00	-0.07	0.02
11	1	0.00	0.12	-0.04	0.08	-0.13	0.03	-0.05	0.18	-0.05
12	6	0.04	-0.03	0.00	-0.02	0.10	-0.04	0.01	0.03	-0.01
13	6	-0.22	-0.06	0.07	0.00	-0.02	0.01	0.04	-0.03	0.00
14	6	-0.02	-0.01	0.01	-0.09	-0.04	0.04	-0.01	0.00	0.00
15	1	0.04	-0.06	0.01	-0.17	-0.18	0.09	0.14	0.14	-0.06
16	6	0.35	-0.07	-0.04	0.05	-0.07	0.02	-0.01	-0.12	0.04
17	6	-0.05	0.16	-0.05	-0.02	-0.01	0.01	-0.06	0.13	-0.03
18	6	-0.05	0.15	-0.05	-0.01	-0.04	0.01	0.02	-0.12	0.04
19	6	0.01	0.00	0.00	0.05	0.00	-0.05	-0.01	0.00	0.08
20	8	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
21	1	0.05	0.04	0.00	0.57	0.35	-0.13	0.03	0.02	-0.02
22	6	-0.12	-0.08	0.05	0.00	0.00	0.00	0.03	0.07	-0.03
23	1	0.09	-0.22	0.06	-0.04	0.16	-0.05	-0.06	0.10	-0.02
24	6	0.07	-0.11	0.02	0.08	-0.01	-0.02	0.00	-0.04	0.02
25	6	0.23	-0.09	-0.02	-0.04	0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00
26	1	-0.12	-0.07	0.05	0.11	0.12	-0.06	-0.12	-0.07	0.05
27	1	-0.18	-0.05	0.08	-0.23	0.08	0.03	0.32	-0.13	-0.01
28	1	-0.35	0.06	0.05	0.10	-0.01	-0.01	-0.24	0.06	0.03
29	1	0.07	-0.17	0.05	-0.10	0.16	-0.05	0.13	-0.38	0.11
30	1	0.00	0.01	-0.02	0.06	0.03	0.19	-0.04	-0.04	-0.29

31	1	-0.03	0.03	-0.03	-0.20	-0.04	0.16	0.07	0.17	-0.32
32	1	-0.01	-0.03	-0.04	-0.18	-0.02	0.16	0.09	-0.15	-0.28
33	1	0.00	0.03	0.02	0.00	0.11	0.07	0.00	0.02	0.02
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			70			71			72	
			A			A			A	
Frequencies	--	1453.7804			1460.5073			1479.7087		
Red. masses	--	1.2693			2.1046			1.9565		
Frc consts	--	1.5805			2.6450			2.5240		
IR Inten	--	13.0883			15.8101			2.9476		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	-0.01	0.01	-0.08	0.02	0.01	0.06	-0.01	-0.01
2	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.10	0.01	0.01
3	6	0.00	-0.01	0.00	0.06	-0.02	0.00	0.03	0.09	-0.04
4	6	0.02	0.03	-0.01	-0.04	0.00	0.01	0.01	-0.05	0.02
5	1	-0.11	0.01	0.01	0.02	0.03	-0.01	0.46	-0.13	-0.03
6	6	0.00	0.04	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.03
7	1	0.15	-0.05	-0.01	0.22	-0.06	-0.02	-0.41	0.11	0.04
8	6	0.01	0.00	0.00	0.14	0.06	-0.05	-0.03	0.08	-0.02
9	6	-0.01	-0.03	0.01	-0.12	0.01	0.02	0.00	-0.06	0.02
10	6	0.01	0.00	0.00	0.02	-0.06	0.02	0.02	0.02	-0.01
11	1	0.06	-0.15	0.04	0.10	-0.32	0.09	-0.13	0.27	-0.07
12	6	-0.01	0.01	0.00	0.02	-0.08	0.03	0.07	0.00	-0.01
13	6	-0.01	0.00	0.01	0.04	0.07	-0.03	-0.03	0.07	-0.02
14	6	-0.02	-0.01	0.01	0.04	0.03	-0.02	-0.02	0.00	0.01
15	1	-0.12	-0.11	0.06	0.13	0.17	-0.08	0.21	0.13	-0.08
16	6	0.01	0.03	-0.01	-0.02	-0.04	0.02	-0.03	-0.07	0.03
17	6	0.00	-0.03	0.01	-0.05	0.00	0.02	0.01	-0.05	0.02
18	6	0.00	0.02	-0.01	0.03	-0.05	0.01	0.03	0.06	-0.03
19	6	-0.01	0.01	0.11	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.01
20	8	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.13	0.08	-0.05	-0.34	-0.19	0.09	-0.02	0.00	0.00
22	6	-0.02	-0.02	0.01	-0.08	-0.04	0.03	0.01	-0.06	0.02
23	1	-0.01	0.07	-0.02	-0.17	0.51	-0.14	0.05	-0.04	0.00
24	6	0.02	0.01	-0.01	0.07	-0.02	-0.01	0.03	-0.01	0.00
25	6	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.05	-0.02	-0.08	0.02	0.01
26	1	0.08	0.08	-0.04	0.22	0.27	-0.14	0.17	0.09	-0.06
27	1	-0.13	0.05	0.01	-0.12	0.03	0.02	-0.24	0.06	0.03
28	1	0.09	-0.01	-0.01	0.09	0.04	-0.03	0.40	-0.10	-0.04
29	1	-0.07	0.19	-0.04	-0.05	-0.04	0.01	-0.08	0.18	-0.05
30	1	-0.05	-0.13	-0.45	-0.02	0.03	0.03	0.01	-0.06	-0.03
31	1	0.16	0.24	-0.48	0.06	-0.07	0.09	0.00	0.05	-0.08
32	1	0.11	-0.23	-0.40	0.07	0.10	0.06	-0.05	-0.07	-0.05
33	1	0.00	0.05	0.04	0.00	-0.05	-0.03	0.00	0.03	0.02
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			73			74			75	
			A			A			A	
Frequencies	--	1488.8584			1509.8403			1519.0612		
Red. masses	--	3.7733			1.0620			3.2051		
Frc consts	--	4.9280			1.4265			4.3576		
IR Inten	--	1.6206			9.8499			20.6797		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.10	-0.08	0.05	0.00	0.00	0.00	0.16	-0.05	-0.01
2	6	0.03	-0.03	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.04	0.03	-0.02
3	6	0.09	0.13	-0.06	0.00	0.01	0.00	-0.09	-0.10	0.05
4	6	-0.05	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.05	-0.04	0.02
5	1	0.08	-0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.13	0.08	-0.01
6	6	0.02	0.15	-0.06	0.00	-0.01	0.00	-0.08	0.05	0.00
7	1	0.22	-0.17	0.02	-0.03	0.01	0.00	-0.18	0.03	0.02
8	6	-0.14	-0.05	0.04	0.00	0.01	0.00	-0.08	0.00	0.01
9	6	0.06	-0.10	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.07	0.04	-0.03
10	6	0.07	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.05	-0.03
11	1	0.17	-0.30	0.07	-0.01	0.02	-0.01	-0.09	0.06	0.00

12	6	0.07	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.03	-0.01
13	6	-0.09	-0.06	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.06	0.02
14	6	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.03	0.00	0.00
15	1	0.04	0.10	-0.04	-0.03	-0.03	0.02	0.12	0.12	-0.06
16	6	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.10	-0.04
17	6	0.01	0.14	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.12	-0.02
18	6	0.14	0.15	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.10	0.04
19	6	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.05	0.02	0.03	-0.01	0.01
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.08	-0.03	0.04	0.06	0.06	0.05	-0.04	-0.04	0.03
22	6	-0.06	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.13	0.06
23	1	0.05	0.07	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.09	-0.01	-0.01
24	6	-0.13	-0.08	0.07	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.07	-0.01
25	6	-0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.03
26	1	0.15	0.19	-0.10	0.01	0.00	0.00	0.31	0.28	-0.16
27	1	0.22	-0.19	0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.12	0.00	0.05
28	1	0.28	-0.07	-0.03	0.02	-0.01	0.00	0.10	0.07	-0.04
29	1	0.22	-0.39	0.12	-0.01	0.05	0.00	-0.02	-0.13	0.04
30	1	0.00	0.11	0.10	-0.15	0.62	-0.26	0.00	0.23	0.24
31	1	-0.16	0.03	0.01	-0.17	-0.10	0.23	-0.42	0.16	-0.11
32	1	-0.02	-0.04	-0.03	0.57	0.27	-0.15	-0.07	-0.22	-0.23
33	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.03	0.01	0.00	-0.05	-0.03
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			76			77			78	
			A			A			A	
Frequencies	--	1520.8906			1548.5039			1580.9565		
Red. masses	--	1.2059			3.4960			4.0285		
Frc consts	--	1.6434			4.9390			5.9324		
IR Inten	--	15.7159			15.6142			11.8052		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	0.02	0.00	-0.05	-0.03	0.02	0.08	-0.08	0.01
2	6	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.06	-0.03	-0.17	0.11	-0.01
3	6	0.02	0.01	-0.01	0.08	-0.02	-0.01	0.11	-0.10	0.02
4	6	0.01	0.00	0.00	-0.14	-0.11	0.06	-0.02	-0.15	0.06
5	1	0.03	-0.01	0.00	0.09	0.06	-0.04	0.42	-0.02	-0.06
6	6	0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.12	-0.04	-0.09	0.11	-0.02
7	1	0.06	-0.01	-0.01	0.17	-0.09	0.00	-0.05	-0.06	0.03
8	6	0.03	0.00	0.00	0.01	-0.14	0.05	-0.02	0.04	-0.01
9	6	-0.02	0.00	0.01	0.07	0.03	-0.03	-0.03	0.04	-0.01
10	6	-0.02	-0.01	0.01	-0.07	0.04	0.00	0.06	-0.13	0.03
11	1	0.02	-0.02	0.00	0.10	-0.22	0.06	-0.01	-0.19	0.07
12	6	-0.02	-0.01	0.01	0.16	-0.02	-0.02	0.02	0.18	-0.07
13	6	0.00	0.02	-0.01	-0.09	0.09	-0.02	-0.02	-0.05	0.03
14	6	0.05	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.02
15	1	0.00	-0.01	0.00	0.32	0.35	-0.17	0.31	0.14	-0.09
16	6	0.00	-0.02	0.01	-0.02	-0.02	0.01	0.04	0.03	-0.02
17	6	0.02	-0.05	0.01	-0.04	0.00	0.02	0.10	-0.10	0.01
18	6	-0.01	0.02	0.00	-0.14	0.04	0.02	-0.02	-0.02	0.01
19	6	0.04	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
20	8	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.12	-0.09	0.05	-0.08	-0.01	0.04	0.18	0.09	-0.04
22	6	0.03	0.04	-0.02	0.10	0.07	-0.04	-0.09	0.04	0.00
23	1	-0.03	0.00	0.01	0.02	-0.26	0.09	-0.09	0.32	-0.09
24	6	-0.02	0.02	0.00	0.17	-0.05	-0.03	-0.14	0.09	0.00
25	6	0.00	-0.02	0.01	-0.01	-0.06	0.02	0.15	-0.02	-0.02
26	1	-0.09	-0.09	0.05	-0.19	-0.24	0.12	-0.04	0.12	-0.03
27	1	0.00	0.02	-0.01	-0.34	0.09	0.06	0.23	0.00	-0.07
28	1	-0.05	-0.01	0.01	-0.10	-0.05	0.04	-0.32	0.10	0.03
29	1	-0.03	0.11	-0.03	-0.12	0.15	-0.05	0.03	0.15	-0.05
30	1	0.01	0.30	0.37	-0.02	0.02	-0.10	-0.01	0.02	-0.05
31	1	-0.60	0.24	-0.17	0.05	-0.02	0.02	0.00	-0.01	0.02
32	1	-0.14	-0.33	-0.32	0.08	0.05	-0.01	0.04	0.02	-0.01
33	1	0.00	-0.07	-0.05	0.00	0.05	0.03	0.00	0.00	0.01

34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			79			80			81	
			A			A			A	
Frequencies	--	1625.5282			1638.6518				1643.8074	
Red. masses	--	6.7748			5.6108				6.5965	
Frc consts	--	10.5472			8.8766				10.5018	
IR Inten	--	6.7272			9.3370				42.3356	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	-0.01	0.01	-0.17	0.11	-0.01	0.08	0.02	-0.02
2	6	0.07	-0.07	0.01	0.09	0.06	-0.03	0.33	-0.04	-0.04
3	6	-0.03	0.16	-0.05	0.02	-0.09	0.03	-0.26	0.03	0.04
4	6	0.01	0.09	-0.04	-0.14	-0.13	0.07	-0.21	-0.07	0.06
5	1	-0.10	-0.04	0.03	-0.06	0.11	-0.03	-0.43	0.15	0.02
6	6	0.05	0.00	-0.01	0.11	-0.11	0.02	0.00	-0.09	0.03
7	1	-0.06	0.00	0.01	0.28	0.02	-0.06	-0.15	0.09	0.00
8	6	-0.19	-0.04	0.05	0.04	-0.11	0.03	-0.02	0.19	-0.06
9	6	0.16	0.17	-0.09	-0.04	0.10	-0.03	-0.09	-0.11	0.06
10	6	0.10	0.05	-0.04	-0.05	0.23	-0.07	0.05	-0.19	0.06
11	1	0.01	0.11	-0.04	0.06	0.12	-0.05	-0.08	0.14	-0.03
12	6	0.06	-0.17	0.05	0.08	0.09	-0.04	0.15	-0.03	-0.01
13	6	-0.08	0.19	-0.06	-0.08	0.00	0.02	-0.20	0.05	0.02
14	6	0.00	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.00
15	1	-0.12	-0.02	0.02	0.19	0.20	-0.10	0.07	0.22	-0.08
16	6	-0.01	-0.18	0.07	0.07	0.04	-0.03	0.19	0.05	-0.06
17	6	0.09	-0.16	0.04	0.10	-0.10	0.01	0.07	-0.06	0.00
18	6	-0.16	-0.09	0.06	0.18	-0.16	0.02	0.01	0.11	-0.04
19	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.16	-0.06	0.05	0.04	0.03	0.00	-0.05	0.00	0.03
22	6	-0.22	-0.13	0.09	-0.01	-0.15	0.05	0.01	0.10	-0.04
23	1	0.12	0.03	-0.03	0.14	-0.31	0.08	-0.11	0.30	-0.08
24	6	-0.05	0.09	-0.02	-0.19	0.09	0.01	-0.06	0.02	0.01
25	6	0.28	0.01	-0.06	-0.12	0.11	-0.01	0.04	-0.05	0.01
26	1	0.13	0.26	-0.12	0.19	0.03	-0.05	-0.10	0.00	0.02
27	1	0.10	0.06	-0.05	0.32	-0.05	-0.07	0.01	0.00	-0.01
28	1	-0.38	0.18	0.01	0.27	0.02	-0.06	-0.08	-0.03	0.02
29	1	-0.07	0.27	-0.10	0.03	0.15	-0.04	-0.02	0.18	-0.05
30	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.03	-0.01	0.00	-0.03
31	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
32	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.01	0.02	0.01	-0.01
33	1	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.02	0.01
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			82			83			84	
			A			A			A	
Frequencies	--	1673.5924			3056.2304				3093.4455	
Red. masses	--	6.9016			1.0386				1.0875	
Frc consts	--	11.3894			5.7158				6.1317	
IR Inten	--	24.9765			15.5467				18.1711	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.28	-0.19	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.02	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.13	0.13	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.04	0.07	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	-0.05	-0.05	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.21	0.28	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	1	-0.38	-0.05	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.17	-0.15	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.18	0.13	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.08	0.07	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	-0.02	-0.40	0.14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.01	-0.08	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.06	0.08	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.06	0.04



15	1	-0.09	-0.06	0.03	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.01
16	6	0.12	-0.15	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.05	-0.07	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.15	-0.10	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.04	-0.01	0.01	-0.01
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.06	-0.03	0.02	-0.04	0.05	-0.03	-0.52	0.71	-0.43
22	6	0.08	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.02	-0.13	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	6	-0.10	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	6	-0.15	0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	0.00	-0.09	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.17	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.17	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.11	-0.03	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.69	0.11	-0.07	0.01	0.00	0.00
31	1	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.48	-0.23	0.00	0.00	0.00
32	1	0.00	0.00	0.00	-0.23	0.32	-0.20	0.08	-0.12	0.07
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			85			86			87	
			A			A			A	
Frequencies	--	3140.1522			3169.4747			3196.3348		
Red. masses	--	1.0991			1.0994			1.0885		
Frc consts	--	6.3854			6.5071			6.5522		
IR Inten	--	22.0906			22.3687			1.1980		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
15	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.02	-0.02	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.03	0.01	-0.02
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	6	-0.07	-0.05	-0.03	0.05	-0.08	0.02	0.00	0.01	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.02	-0.02	0.02	-0.07	0.10	-0.07	0.01	-0.01	0.01
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
24	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.07	0.03
25	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
26	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.02	0.15	0.77	-0.38
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.11	0.04
29	1	0.01	0.00	-0.01	-0.10	-0.02	0.05	-0.39	-0.09	0.21
30	1	0.64	0.09	-0.08	-0.22	-0.06	0.03	0.02	0.00	0.00
31	1	0.15	0.64	0.31	0.11	0.35	0.18	-0.01	-0.02	-0.01
32	1	0.07	-0.13	0.07	-0.44	0.62	-0.41	0.04	-0.06	0.04
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			88			89			90	
			A			A			A	

Frequencies	--	3198.6259			3204.7528			3205.4612		
Red. masses	--	1.0890			1.0882			1.0886		
Frc consts	--	6.5648			6.5846			6.5902		
IR Inten	--	9.6206			0.0995			0.6693		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.02	0.01	0.03	-0.01
2	6	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.05	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.09	0.42	-0.16	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.01	-0.03	-0.01	0.01
7	1	-0.01	-0.05	0.02	-0.10	-0.48	0.19	-0.09	-0.41	0.16
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.01
11	1	0.03	0.01	-0.01	0.53	0.13	-0.14	0.40	0.10	-0.11
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	1	0.64	-0.59	0.13	-0.05	0.05	-0.01	-0.02	0.02	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.02	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.02	-0.02	0.00
23	1	-0.02	0.00	0.00	-0.31	-0.08	0.09	0.23	0.06	-0.06
24	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.01	0.01	0.05	-0.02
26	1	0.01	-0.01	0.00	0.22	-0.20	0.03	-0.26	0.24	-0.03
27	1	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.04	-0.02	-0.01	-0.06	0.03
28	1	0.00	0.01	-0.01	0.08	0.40	-0.16	-0.12	-0.59	0.23
29	1	0.01	0.00	-0.01	-0.05	-0.01	0.02	0.06	0.01	-0.03
30	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			91				92			93
			A				A			A
Frequencies	--	3212.3026			3221.0912			3223.3950		
Red. masses	--	1.0924			1.0932			1.0969		
Frc consts	--	6.6413			6.6828			6.7151		
IR Inten	--	4.6259			4.6380			5.1922		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.07	0.03
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.00
5	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.05	-0.02	0.17	0.77	-0.30
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01
7	1	-0.03	-0.12	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.16	0.06
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.07	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	0.04	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.23	-0.06	0.06
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00	-0.32	0.29	-0.06
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00



**Table S31.** Cartesian coordinates of optimized structure for (14-C<sub>6</sub>)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	-2.103461	2.483999	-0.375883
2	6	0	-3.881790	0.746789	-0.531674
3	6	0	-2.555314	1.118488	-0.242784
4	6	0	-1.620788	0.125488	0.208035
5	6	0	-2.058426	-1.229088	0.375634
6	6	0	-3.398792	-1.573776	0.079546
7	6	0	-4.297054	-0.590923	-0.372996
8	6	0	-0.270863	0.489895	0.502184
9	6	0	0.656958	-0.509801	0.952500
10	6	0	0.192580	-1.857913	1.140965
11	6	0	-1.113312	-2.203004	0.861531
12	6	0	-0.809218	2.843625	-0.069619
13	6	0	0.146232	1.865323	0.381878
14	6	0	1.476737	2.232405	0.726151
15	6	0	2.392311	1.272641	1.163781
16	6	0	2.017141	-0.117999	1.246744
17	8	0	-5.621731	-0.851635	-0.685047
18	1	0	-2.812437	3.234018	-0.717288
19	1	0	-4.609263	1.476634	-0.873867
20	1	0	-3.730098	-2.602401	0.210845
21	1	0	0.886573	-2.606923	1.515271
22	1	0	-1.449046	-3.225728	1.014713
23	1	0	-0.491420	3.878633	-0.160953
24	1	0	1.771891	3.276228	0.669655
25	1	0	3.379596	1.574586	1.504206
26	1	0	2.633615	-0.795733	1.840196
27	1	0	-5.889273	-1.784328	-0.552150
28	47	0	3.120129	-0.557209	-0.749919

**Table S32. Vibrational frequencies for (14-C<sub>6</sub>)**

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	35.5183			44.8143			80.4695		
Red. masses	--	13.9620			7.9341			8.2899		
Frc consts	--	0.0104			0.0094			0.0316		
IR Inten	--	0.2686			0.2469			0.3110		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.09	0.01	0.02	-0.14	0.07	0.15	-0.07	0.03	0.15
2	6	0.15	-0.05	-0.10	-0.06	0.00	0.08	-0.03	0.00	-0.02
3	6	0.12	-0.01	-0.01	-0.07	0.04	0.07	-0.07	0.03	0.12
4	6	0.11	0.02	0.05	-0.01	0.06	-0.01	-0.08	0.03	0.16
5	6	0.14	0.01	0.04	0.05	0.03	-0.09	-0.09	0.04	0.17
6	6	0.17	-0.03	-0.05	0.07	-0.02	-0.09	-0.06	0.01	0.05
7	6	0.18	-0.06	-0.13	0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.01	-0.10
8	6	0.09	0.05	0.10	-0.02	0.11	-0.02	-0.07	0.02	0.12
9	6	0.10	0.07	0.13	0.03	0.13	-0.09	-0.06	0.01	0.09
10	6	0.11	0.06	0.15	0.09	0.10	-0.15	-0.09	0.04	0.20
11	6	0.13	0.04	0.11	0.11	0.05	-0.16	-0.11	0.05	0.25
12	6	0.07	0.04	0.08	-0.15	0.11	0.13	-0.07	0.02	0.13
13	6	0.07	0.06	0.11	-0.09	0.13	0.04	-0.05	0.01	0.06
14	6	0.07	0.07	0.11	-0.09	0.17	0.02	-0.01	-0.02	-0.07
15	6	0.09	0.08	0.09	-0.04	0.19	-0.04	0.01	-0.03	-0.14
16	6	0.10	0.08	0.10	0.02	0.17	-0.08	-0.02	-0.02	-0.06
17	8	0.21	-0.11	-0.25	0.01	-0.08	0.01	0.06	-0.06	-0.35
18	1	0.09	-0.01	-0.01	-0.19	0.06	0.23	-0.08	0.04	0.17
19	1	0.15	-0.07	-0.15	-0.11	-0.01	0.15	-0.01	-0.01	-0.09
20	1	0.19	-0.04	-0.07	0.12	-0.04	-0.15	-0.06	0.01	0.03
21	1	0.12	0.09	0.19	0.13	0.11	-0.19	-0.10	0.05	0.22
22	1	0.14	0.04	0.12	0.16	0.02	-0.21	-0.13	0.07	0.31
23	1	0.04	0.04	0.10	-0.20	0.13	0.19	-0.06	0.02	0.13
24	1	0.05	0.08	0.11	-0.13	0.18	0.05	0.01	-0.03	-0.12
25	1	0.10	0.09	0.04	-0.04	0.22	-0.07	0.05	-0.05	-0.23
26	1	0.14	0.09	0.07	0.03	0.20	-0.05	0.01	-0.02	-0.09
27	1	0.23	-0.11	-0.26	0.07	-0.10	-0.05	0.06	-0.07	-0.40
28	47	-0.24	-0.04	-0.05	0.03	-0.14	0.03	0.09	-0.02	-0.07
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	130.4477			187.4965			206.7707		
Red. masses	--	5.4562			5.3907			4.5740		
Frc consts	--	0.0547			0.1117			0.1152		
IR Inten	--	1.3902			0.4677			7.6018		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.03	-0.16	0.03	-0.01	-0.09	0.02	-0.02	-0.10
2	6	0.03	-0.04	-0.18	-0.02	0.02	0.09	-0.07	0.04	0.22
3	6	0.03	-0.03	-0.15	-0.03	0.02	0.10	-0.04	0.03	0.13
4	6	0.00	0.00	-0.04	-0.03	0.03	0.13	-0.03	0.02	0.09
5	6	-0.02	0.02	0.05	-0.04	0.04	0.18	0.01	-0.01	-0.06
6	6	-0.04	0.02	0.10	-0.06	0.05	0.25	0.05	-0.04	-0.19
7	6	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.10	-0.01	0.00	0.02
8	6	-0.02	0.02	0.03	0.00	0.01	0.00	-0.03	0.02	0.11
9	6	0.00	0.02	-0.01	0.03	-0.02	-0.13	-0.04	0.03	0.14
10	6	-0.01	0.02	0.01	0.08	-0.06	-0.28	-0.03	0.02	0.10
11	6	-0.03	0.03	0.08	0.03	-0.01	-0.07	0.01	-0.01	-0.06
12	6	-0.03	0.01	0.04	0.05	-0.02	-0.15	0.06	-0.04	-0.23
13	6	-0.06	0.04	0.14	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.01
14	6	-0.11	0.07	0.32	-0.01	0.01	0.06	-0.03	0.02	0.07
15	6	-0.08	0.05	0.21	-0.03	0.02	0.09	-0.05	0.03	0.15

16	6	0.00	0.02	-0.01	0.02	-0.01	-0.06	-0.03	0.03	0.12
17	8	-0.03	0.01	0.08	0.07	-0.05	-0.22	-0.01	0.00	-0.01
18	1	0.06	-0.05	-0.28	0.06	-0.03	-0.19	0.05	-0.04	-0.21
19	1	0.06	-0.06	-0.28	0.00	0.00	-0.01	-0.10	0.06	0.32
20	1	-0.06	0.05	0.22	-0.07	0.06	0.28	0.10	-0.08	-0.39
21	1	0.00	0.02	0.00	0.15	-0.11	-0.50	-0.05	0.03	0.14
22	1	-0.04	0.05	0.15	0.05	-0.03	-0.14	0.04	-0.03	-0.16
23	1	-0.06	0.03	0.10	0.08	-0.05	-0.28	0.12	-0.08	-0.46
24	1	-0.16	0.09	0.49	-0.03	0.02	0.10	-0.02	0.02	0.04
25	1	-0.09	0.05	0.26	-0.06	0.02	0.17	-0.06	0.04	0.18
26	1	0.02	-0.02	-0.07	0.00	-0.03	-0.06	-0.01	0.02	0.09
27	1	-0.06	0.04	0.21	0.07	-0.05	-0.22	0.04	-0.04	-0.18
28	47	0.04	-0.03	-0.07	-0.01	0.00	0.02	0.02	-0.01	-0.05
			7			8			9	
			A			A			A	
Frequencies	--	232.9823			263.9859			305.8317		
Red. masses	--	4.2501			5.4967			4.4247		
Frc consts	--	0.1359			0.2257			0.2438		
IR Inten	--	7.7394			9.4191			6.5517		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	-0.02	-0.10	-0.03	-0.11	0.02	-0.05	0.03	0.14
2	6	0.05	-0.03	-0.17	0.08	-0.03	0.05	0.02	-0.02	-0.11
3	6	0.01	-0.01	-0.01	0.06	-0.11	0.04	0.00	0.00	-0.02
4	6	-0.05	0.03	0.20	0.03	-0.14	0.02	0.01	-0.01	-0.05
5	6	-0.02	0.00	0.05	-0.01	-0.13	0.02	0.00	0.00	-0.01
6	6	0.00	-0.01	-0.02	-0.07	-0.07	0.01	-0.05	0.04	0.16
7	6	0.01	-0.01	-0.03	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.01
8	6	-0.07	0.05	0.27	0.02	-0.08	0.00	0.01	0.00	-0.03
9	6	-0.04	0.03	0.15	0.08	-0.01	0.01	-0.03	0.03	0.13
10	6	0.02	-0.03	-0.09	0.08	-0.02	0.03	0.00	-0.01	-0.01
11	6	0.04	-0.05	-0.15	0.07	-0.08	0.04	0.03	-0.03	-0.13
12	6	-0.01	0.00	0.02	-0.06	-0.06	-0.01	-0.01	0.01	0.02
13	6	-0.04	0.03	0.15	-0.06	-0.05	-0.02	0.03	-0.02	-0.12
14	6	0.02	0.00	-0.08	-0.10	0.07	-0.03	0.04	-0.02	-0.15
15	6	0.04	-0.01	-0.15	-0.04	0.15	-0.03	-0.05	0.03	0.17
16	6	-0.01	0.01	0.02	0.07	0.11	-0.01	-0.08	0.06	0.32
17	8	-0.03	0.04	0.07	-0.06	0.37	-0.11	0.00	-0.01	-0.03
18	1	0.07	-0.06	-0.28	-0.09	-0.16	0.02	-0.10	0.06	0.33
19	1	0.10	-0.06	-0.33	0.12	0.01	0.07	0.05	-0.04	-0.19
20	1	0.01	-0.02	-0.07	-0.13	-0.05	-0.01	-0.09	0.07	0.30
21	1	0.08	-0.08	-0.29	0.09	-0.01	0.04	0.00	-0.02	-0.04
22	1	0.11	-0.10	-0.39	0.14	-0.10	0.08	0.06	-0.06	-0.26
23	1	0.01	-0.01	-0.07	-0.08	-0.06	0.00	-0.04	0.02	0.10
24	1	0.07	-0.02	-0.25	-0.20	0.10	-0.04	0.08	-0.04	-0.29
25	1	0.10	-0.02	-0.30	-0.05	0.22	-0.05	-0.10	0.08	0.27
26	1	0.05	0.02	-0.03	0.12	0.19	0.02	-0.11	0.08	0.37
27	1	-0.07	0.07	0.18	-0.35	0.45	-0.20	-0.03	0.02	0.10
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.04
			10			11			12	
			A			A			A	
Frequencies	--	358.9231			371.5230			375.8012		
Red. masses	--	5.4076			8.7850			1.1147		
Frc consts	--	0.4105			0.7144			0.0928		
IR Inten	--	0.4795			0.9209			168.4874		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	0.04	0.17	-0.05	0.12	-0.06	0.00	0.00	0.00
2	6	0.07	-0.04	-0.19	0.15	0.08	0.05	0.01	0.00	-0.02
3	6	-0.03	0.03	0.13	0.09	0.08	-0.01	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.06	0.04	0.21	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.02	0.02	0.12	0.12	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00
6	6	0.06	-0.04	-0.17	0.17	0.00	0.06	-0.01	0.01	0.03
7	6	0.08	-0.04	-0.19	0.28	0.08	0.09	0.00	0.00	-0.02
8	6	-0.01	0.01	0.01	-0.08	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00

9	6	0.02	-0.02	-0.14	-0.16	-0.08	-0.01	0.00	0.00	0.01
10	6	0.03	-0.02	-0.09	-0.03	-0.12	0.03	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.03	0.02	0.15	0.01	-0.13	0.01	0.00	0.00	0.00
12	6	0.03	-0.01	-0.11	-0.09	0.12	-0.02	0.00	0.00	0.00
13	6	0.03	-0.02	-0.16	-0.18	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	-0.01	-0.04	-0.22	-0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00
15	6	-0.07	0.02	0.16	-0.26	-0.09	-0.08	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	-0.02	-0.06	-0.22	-0.08	-0.02	0.00	0.00	0.00
17	8	-0.02	0.05	0.14	0.35	0.09	0.06	-0.02	0.02	0.07
18	1	-0.09	0.05	0.28	-0.12	0.04	-0.09	0.00	0.00	0.00
19	1	0.09	-0.07	-0.29	0.08	0.01	0.06	0.02	-0.01	-0.06
20	1	0.08	-0.06	-0.26	0.08	0.03	0.04	-0.03	0.02	0.10
21	1	0.07	-0.02	-0.17	0.04	-0.05	0.05	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.05	0.05	0.25	-0.08	-0.11	-0.03	0.00	0.00	-0.01
23	1	0.05	-0.02	-0.20	-0.01	0.09	0.02	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.01	-0.01	-0.01	-0.16	-0.05	-0.03	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.16	0.04	0.38	-0.26	-0.09	-0.08	0.00	0.00	-0.01
26	1	-0.05	-0.04	-0.04	-0.18	-0.05	-0.03	0.00	0.00	0.00
27	1	-0.03	0.06	0.14	0.32	0.10	0.06	0.27	-0.21	-0.93
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			13			14			15	
			A			A			A	
Frequencies	--	417.4591			420.8655			477.3802		
Red. masses	--	4.5658			3.5373			7.3730		
Frc consts	--	0.4688			0.3692			0.9900		
IR Inten	--	5.3380			7.5070			1.4504		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.00	0.02	-0.04	0.03	0.15	0.23	-0.08	0.08
2	6	-0.04	0.18	-0.05	0.03	-0.02	-0.11	0.12	-0.01	0.04
3	6	0.01	0.03	0.00	-0.02	0.02	0.10	0.16	-0.08	0.05
4	6	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.12	0.02
5	6	-0.02	0.02	0.00	0.03	-0.02	-0.09	-0.11	-0.15	0.00
6	6	-0.03	0.18	-0.06	-0.03	0.03	0.12	-0.11	-0.07	-0.01
7	6	-0.03	0.18	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
8	6	0.03	-0.15	0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.07	-0.02
9	6	0.10	-0.12	0.04	-0.03	0.01	0.08	-0.16	0.02	-0.05
10	6	0.02	-0.13	0.02	-0.04	0.03	0.16	-0.21	-0.03	-0.06
11	6	-0.03	-0.02	0.01	0.04	-0.04	-0.16	-0.19	-0.18	0.00
12	6	0.03	-0.12	0.03	0.05	-0.03	-0.15	0.19	0.09	0.03
13	6	-0.05	-0.16	0.01	0.02	-0.02	-0.07	0.13	0.11	0.02
14	6	-0.13	0.04	-0.04	-0.04	0.02	0.14	0.10	0.24	-0.01
15	6	-0.04	0.16	-0.04	0.01	-0.01	-0.06	-0.03	0.15	-0.02
16	6	0.09	0.10	0.01	0.04	-0.03	-0.17	-0.19	0.16	-0.08
17	8	0.02	-0.15	0.04	0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.10	0.03
18	1	0.07	0.04	0.03	-0.07	0.05	0.28	0.18	-0.12	0.09
19	1	0.05	0.27	-0.03	0.07	-0.05	-0.27	0.19	0.06	0.06
20	1	-0.12	0.20	-0.11	-0.08	0.07	0.29	-0.19	-0.05	-0.03
21	1	-0.05	-0.21	0.00	-0.08	0.07	0.29	-0.15	0.02	-0.06
22	1	-0.10	0.00	0.01	0.08	-0.07	-0.31	-0.14	-0.19	0.04
23	1	0.13	-0.15	0.06	0.10	-0.06	-0.29	0.10	0.11	0.01
24	1	-0.29	0.08	-0.09	-0.11	0.05	0.33	0.07	0.25	-0.02
25	1	-0.06	0.26	-0.07	0.03	-0.03	-0.09	0.01	-0.03	0.03
26	1	0.20	0.23	0.04	0.10	-0.04	-0.24	-0.16	0.19	-0.07
27	1	0.30	-0.21	0.17	-0.02	0.02	0.12	0.14	-0.12	0.07
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00

			16			17			18	
			A			A			A	
Frequencies	--	505.8154			511.4507			514.6720		
Red. masses	--	4.7207			4.1872			3.8953		
Frc consts	--	0.7116			0.6453			0.6079		
IR Inten	--	2.6145			3.3018			4.9603		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.14	-0.04	0.04	0.07	0.18	0.06	0.04	0.05	-0.13





		A			A			A		
Frequencies		--	577.2735		615.7581		633.1613			
Red. masses		--	6.3226		6.5051		2.9202			
Frc consts		--	1.2414		1.4532		0.6898			
IR Inten		--	5.4510		4.6266		4.9905			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.12	-0.01	-0.17	0.08	-0.06	-0.01	0.01	0.06
2	6	0.18	0.01	0.05	-0.13	0.07	-0.06	0.03	-0.02	-0.08
3	6	0.20	0.00	0.00	-0.16	0.06	-0.06	0.02	-0.01	-0.05
4	6	0.03	-0.12	0.02	-0.13	-0.03	-0.02	-0.01	0.01	0.05
5	6	-0.16	-0.11	-0.04	-0.10	-0.14	-0.02	0.02	-0.01	-0.06
6	6	-0.18	-0.09	-0.03	-0.08	-0.12	0.00	0.02	-0.01	-0.07
7	6	-0.03	0.04	0.02	0.11	0.05	0.07	-0.09	0.06	0.32
8	6	-0.01	0.00	0.07	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.13	0.08	0.04	0.07	-0.04	0.01	0.01	0.00	-0.03
10	6	-0.05	0.17	-0.05	-0.09	-0.10	0.00	0.01	-0.01	-0.05
11	6	-0.05	0.06	-0.02	-0.11	-0.16	0.01	-0.01	0.02	0.05
12	6	-0.02	0.23	-0.05	-0.13	0.04	-0.04	0.02	-0.01	-0.05
13	6	-0.15	0.03	-0.06	0.05	0.08	-0.01	0.00	-0.01	-0.02
14	6	-0.13	-0.18	-0.05	0.17	0.05	0.03	-0.03	0.00	0.07
15	6	-0.02	-0.05	0.06	0.25	0.08	0.09	0.02	-0.02	-0.08
16	6	0.24	-0.10	0.00	0.19	0.03	0.02	-0.04	0.02	0.08
17	8	-0.01	-0.10	0.01	0.23	0.06	0.04	0.00	-0.01	-0.05
18	1	-0.15	-0.01	0.03	-0.16	0.10	-0.04	-0.06	0.04	0.24
19	1	0.27	0.11	0.07	-0.26	-0.09	-0.12	0.16	-0.10	-0.54
20	1	-0.28	-0.06	-0.07	-0.25	-0.07	-0.10	0.15	-0.11	-0.50
21	1	-0.10	0.12	-0.07	-0.14	-0.13	0.04	0.00	0.01	0.02
22	1	0.14	0.01	0.06	-0.10	-0.16	0.06	-0.06	0.07	0.24
23	1	0.06	0.22	0.01	-0.20	0.07	-0.06	0.01	0.00	-0.01
24	1	-0.08	-0.19	-0.08	0.18	0.06	0.02	-0.05	0.01	0.12
25	1	-0.09	0.20	0.04	0.26	0.08	0.10	0.05	-0.02	-0.15
26	1	0.23	-0.12	-0.01	0.19	0.01	0.00	-0.04	0.03	0.10
27	1	0.17	-0.15	0.05	0.18	0.07	0.02	0.03	-0.04	-0.16
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		A			A			A		
Frequencies		--	718.5680		751.3494		773.6672			
Red. masses		--	3.6596		2.8276		5.7911			
Frc consts		--	1.1133		0.9405		2.0423			
IR Inten		--	2.2378		34.4888		1.7389			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.03	-0.10	0.00	0.00	-0.03	-0.05	0.09	-0.04
2	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.05	0.07	-0.06	0.03
3	6	-0.06	0.03	0.18	0.04	-0.02	-0.13	0.06	0.01	0.02
4	6	-0.01	0.00	0.00	-0.05	0.04	0.18	0.05	0.01	0.02
5	6	0.05	-0.04	-0.19	0.03	-0.03	-0.13	0.16	0.01	0.03
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.04	0.19	0.15	0.02
7	6	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.07	-0.02	-0.03	0.00
8	6	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.02	0.15	-0.08	0.02	-0.03
9	6	-0.06	0.05	0.23	0.03	-0.03	-0.12	-0.09	0.10	-0.04
10	6	0.03	-0.02	-0.11	0.01	-0.01	-0.02	-0.15	0.02	-0.05
11	6	-0.03	0.03	0.11	0.01	0.00	-0.03	-0.11	-0.25	0.03
12	6	-0.03	0.02	0.11	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	-0.01
13	6	0.06	-0.03	-0.20	0.04	-0.02	-0.12	-0.09	-0.10	-0.01
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.06	-0.05	-0.21	0.02
15	6	0.00	-0.01	-0.02	0.04	-0.01	-0.08	0.26	0.10	0.09
16	6	0.01	-0.01	-0.03	-0.03	0.02	0.08	0.02	0.13	-0.02
17	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.01	-0.03
18	1	0.09	-0.06	-0.29	-0.09	0.06	0.29	-0.09	0.06	-0.02
19	1	0.05	-0.05	-0.24	-0.09	0.07	0.36	0.12	-0.02	0.03
20	1	-0.07	0.06	0.26	-0.11	0.08	0.38	0.33	0.12	0.08
21	1	0.10	-0.08	-0.36	-0.09	0.07	0.33	-0.02	0.15	-0.03
22	1	-0.07	0.07	0.28	-0.08	0.08	0.28	-0.18	-0.23	0.03

23	1	-0.09	0.06	0.30	-0.10	0.05	0.33	0.09	-0.02	0.07
24	1	-0.11	0.05	0.35	-0.08	0.04	0.26	-0.24	-0.17	-0.15
25	1	-0.06	0.01	0.13	0.01	-0.01	0.00	0.27	0.23	-0.04
26	1	0.10	-0.01	-0.13	-0.07	0.05	0.15	-0.07	-0.08	-0.17
27	1	-0.01	0.01	0.05	0.00	0.00	0.03	-0.13	-0.01	-0.03
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			28				29			30
			A				A			A
Frequencies	--	775.9964			824.9810			832.2956		
Red. masses	--	5.2279			2.0303			2.0931		
Frc consts	--	1.8548			0.8141			0.8543		
IR Inten	--	16.2618			8.1068			4.9808		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.21	0.15	-0.09	-0.06	0.08	0.00	0.03	-0.06	0.05
2	6	0.23	-0.01	0.07	0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.01
3	6	0.14	0.08	0.04	0.00	0.05	-0.02	0.01	-0.05	0.01
4	6	0.02	0.01	-0.01	0.06	0.00	-0.03	-0.03	-0.03	-0.07
5	6	-0.08	0.01	-0.02	0.02	-0.04	0.03	-0.02	0.05	0.02
6	6	-0.13	-0.04	-0.03	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00
7	6	-0.03	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.02
8	6	0.00	-0.08	0.00	0.05	0.02	0.07	-0.09	-0.01	0.06
9	6	-0.08	-0.03	0.00	0.02	0.03	-0.03	-0.01	-0.04	-0.04
10	6	0.12	-0.05	0.04	-0.06	0.11	-0.01	0.04	-0.09	0.06
11	6	0.08	0.10	0.00	-0.02	-0.09	0.02	0.01	0.08	-0.02
12	6	-0.15	-0.13	-0.01	-0.02	-0.11	0.05	-0.01	0.12	0.02
13	6	0.05	-0.08	0.03	0.03	-0.03	0.01	-0.03	0.01	-0.03
14	6	0.14	0.04	0.03	0.02	0.04	-0.05	0.02	-0.07	-0.04
15	6	0.12	0.00	0.04	-0.04	-0.03	-0.08	0.11	0.01	-0.04
16	6	-0.20	0.10	-0.06	0.03	-0.05	0.00	-0.02	0.05	-0.01
17	8	-0.04	-0.05	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00
18	1	-0.24	0.11	-0.10	0.08	0.13	-0.20	0.02	-0.20	-0.22
19	1	0.37	0.11	0.04	-0.02	0.00	0.04	0.02	0.02	0.05
20	1	-0.18	-0.03	-0.07	-0.02	0.00	0.00	0.06	-0.01	-0.05
21	1	0.12	-0.05	0.03	0.05	0.14	-0.16	0.00	-0.17	-0.02
22	1	0.10	0.09	-0.01	0.13	-0.16	-0.07	-0.08	0.08	-0.16
23	1	-0.05	-0.16	0.02	0.15	-0.19	-0.19	0.02	0.09	-0.33
24	1	0.09	0.06	0.00	-0.11	0.11	0.45	-0.19	0.01	0.49
25	1	0.18	-0.27	0.12	-0.23	0.02	0.40	-0.09	0.08	0.48
26	1	-0.20	-0.07	-0.26	-0.14	0.15	0.41	-0.16	0.14	0.23
27	1	0.15	-0.10	0.06	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			31				32			33
			A				A			A
Frequencies	--	851.7412			865.9061			897.8682		
Red. masses	--	2.4650			1.4753			1.6996		
Frc consts	--	1.0536			0.6517			0.8073		
IR Inten	--	2.9052			6.1499			55.4635		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.01	0.07	-0.02	0.01	0.06	0.01	-0.01	-0.06
2	6	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.05
3	6	0.04	-0.03	-0.12	0.01	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.01
4	6	-0.05	0.03	0.17	-0.01	0.01	0.05	-0.02	0.00	0.03
5	6	0.03	-0.02	-0.11	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.03
6	6	0.02	-0.01	-0.06	-0.02	0.01	0.05	-0.01	0.02	0.06
7	6	-0.02	0.01	0.06	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.01	-0.06
8	6	0.03	-0.03	-0.16	0.02	-0.01	-0.06	0.00	-0.02	-0.07
9	6	-0.02	0.01	0.06	-0.02	0.02	0.09	-0.03	0.01	0.08
10	6	0.00	-0.01	0.03	0.02	-0.01	-0.09	0.01	-0.02	-0.02
11	6	-0.02	0.03	0.08	0.01	-0.02	-0.06	0.00	0.00	-0.02
12	6	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.04	0.02	-0.01	-0.08
13	6	-0.03	0.02	0.10	0.00	0.00	0.01	-0.04	0.02	0.12
14	6	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.01	-0.04
15	6	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.00	-0.03

16	6	0.01	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02	-0.06
17	8	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
18	1	0.01	-0.03	-0.07	0.08	-0.04	-0.25	-0.14	0.07	0.46
19	1	-0.07	0.07	0.31	-0.07	0.05	0.25	0.08	-0.04	-0.23
20	1	-0.15	0.12	0.54	0.08	-0.06	-0.30	0.08	-0.05	-0.25
21	1	0.13	-0.12	-0.43	-0.12	0.12	0.43	0.00	0.01	0.04
22	1	0.06	-0.05	-0.27	-0.12	0.10	0.47	-0.07	0.06	0.20
23	1	0.09	-0.04	-0.33	0.11	-0.07	-0.36	-0.10	0.07	0.32
24	1	0.01	-0.01	-0.03	-0.05	0.02	0.16	-0.02	0.01	0.07
25	1	-0.02	0.01	0.08	-0.04	0.01	0.09	-0.13	0.03	0.37
26	1	-0.06	0.05	0.10	0.14	-0.07	-0.23	-0.19	0.19	0.41
27	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.02
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			34			35			36	
			A			A			A	
Frequencies	--	923.2050			938.6250			958.9626		
Red. masses	--	1.4418			1.5991			1.6705		
Frc consts	--	0.7240			0.8301			0.9051		
IR Inten	--	42.1360			78.1696			52.4050		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.04
2	6	0.03	-0.01	-0.04	0.03	-0.01	-0.01	-0.03	0.03	0.17
3	6	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.02	0.03	-0.02	-0.10
4	6	-0.02	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.04	-0.02	0.01	0.02
5	6	0.02	-0.01	-0.07	-0.02	0.02	0.08	0.01	0.00	-0.02
6	6	-0.03	0.03	0.11	0.03	-0.01	-0.10	-0.01	0.01	0.02
7	6	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.01	0.05	0.02	-0.01	-0.08
8	6	-0.03	0.00	0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
9	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.04	0.01	0.05	-0.01	0.00	-0.01
10	6	0.00	0.00	0.04	0.03	-0.03	-0.05	0.00	0.00	0.01
11	6	0.00	0.01	0.02	0.02	-0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.06
13	6	0.02	-0.01	-0.06	0.01	-0.01	-0.04	0.01	-0.01	-0.04
14	6	-0.01	0.02	0.06	0.00	0.02	0.05	0.00	0.01	0.02
15	6	-0.01	0.01	0.03	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.01	0.02
16	6	0.03	-0.03	-0.04	0.05	-0.05	-0.07	0.01	-0.02	0.00
17	8	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01
18	1	0.04	-0.04	-0.19	0.02	-0.04	-0.12	0.03	-0.02	-0.10
19	1	-0.06	0.07	0.34	0.04	0.01	0.04	0.22	-0.15	-0.77
20	1	0.15	-0.11	-0.53	-0.11	0.10	0.45	0.00	0.00	-0.01
21	1	0.09	-0.06	-0.26	-0.07	0.09	0.37	0.02	-0.01	-0.05
22	1	-0.01	0.00	-0.02	-0.08	0.06	0.23	-0.01	0.00	0.01
23	1	0.01	-0.01	-0.05	0.00	-0.01	-0.02	0.11	-0.08	-0.41
24	1	0.09	-0.03	-0.28	0.09	-0.02	-0.25	0.01	0.00	-0.03
25	1	0.10	-0.02	-0.25	0.06	0.00	-0.14	0.08	0.00	-0.21
26	1	-0.22	0.13	0.41	-0.26	0.20	0.54	-0.06	0.01	0.10
27	1	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.04
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			37			38			39	
			A			A			A	
Frequencies	--	992.5434			997.3779			1004.4709		
Red. masses	--	3.6636			4.3963			3.8896		
Frc consts	--	2.1265			2.5767			2.3122		
IR Inten	--	21.5294			12.0733			8.2410		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.10	0.01	-0.03	0.03	0.00	-0.02	0.07	-0.04
2	6	0.13	0.12	-0.01	-0.09	0.26	-0.07	0.04	-0.12	0.02
3	6	0.05	0.09	0.01	0.04	-0.02	0.00	-0.01	-0.04	0.02
4	6	-0.12	0.09	-0.05	0.02	-0.13	0.03	-0.13	-0.14	-0.01
5	6	0.02	0.03	0.00	0.09	-0.06	0.04	0.02	-0.04	0.02
6	6	0.05	-0.15	0.05	0.17	-0.18	0.08	0.09	0.20	-0.02
7	6	0.06	0.04	0.01	0.09	0.01	0.02	-0.02	-0.01	0.01
8	6	-0.13	0.10	-0.05	0.02	-0.15	0.03	-0.14	-0.15	-0.01

9	6	-0.05	0.02	-0.04	0.02	-0.06	0.03	0.00	-0.04	0.00
10	6	-0.01	-0.07	0.02	-0.10	0.10	-0.05	-0.03	0.08	-0.03
11	6	0.00	-0.03	0.02	-0.01	0.12	-0.04	0.02	0.07	-0.01
12	6	-0.03	-0.12	0.00	-0.03	0.08	-0.02	0.02	0.08	-0.01
13	6	-0.02	0.05	0.01	-0.01	-0.05	-0.01	-0.01	-0.05	0.03
14	6	0.01	0.06	-0.09	0.03	0.07	0.05	0.11	0.19	-0.09
15	6	0.00	0.04	0.04	0.04	-0.01	-0.02	-0.03	0.02	0.06
16	6	0.12	-0.12	0.08	-0.06	0.01	-0.02	0.04	-0.12	0.05
17	8	-0.12	-0.02	-0.03	-0.13	-0.02	-0.03	0.01	0.01	0.00
18	1	0.05	-0.04	0.16	-0.15	-0.13	-0.11	-0.14	0.02	0.10
19	1	0.23	0.27	0.10	0.00	0.35	-0.12	-0.01	-0.14	0.09
20	1	0.15	-0.19	0.06	0.35	-0.23	0.16	0.10	0.21	-0.02
21	1	0.06	-0.03	0.03	-0.29	-0.06	-0.06	-0.10	0.02	-0.03
22	1	-0.14	0.00	-0.10	0.05	0.13	0.02	0.13	0.04	0.01
23	1	-0.21	-0.08	-0.03	0.01	0.08	-0.02	0.15	0.05	0.03
24	1	-0.14	0.13	0.39	0.07	0.05	-0.26	-0.09	0.29	0.46
25	1	0.06	0.23	-0.30	0.01	-0.21	0.25	0.19	-0.17	-0.38
26	1	0.14	-0.26	-0.08	-0.06	0.04	0.00	0.07	-0.19	-0.04
27	1	0.11	-0.09	0.05	-0.10	-0.03	-0.02	-0.05	0.02	-0.02
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

40

41

42

		A	A	A
Frequencies	--	1017.4272	1036.6494	1046.3346
Red. masses	--	1.6551	1.3957	1.4166
Frc consts	--	1.0094	0.8837	0.9138
IR Inten	--	16.7953	0.8658	0.2634

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.02	-0.12
2	6	-0.05	0.04	-0.04	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.03
3	6	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.03
4	6	0.07	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.01	-0.05	0.00	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01
8	6	0.07	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.01	0.00	0.01	0.03	-0.03	-0.11	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.03	0.13	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.11
13	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.03
14	6	0.03	-0.09	-0.08	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.03
15	6	-0.04	0.02	0.10	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.02
16	6	-0.04	0.05	-0.06	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
17	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.09	0.03	0.19	-0.01	0.00	0.01	-0.18	0.13	0.67
19	1	-0.08	0.05	0.04	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.02	0.13
20	1	-0.03	-0.05	0.03	0.03	-0.03	-0.10	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	-0.02	-0.06	-0.16	0.15	0.59	0.00	0.00	0.01
22	1	-0.03	0.04	0.13	0.18	-0.16	-0.69	0.01	0.00	-0.02
23	1	0.04	0.00	-0.07	0.01	0.00	0.00	0.17	-0.11	-0.60
24	1	-0.13	-0.02	0.54	0.00	-0.01	0.05	0.04	-0.01	-0.17
25	1	0.24	-0.07	-0.62	0.02	-0.02	-0.07	-0.04	0.00	0.11
26	1	-0.19	0.15	0.20	-0.04	0.06	0.08	0.01	-0.01	-0.02
27	1	-0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

43

44

45

		A	A	A
Frequencies	--	1076.1110	1149.0271	1157.4290
Red. masses	--	2.2000	1.7368	2.0230
Frc consts	--	1.5010	1.3510	1.5967
IR Inten	--	43.4555	241.8413	110.2310

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.07	0.02	-0.02	0.06	-0.02

2	6	0.06	-0.01	0.02	0.02	-0.07	0.02	-0.02	-0.05	0.00
3	6	0.00	0.03	-0.01	-0.02	0.06	-0.02	-0.01	-0.04	0.01
4	6	-0.10	-0.02	-0.02	-0.01	0.09	-0.02	0.03	-0.11	0.03
5	6	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.09	0.03
6	6	0.05	0.03	0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.04	0.02	0.01
7	6	0.03	0.01	0.01	0.06	0.06	0.00	0.06	0.05	0.01
8	6	-0.07	-0.02	-0.01	0.04	-0.07	0.02	0.00	0.10	-0.02
9	6	0.06	0.01	0.00	0.03	-0.04	0.02	-0.01	0.03	-0.01
10	6	-0.01	0.01	0.00	-0.03	0.05	-0.02	-0.01	-0.06	0.01
11	6	-0.03	-0.02	-0.01	0.02	-0.04	0.02	0.01	0.11	-0.02
12	6	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.05	-0.01	0.02	-0.07	0.02
13	6	0.05	0.02	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.07	-0.01
14	6	0.07	-0.09	0.04	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.04	0.01
15	6	-0.14	-0.09	-0.02	0.02	0.00	0.01	0.00	0.03	-0.01
16	6	0.04	0.17	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
17	8	-0.04	0.00	-0.01	-0.08	0.04	-0.03	-0.07	0.03	-0.03
18	1	-0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.15	0.02	0.13	0.22	-0.01
19	1	0.07	0.00	0.02	-0.26	-0.35	0.00	-0.20	-0.24	-0.01
20	1	0.08	0.02	0.02	-0.02	-0.01	0.00	-0.11	0.05	-0.04
21	1	-0.06	-0.06	-0.04	0.00	0.08	-0.01	-0.31	-0.34	0.00
22	1	-0.05	-0.01	0.01	0.23	-0.10	0.08	-0.03	0.13	-0.04
23	1	-0.10	0.00	-0.04	-0.20	0.11	-0.08	0.17	-0.11	0.07
24	1	0.48	-0.21	0.15	-0.15	0.05	-0.04	0.13	-0.08	0.04
25	1	-0.11	-0.18	-0.06	0.07	-0.16	0.02	-0.08	0.33	-0.04
26	1	0.44	0.56	0.00	-0.04	0.02	0.01	-0.14	-0.13	0.00
27	1	0.07	-0.03	0.03	0.67	-0.16	0.22	0.49	-0.12	0.16
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

46

47

48

Frequencies	--	1184.3849		1208.8611		1220.0487
Red. masses	--	1.4732		1.3849		1.3126
Frc consts	--	1.2176		1.1924		1.1512
IR Inten	--	22.2295		32.0776		15.0739

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	0.03	-0.02	-0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.02	0.00
2	6	-0.04	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00
3	6	0.00	-0.09	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.04	-0.06	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.06	-0.02	-0.02	0.02	-0.01
5	6	-0.02	0.06	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.01	-0.01
6	6	-0.01	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.01
7	6	-0.02	0.03	-0.01	-0.03	0.01	-0.01	-0.09	0.00	-0.03
8	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.04	-0.01
9	6	-0.02	0.05	-0.02	-0.04	-0.07	0.00	0.02	0.00	0.01
10	6	0.04	-0.02	0.02	-0.04	0.02	-0.02	-0.03	-0.01	0.00
11	6	-0.03	-0.03	0.00	0.04	0.00	0.01	0.03	-0.01	0.01
12	6	0.05	0.04	0.01	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.02	-0.06	0.01	0.06	-0.01	0.02	-0.01	0.01	0.00
14	6	0.03	0.02	0.01	0.03	-0.05	0.02	-0.02	0.00	-0.01
15	6	-0.03	0.00	-0.02	-0.02	0.06	-0.03	0.01	-0.01	0.01
16	6	0.03	-0.01	0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01
17	8	0.00	0.03	-0.01	0.02	0.00	0.01	0.04	0.03	0.00
18	1	-0.35	-0.24	-0.05	-0.24	-0.21	-0.02	0.18	0.21	0.01
19	1	0.03	0.06	0.00	0.08	0.08	0.01	0.36	0.34	0.03
20	1	0.19	-0.11	0.08	0.07	-0.02	0.02	0.40	-0.13	0.14
21	1	0.30	0.22	0.02	-0.14	-0.06	-0.02	-0.23	-0.21	-0.01
22	1	-0.32	0.04	-0.10	0.45	-0.11	0.15	0.36	-0.10	0.12
23	1	0.49	-0.07	0.15	0.08	0.02	0.02	0.04	-0.01	0.02
24	1	0.07	0.01	0.01	0.29	-0.12	0.08	-0.17	0.04	-0.05
25	1	-0.05	0.03	0.00	-0.18	0.64	-0.09	0.08	-0.24	0.03
26	1	0.08	0.00	-0.02	-0.06	-0.09	-0.03	0.04	0.08	0.03
27	1	0.40	-0.07	0.13	-0.07	0.02	-0.03	0.29	-0.03	0.09
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

49

50

51

		A			A			A		
Frequencies		--	1228.5048		1239.5130		1271.7946			
Red. masses		--	1.3169		1.7426		1.6233			
Frc consts		--	1.1710		1.5774		1.5470			
IR Inten		--	16.5499		27.3248		39.7421			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.01	0.01	0.01	-0.03	0.01	0.01	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.03	0.04	-0.01
3	6	-0.01	0.01	0.00	0.06	0.06	0.00	0.09	0.04	0.02
4	6	0.00	-0.07	0.01	-0.03	0.01	-0.01	0.05	-0.06	0.03
5	6	-0.04	0.03	-0.02	-0.07	0.02	-0.02	-0.08	0.01	-0.02
6	6	0.01	0.01	0.00	0.02	0.02	0.00	-0.01	0.03	-0.01
7	6	-0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.03	0.01	-0.01
8	6	0.02	-0.10	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.03	-0.01
9	6	0.03	0.03	0.01	0.14	0.11	0.02	-0.09	-0.06	-0.02
10	6	0.03	0.01	0.01	0.02	-0.04	0.01	0.01	-0.02	0.01
11	6	-0.03	-0.03	0.00	-0.01	-0.05	0.01	0.00	0.03	0.00
12	6	-0.03	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.01	-0.05	0.01
13	6	-0.01	0.02	-0.01	-0.09	0.00	-0.03	-0.05	0.05	-0.02
14	6	0.01	0.00	0.01	0.01	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00
15	6	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.04	0.01	0.01
16	6	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.03	-0.02	0.01	-0.03	0.01
17	8	0.01	0.02	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.01
18	1	0.30	0.28	0.03	-0.21	-0.26	-0.01	-0.01	-0.03	0.00
19	1	0.02	0.03	0.00	-0.20	-0.18	-0.02	-0.40	-0.33	-0.04
20	1	0.37	-0.09	0.12	0.22	-0.04	0.07	0.50	-0.11	0.16
21	1	0.22	0.18	0.02	-0.27	-0.32	0.01	0.19	0.16	0.01
22	1	-0.20	0.01	-0.05	0.12	-0.10	0.06	0.28	-0.05	0.09
23	1	-0.34	0.08	-0.11	0.28	-0.11	0.10	0.03	-0.07	0.02
24	1	0.31	-0.08	0.10	0.23	-0.02	0.07	0.01	-0.01	0.00
25	1	-0.09	0.30	-0.05	0.03	-0.22	0.04	0.05	-0.03	0.02
26	1	-0.28	-0.25	-0.03	-0.39	-0.30	-0.02	0.36	0.29	0.03
27	1	0.16	-0.02	0.05	-0.19	0.04	-0.06	-0.05	0.02	-0.02
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		A			A			A		
Frequencies		--	1288.1848		1346.4422		1370.4205			
Red. masses		--	1.8420		2.9155		3.0718			
Frc consts		--	1.8009		3.1141		3.3990			
IR Inten		--	24.3424		180.5334		57.8567			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.04	-0.02	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.05	-0.01
2	6	0.01	0.02	0.00	0.05	0.01	0.01	-0.04	0.04	-0.02
3	6	0.03	0.01	0.01	-0.09	-0.11	0.00	0.04	-0.15	0.04
4	6	-0.04	-0.05	0.00	-0.10	-0.02	-0.02	0.10	0.02	0.02
5	6	-0.06	-0.01	-0.01	-0.18	0.05	-0.06	0.00	0.18	-0.04
6	6	0.02	0.03	0.00	0.07	0.05	0.01	-0.05	-0.04	0.00
7	6	0.01	0.00	0.00	0.23	0.02	0.06	0.08	0.00	0.02
8	6	0.02	0.04	0.00	0.10	0.04	0.02	-0.07	-0.06	-0.01
9	6	0.02	0.08	-0.01	0.04	-0.03	0.02	-0.12	0.14	-0.07
10	6	0.02	-0.04	0.01	0.01	-0.04	0.01	-0.02	-0.08	0.02
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	-0.01	0.03	-0.04	0.02
12	6	0.01	0.02	0.00	-0.01	0.02	-0.01	-0.04	0.06	-0.02
13	6	0.19	-0.05	0.07	0.02	0.05	0.00	-0.01	-0.14	0.02
14	6	-0.01	-0.04	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.02	0.06	0.00
15	6	-0.06	-0.03	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.04	-0.01
16	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.10	0.03	0.03
17	8	0.00	-0.01	0.00	-0.09	-0.03	-0.02	-0.03	-0.01	-0.01
18	1	-0.23	-0.15	-0.04	0.19	0.23	0.01	0.27	0.31	0.02
19	1	-0.13	-0.12	-0.01	0.18	0.11	0.03	-0.21	-0.14	-0.03
20	1	0.28	-0.04	0.09	0.00	0.10	-0.02	-0.28	0.03	-0.08
21	1	-0.09	-0.15	0.01	0.38	0.30	0.03	-0.21	-0.27	0.00
22	1	-0.03	0.00	-0.01	0.38	-0.13	0.13	0.44	-0.16	0.16

23	1	-0.42	0.15	-0.15	0.37	-0.08	0.12	-0.21	0.11	-0.08
24	1	-0.62	0.11	-0.20	-0.12	0.00	-0.04	0.24	0.01	0.07
25	1	-0.09	0.09	-0.06	0.01	0.02	-0.01	-0.03	-0.05	-0.01
26	1	-0.06	-0.05	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.08	-0.02	0.01
27	1	-0.08	0.01	-0.02	-0.29	0.01	-0.08	-0.04	-0.01	-0.01
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			55			56			57	
			A			A			A	
Frequencies	--	1404.6411			1428.1601			1449.8038		
Red. masses	--	4.5162			2.1238			2.5189		
Frc consts	--	5.2499			2.5522			3.1195		
IR Inten	--	20.9944			5.0203			32.2176		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.03	0.00	0.02	0.07	-0.01	-0.08	-0.05	-0.01
2	6	-0.08	-0.07	-0.01	-0.11	-0.07	-0.02	0.03	-0.02	0.01
3	6	0.12	-0.09	0.05	0.09	-0.01	0.03	0.05	-0.10	0.03
4	6	-0.02	0.09	-0.02	0.02	0.06	-0.01	-0.01	0.13	-0.03
5	6	-0.08	-0.04	-0.01	-0.07	-0.08	0.00	0.02	-0.08	0.02
6	6	0.10	-0.05	0.04	0.12	-0.01	0.04	0.02	-0.06	0.02
7	6	-0.01	0.13	-0.03	-0.02	0.02	-0.01	-0.05	0.19	-0.05
8	6	-0.04	0.14	-0.04	-0.02	0.01	-0.01	-0.05	-0.06	0.00
9	6	0.17	0.01	0.04	-0.03	-0.02	0.00	-0.03	-0.08	0.01
10	6	0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.06	0.01	0.00	0.05	-0.01
11	6	0.01	-0.03	0.01	-0.06	0.06	-0.03	0.01	0.01	0.00
12	6	-0.02	0.04	-0.01	0.05	-0.05	0.02	-0.01	0.04	-0.01
13	6	-0.11	-0.19	0.00	0.01	0.00	0.00	0.07	0.05	0.01
14	6	0.18	-0.03	0.06	-0.05	-0.01	-0.02	-0.02	-0.01	-0.01
15	6	-0.03	0.15	-0.03	-0.02	0.03	-0.02	-0.03	-0.04	-0.01
16	6	-0.18	-0.17	-0.02	0.09	0.06	0.02	0.08	0.08	0.01
17	8	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.03	0.01
18	1	0.25	0.27	0.02	-0.21	-0.16	-0.03	0.33	0.36	0.03
19	1	-0.05	-0.04	0.00	0.15	0.21	0.00	-0.25	-0.33	0.00
20	1	-0.12	0.01	-0.04	-0.22	0.09	-0.08	0.20	-0.13	0.08
21	1	0.00	0.01	0.00	0.31	0.24	0.03	-0.02	0.03	-0.01
22	1	-0.28	0.05	-0.09	0.25	-0.02	0.07	-0.18	0.06	-0.06
23	1	-0.32	0.13	-0.12	-0.38	0.07	-0.12	0.29	-0.03	0.09
24	1	0.00	0.01	-0.03	0.19	-0.08	0.07	-0.15	0.02	-0.04
25	1	-0.05	0.16	0.00	0.07	-0.37	0.07	-0.02	-0.09	0.00
26	1	0.35	0.34	0.01	-0.21	-0.26	-0.02	-0.24	-0.24	-0.03
27	1	-0.18	0.04	-0.06	0.05	0.00	0.01	-0.31	0.06	-0.10
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			58			59			60	
			A			A			A	
Frequencies	--	1454.4292			1462.3855			1485.3477		
Red. masses	--	5.5262			2.6512			3.2801		
Frc consts	--	6.8875			3.3406			4.2638		
IR Inten	--	89.0896			4.4440			8.0439		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.10	0.04	0.02	0.02	0.03	0.00	0.05	0.07	0.00
2	6	-0.03	-0.08	0.01	0.11	0.06	0.02	-0.01	0.06	-0.01
3	6	0.07	0.00	0.02	-0.08	-0.06	-0.01	0.13	-0.08	0.05
4	6	-0.24	0.01	-0.07	-0.08	-0.05	-0.01	-0.17	-0.08	-0.03
5	6	-0.05	-0.03	-0.01	0.09	0.01	0.02	0.13	0.18	0.00
6	6	0.10	-0.03	0.04	-0.10	0.01	-0.03	0.01	-0.06	0.02
7	6	-0.08	0.11	-0.04	0.00	0.01	0.00	-0.12	-0.04	-0.02
8	6	0.32	-0.08	0.10	0.07	0.15	-0.01	-0.02	0.03	-0.01
9	6	-0.16	0.16	-0.08	-0.01	-0.07	0.01	0.12	-0.07	0.05
10	6	-0.13	-0.07	-0.01	-0.06	-0.01	-0.01	-0.11	-0.04	-0.02
11	6	0.20	0.02	0.05	0.04	0.02	0.01	0.02	-0.01	0.01
12	6	-0.10	-0.01	-0.03	-0.01	0.03	-0.01	-0.06	-0.06	-0.01
13	6	-0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.13	0.03	0.00	0.09	-0.01
14	6	-0.12	0.05	-0.04	-0.05	-0.04	-0.01	0.05	-0.03	0.02
15	6	0.08	-0.06	0.05	-0.03	0.17	-0.04	-0.02	-0.04	0.00

16	6	0.00	-0.03	0.00	0.03	-0.02	0.02	-0.02	0.05	-0.02
17	8	0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.03	0.02	0.01
18	1	-0.06	-0.13	0.01	-0.06	-0.04	-0.01	0.00	0.01	0.00
19	1	0.02	-0.03	0.01	-0.15	-0.21	0.00	-0.26	-0.19	-0.03
20	1	-0.09	0.02	-0.03	0.23	-0.09	0.08	-0.43	0.05	-0.13
21	1	-0.14	-0.07	-0.03	0.07	0.12	-0.01	0.26	0.32	-0.01
22	1	-0.37	0.18	-0.15	0.00	0.04	-0.01	0.28	-0.07	0.09
23	1	0.05	-0.06	0.03	-0.15	0.07	-0.06	0.08	-0.11	0.04
24	1	0.30	-0.05	0.10	0.45	-0.19	0.17	-0.32	0.07	-0.11
25	1	0.07	0.09	-0.01	0.13	-0.54	0.13	-0.07	0.13	-0.04
26	1	0.32	0.31	0.06	-0.13	-0.22	-0.01	-0.18	-0.09	-0.02
27	1	-0.12	0.04	-0.04	-0.07	0.01	-0.02	0.16	-0.01	0.05
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			61			62			63	
			A			A			A	
Frequencies	--	1499.3411			1507.8980			1530.1013		
Red. masses	--	4.2557			5.3096			3.2409		
Frc consts	--	5.6367			7.1130			4.4705		
IR Inten	--	9.1340			69.1338			23.2361		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.07	0.10	-0.04	-0.17	-0.17	-0.02	0.04	0.09	-0.01
2	6	-0.02	-0.03	0.00	0.05	-0.06	0.03	0.08	-0.04	0.03
3	6	0.00	-0.11	0.02	-0.08	0.20	-0.06	-0.16	-0.07	-0.03
4	6	0.00	-0.03	0.01	0.07	-0.15	0.05	0.04	0.01	0.01
5	6	-0.04	0.18	-0.05	0.05	0.06	0.00	0.10	-0.02	0.03
6	6	-0.02	-0.04	0.00	0.04	-0.08	0.03	-0.05	-0.06	0.00
7	6	0.07	0.08	0.00	-0.07	0.12	-0.05	0.01	0.18	-0.03
8	6	-0.07	-0.12	0.00	0.02	-0.12	0.02	-0.01	0.01	-0.01
9	6	0.03	-0.04	0.01	0.00	0.19	-0.04	0.08	0.04	0.01
10	6	0.02	0.11	-0.02	-0.16	-0.18	0.00	-0.05	-0.07	0.01
11	6	0.11	-0.12	0.06	0.06	0.07	0.00	-0.06	0.05	-0.03
12	6	0.19	-0.11	0.08	0.13	0.05	0.03	0.11	-0.05	0.04
13	6	0.04	0.22	-0.03	-0.02	0.06	-0.01	-0.11	-0.03	-0.03
14	6	-0.11	-0.06	-0.03	0.11	-0.10	0.05	-0.02	0.10	-0.02
15	6	0.04	0.12	0.00	-0.09	0.15	-0.06	0.06	-0.16	0.05
16	6	-0.06	-0.08	0.00	0.01	-0.07	0.03	-0.05	0.03	-0.03
17	8	-0.02	-0.02	0.00	0.02	-0.02	0.01	0.00	-0.04	0.01
18	1	-0.28	-0.08	-0.06	0.19	0.21	0.02	-0.30	-0.22	-0.04
19	1	0.01	-0.01	0.00	0.11	-0.01	0.03	0.01	-0.15	0.03
20	1	-0.06	-0.03	-0.01	-0.18	-0.03	-0.04	0.19	-0.13	0.08
21	1	-0.33	-0.21	-0.04	0.31	0.27	0.02	0.22	0.17	0.02
22	1	-0.33	0.00	-0.09	0.27	0.03	0.06	0.23	-0.02	0.07
23	1	-0.39	0.06	-0.13	0.09	0.08	0.01	-0.38	0.08	-0.12
24	1	0.11	-0.13	0.05	-0.26	-0.01	-0.09	0.06	0.10	0.01
25	1	0.14	-0.26	0.08	0.00	-0.33	0.07	-0.05	0.38	-0.08
26	1	0.13	0.10	0.02	0.10	-0.02	-0.02	0.04	0.16	0.01
27	1	-0.14	0.01	-0.04	-0.14	0.03	-0.05	-0.27	0.04	-0.08
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			64			65			66	
			A			A			A	
Frequencies	--	1570.1457			1628.0472			1633.0712		
Red. masses	--	4.0565			7.1399			5.7307		
Frc consts	--	5.8923			11.1501			9.0046		
IR Inten	--	4.8650			31.5831			164.9760		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	0.04	0.01	0.06	0.09	0.00	0.13	0.08	0.02
2	6	-0.06	-0.08	0.00	-0.03	0.07	-0.02	0.09	0.00	0.02
3	6	-0.02	0.03	-0.01	0.07	-0.18	0.05	-0.12	-0.04	-0.03
4	6	0.01	-0.05	0.01	-0.07	0.27	-0.07	-0.06	-0.06	0.00
5	6	-0.05	0.04	-0.02	0.14	-0.20	0.08	0.05	0.05	0.00
6	6	-0.07	0.02	-0.02	-0.23	0.12	-0.09	0.12	-0.09	0.05
7	6	0.11	0.05	0.02	0.13	-0.15	0.07	-0.11	0.11	-0.05
8	6	0.07	0.07	0.01	0.04	-0.23	0.05	0.14	-0.07	0.05



9	6	-0.12	-0.13	0.00	0.01	0.19	-0.04	-0.16	0.01	-0.05
10	6	-0.07	0.04	-0.03	-0.06	-0.11	0.01	0.28	0.12	0.05
11	6	0.18	-0.03	0.06	-0.03	0.08	-0.03	-0.29	-0.03	-0.07
12	6	0.02	-0.04	0.01	-0.01	-0.07	0.01	-0.08	-0.04	-0.02
13	6	-0.20	-0.02	-0.06	-0.07	0.17	-0.05	-0.08	0.06	-0.03
14	6	0.23	-0.03	0.08	0.14	-0.11	0.06	0.14	-0.09	0.06
15	6	-0.09	-0.04	-0.04	-0.07	0.14	-0.05	-0.07	0.11	-0.05
16	6	0.13	0.14	0.02	-0.03	-0.09	0.02	0.03	-0.03	0.03
17	8	-0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.01
18	1	-0.12	-0.14	-0.01	-0.07	-0.04	-0.01	-0.14	-0.19	0.00
19	1	0.20	0.18	0.02	-0.06	0.05	-0.03	-0.06	-0.17	0.02
20	1	0.19	-0.04	0.06	0.46	-0.07	0.14	-0.23	0.00	-0.06
21	1	-0.13	0.01	-0.04	0.14	0.08	0.02	-0.21	-0.37	0.04
22	1	-0.31	0.11	-0.11	0.10	0.06	0.02	0.27	-0.21	0.13
23	1	-0.16	0.00	-0.05	-0.03	-0.07	0.00	0.02	-0.08	0.02
24	1	-0.42	0.15	-0.16	-0.29	0.00	-0.09	-0.23	0.00	-0.07
25	1	-0.14	0.03	-0.03	-0.01	-0.17	0.03	-0.02	-0.16	0.03
26	1	-0.25	-0.29	-0.05	0.12	0.03	-0.01	0.05	-0.07	-0.02
27	1	-0.10	0.01	-0.03	0.07	-0.03	0.03	-0.07	0.02	-0.02
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

67

68

69

		A			A			A		
Frequencies	--	1639.4928			1666.4684			3162.9610		
Red. masses	--	5.5518			6.5112			1.0890		
Frc consts	--	8.7922			10.6538			6.4188		
IR Inten	--	217.1094			18.7419			8.2892		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.24	-0.08	-0.05	-0.17	-0.11	-0.03	0.00	0.00	0.00
2	6	0.14	0.20	0.00	-0.21	-0.16	-0.02	0.00	0.00	0.00
3	6	0.01	-0.09	0.02	0.25	0.12	0.05	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.10	0.08	-0.04	-0.22	-0.10	-0.04	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.08	-0.07	-0.01	0.24	0.08	0.05	0.00	0.00	0.00
6	6	0.11	0.04	0.02	-0.20	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.12	-0.19	0.01	0.14	0.09	0.02	0.00	0.00	0.00
8	6	0.15	0.04	0.03	0.13	0.07	0.02	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.07	-0.02	-0.01	-0.04	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	0.04	0.02	0.01	0.13	0.06	0.02	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.01	0.00	0.00	-0.19	-0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00
12	6	0.31	0.01	0.09	0.13	0.03	0.03	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.18	-0.04	-0.05	-0.02	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.04	0.04	0.00	-0.05	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
15	6	0.01	-0.07	0.01	0.03	-0.04	0.01	0.01	0.00	0.00
16	6	0.03	0.05	0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.05	0.05	-0.05
17	8	0.02	0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.09	0.29	-0.03	0.19	0.26	0.01	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.30	-0.24	-0.03	0.22	0.28	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.20	0.13	-0.08	0.26	-0.14	0.10	0.00	0.01	0.00
21	1	-0.06	-0.07	0.00	-0.06	-0.14	0.02	-0.02	0.02	-0.01
22	1	-0.04	0.00	-0.01	0.26	-0.14	0.11	0.00	-0.01	0.00
23	1	-0.36	0.22	-0.15	-0.09	0.11	-0.05	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.02	0.07	-0.02	0.09	0.00	0.03	0.00	0.01	0.00
25	1	-0.03	0.09	-0.01	0.02	0.05	0.01	-0.14	-0.04	-0.05
26	1	-0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.03	-0.01	0.56	-0.61	0.54
27	1	0.22	-0.03	0.07	-0.12	0.02	-0.04	0.00	0.00	0.00
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

70

71

72

		A			A			A		
Frequencies	--	3197.1843			3198.4868			3208.6354		
Red. masses	--	1.0911			1.0897			1.0883		
Frc consts	--	6.5714			6.5685			6.6017		
IR Inten	--	4.0636			3.8540			0.0849		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.04	-0.02

2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.02	-0.07	0.01	-0.02	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.02	-0.03	0.01	-0.04	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00
11	6	0.01	0.03	0.00	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.01
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.45	-0.48	0.22
19	1	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.02	-0.01
20	1	0.24	0.76	-0.10	0.18	0.55	-0.07	0.00	-0.01	0.00
21	1	-0.29	0.32	-0.16	0.44	-0.48	0.24	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.11	-0.33	0.05	0.13	0.40	-0.06	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.19	0.63	-0.06
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.17	0.01
25	1	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.16	0.05	0.05
26	1	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.02	0.01
27	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

73

74

75

		A			A			A		
Frequencies	--	3210.8879			3221.2458			3229.2043		
Red. masses	--	1.0893			1.0980			1.0987		
Frc consts	--	6.6165			6.7126			6.7503		
IR Inten	--	0.7069			9.7782			4.3063		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.04	0.02
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.07	0.01	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.05	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.02	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.00
15	6	-0.06	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.01
16	6	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.13	0.14	-0.06	-0.01	0.01	0.00	-0.39	0.41	-0.19
19	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.07	-0.08	0.03
20	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00
21	1	0.01	-0.01	0.00	-0.35	0.38	-0.19	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	0.26	0.78	-0.12	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.04	-0.14	0.01	0.00	0.01	0.00	0.18	0.59	-0.05
24	1	-0.16	-0.56	0.03	0.00	0.01	0.00	-0.10	-0.35	0.02
25	1	0.68	0.21	0.24	0.01	0.00	0.00	-0.29	-0.09	-0.10
26	1	0.07	-0.08	0.07	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.03	-0.02
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

76

77

78



**Table S33.** Cartesian coordinates of optimized structure for (14-C<sub>3</sub>)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	1.319165	2.695118	-0.438965
2	6	0	-0.976674	2.248451	0.412689
3	6	0	0.332462	1.798069	0.102332
4	6	0	0.708461	0.427793	0.361564
5	6	0	-0.252706	-0.490167	0.891386
6	6	0	-1.625370	-0.041116	1.099561
7	6	0	-1.920896	1.368284	0.937735
8	6	0	2.052118	-0.003497	0.124310
9	6	0	2.442913	-1.345532	0.439610
10	6	0	1.466272	-2.230904	1.013729
11	6	0	0.164988	-1.820503	1.233050
12	6	0	2.604243	2.265076	-0.694862
13	6	0	3.015471	0.910678	-0.415825
14	6	0	4.337329	0.464773	-0.647833
15	6	0	4.713918	-0.858158	-0.345588
16	6	0	3.780724	-1.754073	0.196374
17	8	0	-3.153039	1.899922	1.280224
18	1	0	1.033926	3.724022	-0.638724
19	1	0	-1.251472	3.290009	0.282210
20	1	0	-2.239500	-0.621073	1.794184
21	1	0	1.769601	-3.239946	1.282232
22	1	0	-0.555705	-2.506115	1.672853
23	1	0	3.336509	2.956210	-1.105513
24	1	0	5.069720	1.154999	-1.059214
25	1	0	5.733681	-1.183274	-0.527182
26	1	0	4.080997	-2.770473	0.438916
27	1	0	-3.702223	1.323051	1.851760
28	47	0	-2.575016	-0.832607	-0.847849

**Table S34. Vibrational frequencies for (14-C<sub>3</sub>)**

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	38.1887			53.0287			90.4612		
Red. masses	--	12.6934			7.8202			6.8834		
Frc consts	--	0.0109			0.0130			0.0332		
IR Inten	--	0.3638			0.2254			0.1244		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.12	0.03	0.02	0.11	0.11	0.17	-0.05	-0.03	-0.16
2	6	0.09	-0.01	-0.08	0.05	0.14	0.03	0.00	0.03	-0.01
3	6	0.10	0.00	-0.05	0.05	0.11	0.08	-0.04	-0.01	-0.11
4	6	0.10	0.00	-0.07	-0.01	0.09	0.01	-0.06	-0.01	-0.13
5	6	0.09	-0.02	-0.13	-0.05	0.10	-0.04	-0.06	0.00	-0.12
6	6	0.09	-0.02	-0.12	-0.04	0.14	-0.05	-0.03	0.04	-0.01
7	6	0.09	-0.02	-0.10	0.00	0.14	-0.05	0.02	0.06	0.09
8	6	0.12	0.02	-0.01	-0.02	0.04	-0.01	-0.05	-0.02	-0.09
9	6	0.12	0.02	-0.02	-0.09	0.00	-0.11	-0.05	-0.01	-0.05
10	6	0.10	-0.01	-0.12	-0.13	0.01	-0.15	-0.09	-0.04	-0.16
11	6	0.08	-0.03	-0.17	-0.10	0.07	-0.11	-0.09	-0.03	-0.19
12	6	0.15	0.06	0.09	0.09	0.08	0.17	-0.03	-0.03	-0.10
13	6	0.15	0.05	0.09	0.02	0.03	0.07	-0.02	0.00	-0.02
14	6	0.17	0.09	0.18	0.00	-0.02	0.03	0.02	0.04	0.16
15	6	0.18	0.09	0.17	-0.07	-0.07	-0.09	0.03	0.06	0.25
16	6	0.15	0.05	0.06	-0.12	-0.06	-0.15	-0.01	0.03	0.12
17	8	0.09	-0.02	-0.10	0.00	0.17	-0.11	0.13	0.13	0.34
18	1	0.12	0.03	0.03	0.16	0.14	0.24	-0.05	-0.04	-0.20
19	1	0.09	-0.01	-0.07	0.08	0.15	0.06	0.03	0.05	0.05
20	1	0.12	-0.01	-0.08	-0.05	0.16	-0.03	0.00	0.04	0.02
21	1	0.09	-0.02	-0.15	-0.18	-0.02	-0.21	-0.11	-0.05	-0.18
22	1	0.07	-0.05	-0.23	-0.13	0.08	-0.13	-0.11	-0.04	-0.23
23	1	0.16	0.08	0.16	0.14	0.08	0.24	-0.03	-0.03	-0.10
24	1	0.19	0.11	0.26	0.04	-0.02	0.08	0.05	0.05	0.23
25	1	0.20	0.11	0.24	-0.09	-0.11	-0.13	0.07	0.10	0.40
26	1	0.15	0.05	0.05	-0.17	-0.09	-0.24	-0.01	0.04	0.16
27	1	0.10	-0.01	-0.08	-0.08	0.15	-0.20	0.12	0.08	0.28
28	47	-0.24	-0.03	0.04	0.04	-0.13	0.04	0.04	-0.03	0.00
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	114.3637			175.2136			213.9940		
Red. masses	--	9.3646			4.6945			4.6319		
Frc consts	--	0.0722			0.0849			0.1250		
IR Inten	--	0.9770			0.9554			6.5628		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	0.04	0.07	0.02	0.01	0.07	0.06	0.06	0.21
2	6	0.09	0.09	0.20	0.07	0.06	0.24	-0.04	-0.03	-0.10
3	6	0.06	0.06	0.10	0.05	0.04	0.16	-0.03	-0.02	-0.09
4	6	0.04	0.05	0.06	0.01	0.01	0.02	-0.06	-0.06	-0.21
5	6	0.02	0.05	0.02	-0.01	-0.01	-0.05	-0.04	-0.05	-0.17
6	6	-0.01	0.03	-0.06	-0.01	0.00	-0.03	-0.03	-0.03	-0.09
7	6	0.07	0.07	0.12	0.01	0.02	0.05	-0.03	-0.03	-0.08
8	6	0.03	0.04	0.05	-0.01	-0.01	-0.04	-0.05	-0.04	-0.16
9	6	0.04	0.06	0.14	0.01	0.01	0.03	-0.01	0.01	0.02
10	6	0.05	0.10	0.22	-0.02	-0.02	-0.07	0.02	0.05	0.12
11	6	0.03	0.08	0.12	-0.04	-0.05	-0.16	-0.01	0.01	-0.01
12	6	0.02	0.00	-0.05	-0.04	-0.05	-0.16	0.05	0.05	0.17
13	6	0.01	-0.01	-0.06	-0.04	-0.05	-0.15	-0.03	-0.03	-0.10
14	6	-0.03	-0.06	-0.17	-0.03	-0.04	-0.13	-0.04	-0.05	-0.13
15	6	-0.02	-0.04	-0.09	0.03	0.03	0.11	-0.02	-0.01	-0.01

16	6	0.02	0.03	0.09	0.05	0.06	0.19	0.02	0.04	0.14
17	8	0.14	0.11	0.29	-0.08	-0.04	-0.17	0.02	-0.02	0.06
18	1	0.08	0.06	0.11	0.04	0.03	0.13	0.13	0.13	0.46
19	1	0.14	0.12	0.33	0.10	0.08	0.32	-0.02	-0.02	-0.03
20	1	-0.03	0.00	-0.11	-0.02	-0.02	-0.07	0.03	-0.01	-0.03
21	1	0.07	0.14	0.33	-0.03	-0.03	-0.10	0.07	0.11	0.31
22	1	0.03	0.10	0.15	-0.07	-0.09	-0.27	0.00	0.04	0.06
23	1	0.01	-0.03	-0.12	-0.08	-0.09	-0.29	0.11	0.11	0.38
24	1	-0.05	-0.10	-0.29	-0.06	-0.07	-0.24	-0.04	-0.06	-0.16
25	1	-0.04	-0.07	-0.16	0.06	0.07	0.21	-0.01	-0.01	0.01
26	1	0.04	0.05	0.17	0.09	0.11	0.33	0.07	0.10	0.33
27	1	0.09	0.02	0.15	-0.15	-0.05	-0.26	0.04	-0.07	0.03
28	47	-0.08	-0.09	-0.13	0.01	0.00	0.02	0.02	0.02	0.03
			7			8			9	
			A			A			A	
Frequencies	--	224.4305			261.3303			294.9286		
Red. masses	--	4.4729			5.5240			3.4914		
Frc consts	--	0.1327			0.2223			0.1789		
IR Inten	--	7.3770			8.1336			4.8494		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	-0.04	-0.06	-0.06	0.08	0.05	0.04	0.08
2	6	-0.05	-0.03	-0.15	0.04	-0.08	-0.05	-0.06	-0.02	-0.15
3	6	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.13	0.03	0.00	0.03	0.00
4	6	0.03	0.04	0.13	-0.03	-0.13	0.05	0.03	0.05	0.07
5	6	-0.01	-0.01	-0.05	-0.05	-0.10	0.08	0.05	0.07	0.16
6	6	-0.01	-0.02	-0.06	-0.07	-0.01	0.10	0.08	0.06	0.21
7	6	-0.02	-0.02	-0.06	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	0.03
8	6	0.06	0.07	0.23	-0.02	-0.07	0.01	0.00	0.00	-0.04
9	6	0.05	0.06	0.20	0.06	-0.05	0.00	-0.02	-0.01	-0.06
10	6	-0.02	-0.02	-0.05	0.06	-0.07	-0.02	-0.04	-0.04	-0.14
11	6	-0.07	-0.08	-0.23	0.03	-0.11	0.02	0.01	0.02	0.03
12	6	0.00	0.01	0.02	-0.07	-0.01	0.06	0.03	0.01	0.04
13	6	0.03	0.03	0.10	-0.08	-0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.09
14	6	-0.04	-0.04	-0.14	-0.07	0.10	-0.06	-0.01	-0.06	-0.11
15	6	-0.04	-0.04	-0.13	0.04	0.14	-0.04	0.02	0.00	0.09
16	6	0.02	0.03	0.11	0.11	0.07	-0.01	0.01	0.02	0.10
17	8	0.03	0.01	0.07	0.12	0.36	-0.10	-0.04	-0.05	0.01
18	1	-0.04	-0.03	-0.14	-0.12	-0.06	0.15	0.09	0.07	0.16
19	1	-0.08	-0.05	-0.24	0.08	-0.08	-0.11	-0.13	-0.06	-0.31
20	1	-0.01	-0.01	-0.05	-0.11	0.04	0.11	0.06	0.05	0.18
21	1	-0.06	-0.07	-0.17	0.07	-0.08	-0.05	-0.07	-0.09	-0.29
22	1	-0.14	-0.16	-0.49	0.08	-0.17	0.01	0.01	0.02	0.02
23	1	-0.02	-0.01	-0.05	-0.07	0.01	0.10	0.05	0.03	0.10
24	1	-0.10	-0.11	-0.35	-0.14	0.16	-0.09	-0.03	-0.09	-0.19
25	1	-0.10	-0.10	-0.32	0.06	0.21	-0.05	0.05	0.02	0.21
26	1	0.02	0.03	0.10	0.21	0.10	0.01	0.02	0.05	0.21
27	1	0.03	-0.04	0.02	-0.14	0.53	-0.17	0.24	0.17	0.50
28	47	0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03
			10			11			12	
			A			A			A	
Frequencies	--	335.8555			369.2939			382.1399		
Red. masses	--	1.5155			5.7988			3.1881		
Frc consts	--	0.1007			0.4659			0.2743		
IR Inten	--	73.9770			6.9813			23.9242		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.02	0.04	0.02	0.11	0.03	-0.03	0.01	-0.14
2	6	-0.02	-0.01	-0.07	0.13	-0.01	-0.06	0.06	-0.01	0.09
3	6	0.01	0.02	0.04	0.11	0.03	0.02	0.00	-0.01	-0.11
4	6	0.01	0.02	0.06	0.01	0.01	0.06	-0.02	-0.02	-0.10
5	6	0.02	0.01	0.05	0.05	-0.07	0.01	0.03	-0.01	0.02
6	6	0.00	-0.01	-0.03	0.09	-0.08	-0.10	0.08	0.00	0.18
7	6	-0.02	-0.02	-0.07	0.21	-0.08	-0.10	0.09	-0.02	0.12
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.01	0.04	-0.02	0.02	-0.05

9	6	-0.01	-0.01	-0.04	-0.13	-0.01	0.02	-0.04	0.03	0.03
10	6	-0.01	-0.01	-0.03	-0.06	-0.07	0.04	-0.02	-0.01	-0.03
11	6	0.01	0.02	0.04	-0.04	-0.07	0.06	-0.01	-0.02	-0.01
12	6	-0.01	-0.01	-0.03	-0.04	0.07	-0.08	0.04	0.08	0.11
13	6	-0.01	-0.01	-0.04	-0.14	0.06	-0.02	0.01	0.06	0.07
14	6	-0.01	-0.01	-0.01	-0.16	0.08	0.03	-0.04	-0.01	-0.02
15	6	0.01	0.01	0.05	-0.18	0.10	0.07	-0.08	-0.03	-0.06
16	6	-0.01	-0.01	-0.01	-0.16	0.03	-0.01	-0.04	0.03	0.11
17	8	0.06	0.01	0.08	0.25	-0.10	-0.08	0.06	-0.02	-0.06
18	1	0.02	0.02	0.06	-0.04	0.10	0.08	-0.07	-0.01	-0.18
19	1	-0.04	-0.02	-0.11	0.08	-0.02	-0.01	0.02	-0.02	0.09
20	1	0.02	0.03	0.04	0.01	-0.03	-0.13	0.12	0.01	0.22
21	1	-0.01	-0.02	-0.07	0.00	-0.06	0.01	0.00	-0.02	-0.08
22	1	0.01	0.02	0.05	-0.09	-0.03	0.06	-0.02	-0.01	-0.01
23	1	-0.02	-0.02	-0.06	0.00	-0.01	-0.15	0.10	0.12	0.27
24	1	-0.01	-0.01	-0.02	-0.15	0.07	0.04	-0.03	-0.05	-0.07
25	1	0.03	0.03	0.12	-0.16	0.12	0.12	-0.12	-0.08	-0.15
26	1	-0.01	-0.01	-0.01	-0.12	0.03	-0.07	-0.03	0.07	0.23
27	1	-0.35	-0.44	-0.77	0.49	0.13	0.39	-0.27	-0.24	-0.60
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01

			13				14			15
			A				A			A
Frequencies	--	413.6910				426.4686				481.3616
Red. masses	--	4.2455				3.8495				7.1900
Frc consts	--	0.4281				0.4125				0.9816
IR Inten	--	15.6404				5.0790				4.3264

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	-0.05	-0.09	0.04	0.03	0.08	-0.18	0.19	-0.01
2	6	0.05	0.16	0.03	0.00	0.08	-0.10	-0.10	0.09	0.02
3	6	-0.01	-0.01	-0.06	0.02	0.04	0.03	-0.11	0.15	-0.01
4	6	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	0.04	0.11	-0.04
5	6	0.00	0.03	0.05	-0.01	0.00	-0.06	0.17	0.05	-0.07
6	6	0.01	0.12	-0.15	0.10	0.14	0.19	0.14	-0.01	-0.06
7	6	0.03	0.14	-0.07	0.05	0.10	0.05	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.03	-0.12	0.04	-0.03	-0.08	-0.01	-0.01	-0.06	0.01
9	6	0.02	-0.14	-0.03	0.04	-0.05	0.11	0.11	-0.10	-0.02
10	6	-0.05	-0.12	-0.06	0.02	-0.02	0.16	0.19	-0.10	-0.01
11	6	0.00	0.03	0.10	-0.05	-0.06	-0.15	0.24	0.04	-0.07
12	6	0.00	-0.07	0.13	-0.03	-0.08	-0.06	-0.20	0.05	0.05
13	6	-0.07	-0.07	0.11	-0.08	-0.07	-0.03	-0.14	-0.01	0.04
14	6	-0.09	0.06	-0.08	-0.02	0.08	0.11	-0.17	-0.15	0.08
15	6	0.04	0.12	-0.05	0.00	0.06	-0.06	-0.04	-0.15	0.06
16	6	0.12	0.05	0.04	0.03	-0.01	-0.08	0.07	-0.23	0.05
17	8	-0.04	-0.11	0.04	-0.03	-0.07	0.01	0.03	0.10	-0.04
18	1	0.01	-0.06	-0.17	0.11	0.06	0.16	-0.14	0.19	-0.04
19	1	0.19	0.21	0.11	-0.02	0.05	-0.29	-0.19	0.08	0.07
20	1	-0.08	0.18	-0.17	0.13	0.19	0.26	0.19	-0.08	-0.07
21	1	-0.15	-0.17	-0.12	0.01	0.01	0.30	0.15	-0.10	0.02
22	1	0.00	0.08	0.17	-0.11	-0.07	-0.26	0.20	0.09	-0.06
23	1	0.09	-0.11	0.23	0.00	-0.15	-0.12	-0.16	0.01	0.06
24	1	-0.21	0.12	-0.19	-0.03	0.19	0.27	-0.14	-0.19	0.08
25	1	0.06	0.20	-0.07	-0.01	0.09	-0.13	0.00	0.01	0.02
26	1	0.28	0.11	0.10	0.08	-0.03	-0.23	0.03	-0.23	0.09
27	1	0.15	-0.27	0.05	-0.03	-0.26	-0.18	-0.03	0.23	0.04
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00

			16				17			18
			A				A			A
Frequencies	--	505.9684				511.3076				517.2703
Red. masses	--	4.5590				4.6718				3.6942
Frc consts	--	0.6877				0.7196				0.5824
IR Inten	--	8.6646				0.6522				2.5543
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	-0.08	-0.03	0.20	0.09	-0.06	-0.03	-0.02	-0.16





		A			A			A		
Frequencies	--	576.9343			618.5144			643.6030		
Red. masses	--	6.1504			6.3159			3.6728		
Frc consts	--	1.2062			1.4236			0.8964		
IR Inten	--	3.3472			4.1035			1.6869		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	0.12	-0.05	0.11	-0.16	0.01	0.01	0.02	0.03
2	6	0.14	-0.08	-0.04	0.08	-0.15	-0.01	-0.03	0.00	-0.10
3	6	0.17	-0.06	0.02	0.12	-0.16	0.00	-0.01	0.00	-0.04
4	6	-0.03	-0.11	0.04	0.13	-0.04	0.00	0.01	0.02	0.08
5	6	-0.20	-0.03	0.01	0.14	0.07	-0.05	-0.03	-0.03	-0.05
6	6	-0.19	0.04	0.08	0.11	0.04	-0.08	-0.06	-0.03	-0.16
7	6	-0.01	0.05	-0.01	-0.11	0.05	0.04	0.13	0.09	0.35
8	6	0.01	-0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
9	6	0.14	-0.04	-0.09	-0.03	0.08	0.00	0.01	0.00	0.00
10	6	0.05	0.15	-0.04	0.11	0.05	-0.06	-0.02	-0.02	-0.06
11	6	-0.01	0.05	-0.03	0.16	0.09	-0.06	0.00	0.01	0.07
12	6	0.08	0.23	-0.09	0.09	-0.09	0.00	-0.01	0.01	-0.04
13	6	-0.10	0.14	0.05	-0.10	-0.04	0.01	-0.02	-0.01	-0.07
14	6	-0.20	-0.07	0.05	-0.19	0.04	0.06	0.02	0.01	0.06
15	6	-0.01	-0.06	0.04	-0.25	0.07	0.03	0.00	-0.03	-0.07
16	6	0.15	-0.20	0.02	-0.15	0.05	0.04	0.03	0.01	0.05
17	8	-0.06	-0.08	0.04	-0.20	0.08	0.07	-0.01	-0.02	-0.05
18	1	-0.16	0.06	-0.07	0.08	-0.16	0.05	0.05	0.07	0.19
19	1	0.23	-0.07	-0.14	0.26	-0.11	-0.15	-0.19	-0.10	-0.58
20	1	-0.25	0.14	0.11	0.20	-0.14	-0.15	-0.12	-0.18	-0.34
21	1	0.01	0.17	0.08	0.15	0.06	-0.12	-0.03	-0.04	-0.09
22	1	0.15	-0.08	0.05	0.15	0.09	-0.09	0.04	0.04	0.18
23	1	0.12	0.14	-0.17	0.16	-0.15	0.04	0.02	0.04	0.05
24	1	-0.18	-0.13	-0.02	-0.18	0.06	0.11	0.06	0.05	0.21
25	1	0.06	0.19	-0.03	-0.25	0.10	0.01	-0.01	-0.03	-0.12
26	1	0.15	-0.19	0.05	-0.15	0.06	0.05	0.05	0.03	0.13
27	1	0.08	-0.21	0.04	-0.19	-0.01	0.00	-0.13	-0.01	-0.15
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		A			A			A		
Frequencies	--	720.8125			751.5066			771.6454		
Red. masses	--	3.8874			2.8027			5.4757		
Frc consts	--	1.1900			0.9326			1.9210		
IR Inten	--	0.4184			35.1427			6.3095		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.04	0.11	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.06	-0.02
2	6	0.01	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.05	-0.01	-0.05	0.01
3	6	-0.06	-0.06	-0.22	-0.04	-0.03	-0.13	0.01	-0.01	0.01
4	6	0.01	0.00	-0.01	0.04	0.04	0.15	0.02	-0.02	-0.01
5	6	0.06	0.07	0.22	-0.03	-0.04	-0.12	0.13	-0.08	0.00
6	6	-0.01	-0.01	-0.05	0.03	0.02	0.07	0.28	0.03	-0.06
7	6	0.02	0.01	0.06	-0.02	-0.02	-0.07	-0.04	-0.04	-0.01
8	6	0.00	0.00	0.01	0.04	0.05	0.17	-0.05	0.05	-0.02
9	6	-0.06	-0.06	-0.19	-0.03	-0.03	-0.13	0.01	0.12	-0.02
10	6	0.03	0.04	0.11	-0.01	0.00	-0.02	-0.14	0.14	-0.01
11	6	-0.03	-0.03	-0.11	-0.01	-0.01	-0.01	-0.22	-0.15	0.11
12	6	-0.04	-0.04	-0.11	-0.01	-0.01	-0.03	0.02	0.02	-0.01
13	6	0.05	0.05	0.19	-0.04	-0.03	-0.11	-0.11	-0.02	0.04
14	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.06	-0.14	-0.12	0.08
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	-0.10	0.24	-0.05	-0.04
16	6	0.00	0.00	0.01	0.02	0.02	0.05	0.10	0.04	-0.04
17	8	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.06	0.03
18	1	0.10	0.10	0.35	0.09	0.09	0.30	0.00	0.05	-0.02
19	1	0.09	0.03	0.20	0.10	0.06	0.31	-0.02	-0.05	0.01
20	1	-0.15	-0.08	-0.24	0.10	0.06	0.16	0.20	-0.23	-0.36
21	1	0.08	0.10	0.29	0.07	0.10	0.25	-0.01	0.17	-0.06
22	1	-0.10	-0.11	-0.34	0.08	0.09	0.30	-0.23	-0.13	0.12

23	1	-0.09	-0.09	-0.28	0.07	0.06	0.23	0.10	-0.06	-0.02
24	1	-0.05	-0.06	-0.21	0.09	0.11	0.37	-0.30	0.01	0.02
25	1	0.00	0.00	0.01	0.04	0.03	0.08	0.27	0.10	-0.15
26	1	0.06	0.08	0.23	0.10	0.12	0.38	-0.06	-0.01	-0.05
27	1	-0.05	-0.02	-0.07	0.01	0.00	0.01	-0.15	0.09	-0.02
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			28				29			30
			A				A			A
Frequencies	--	779.7313			814.7595			832.5866		
Red. masses	--	5.4731			1.3181			4.9888		
Frc consts	--	1.9605			0.5155			2.0375		
IR Inten	--	10.0953			12.5048			0.7338		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.12	0.27	-0.04	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.17	-0.04
2	6	0.20	-0.18	-0.02	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.03	-0.01
3	6	0.18	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	-0.03	0.03	0.10	-0.03
4	6	0.03	0.00	-0.01	0.02	0.02	0.07	0.10	-0.04	-0.04
5	6	-0.03	0.03	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.09	0.03
6	6	-0.08	0.05	0.01	0.00	0.01	0.02	-0.02	-0.02	0.02
7	6	-0.01	0.05	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00
8	6	-0.05	-0.04	0.03	-0.01	-0.02	-0.06	0.16	-0.05	-0.01
9	6	-0.09	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	0.08	0.04	-0.03
10	6	0.05	-0.08	0.01	-0.01	-0.01	-0.04	-0.01	0.25	-0.08
11	6	0.06	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.09	-0.14	0.07
12	6	-0.20	-0.04	0.07	-0.01	-0.02	-0.04	-0.13	-0.21	0.11
13	6	-0.02	-0.10	0.03	0.01	0.00	0.01	0.05	-0.08	0.00
14	6	0.11	-0.07	-0.01	0.02	0.02	0.05	0.05	0.11	-0.05
15	6	0.16	-0.08	-0.02	0.01	0.02	0.06	-0.19	0.06	0.03
16	6	-0.11	0.19	-0.03	0.01	0.01	0.06	-0.01	-0.12	0.04
17	8	-0.08	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
18	1	-0.17	0.26	-0.03	0.08	0.07	0.23	0.24	0.22	-0.17
19	1	0.35	-0.16	-0.17	0.00	0.00	0.01	-0.08	0.01	0.01
20	1	-0.11	0.07	-0.01	-0.04	-0.01	-0.03	-0.11	-0.01	-0.06
21	1	0.12	-0.06	-0.01	0.06	0.08	0.22	0.15	0.29	-0.15
22	1	0.07	0.00	0.01	0.08	0.08	0.24	0.12	-0.33	0.11
23	1	-0.10	-0.14	0.07	0.06	0.05	0.20	-0.01	-0.35	0.08
24	1	0.04	0.01	0.00	-0.11	-0.13	-0.42	0.13	0.06	0.01
25	1	0.11	-0.31	0.08	-0.15	-0.16	-0.51	-0.18	0.07	0.08
26	1	-0.27	0.16	0.03	-0.12	-0.14	-0.43	0.09	-0.09	0.04
27	1	0.06	-0.17	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			31				32			33
			A				A			A
Frequencies	--	855.0854			866.5079			888.1816		
Red. masses	--	1.7500			1.5446			1.8656		
Frc consts	--	0.7539			0.6833			0.8671		
IR Inten	--	52.7462			23.2418			38.1060		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.02	0.03	0.02	0.02	0.08	0.01	0.01	0.04
2	6	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.05	-0.02	0.01	-0.05
3	6	-0.01	-0.02	-0.08	-0.02	-0.02	-0.08	0.01	0.00	0.02
4	6	0.05	0.03	0.12	0.01	0.03	0.08	0.00	-0.02	-0.07
5	6	0.00	-0.04	-0.09	-0.02	0.00	-0.03	0.05	0.02	0.08
6	6	-0.03	-0.05	-0.03	0.02	0.03	0.04	-0.05	-0.06	-0.07
7	6	0.01	0.02	0.02	0.01	0.00	0.02	0.02	0.02	0.05
8	6	-0.02	-0.03	-0.10	-0.02	-0.02	-0.07	0.04	0.03	0.09
9	6	0.00	0.02	0.02	0.02	0.02	0.07	-0.02	-0.01	-0.07
10	6	0.00	0.02	0.03	-0.01	-0.02	-0.04	-0.01	0.00	-0.01
11	6	0.00	0.01	0.09	0.01	0.00	-0.03	-0.03	-0.02	-0.04
12	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.02	0.05	0.02	0.02	0.06
13	6	0.01	0.02	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.03	-0.10
14	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.04
15	6	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	0.01

16	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.03	0.05
17	8	-0.02	0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	-0.01
18	1	0.01	0.02	0.02	-0.13	-0.12	-0.42	-0.13	-0.12	-0.42
19	1	0.10	0.07	0.20	0.15	0.09	0.47	0.09	0.07	0.18
20	1	0.40	0.25	0.60	-0.18	-0.13	-0.28	0.30	0.22	0.49
21	1	-0.08	-0.10	-0.34	0.03	0.04	0.13	0.09	0.11	0.27
22	1	-0.11	-0.13	-0.33	0.10	0.10	0.28	-0.02	0.04	0.08
23	1	-0.02	-0.05	-0.10	-0.12	-0.12	-0.42	-0.05	-0.06	-0.18
24	1	-0.05	-0.03	-0.09	0.05	0.04	0.13	-0.03	0.00	0.01
25	1	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.02	0.08	-0.06	-0.08	-0.29
26	1	0.00	0.01	0.02	-0.02	-0.03	-0.10	-0.07	-0.06	-0.22
27	1	0.01	0.01	0.03	-0.04	-0.01	-0.05	0.00	0.01	0.02
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			34			35			36	
			A			A			A	
Frequencies	--		909.3918			943.4674			971.5551	
Red. masses	--		1.6421			1.6772			4.0365	
Frc consts	--		0.8001			0.8796			2.2449	
IR Inten	--		90.1032			86.3806			31.7707	

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.01	0.06	0.02	0.03	-0.02
2	6	0.02	0.03	0.05	0.05	0.03	0.15	-0.12	-0.24	0.08
3	6	0.00	-0.01	-0.02	-0.04	-0.03	-0.11	-0.06	0.01	0.02
4	6	0.02	0.00	0.01	0.00	0.01	0.03	0.04	0.01	-0.01
5	6	0.04	0.02	0.06	-0.01	-0.01	-0.02	-0.04	0.05	0.00
6	6	-0.04	-0.05	-0.05	0.01	0.02	0.01	-0.03	0.32	-0.11
7	6	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	-0.06	-0.09	-0.01	0.06
8	6	-0.01	-0.01	-0.06	0.00	0.01	0.01	0.04	0.01	-0.02
9	6	0.03	0.04	0.10	-0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.02	-0.01
10	6	-0.03	-0.02	-0.07	0.01	0.00	0.01	0.05	-0.05	0.00
11	6	-0.03	-0.03	-0.07	0.01	0.00	0.02	-0.02	-0.08	0.03
12	6	-0.01	-0.01	-0.02	0.02	0.02	0.06	0.05	-0.01	-0.01
13	6	0.02	0.02	0.08	-0.01	-0.01	-0.04	0.01	-0.01	0.00
14	6	-0.03	-0.03	-0.05	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	0.02
15	6	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.00
16	6	-0.01	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.04	0.00	0.02	-0.01
17	8	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.14	-0.07	-0.04
18	1	0.06	0.05	0.20	-0.06	-0.07	-0.24	0.11	0.06	-0.04
19	1	-0.08	-0.04	-0.29	-0.24	-0.16	-0.72	-0.31	-0.28	0.18
20	1	0.19	0.15	0.33	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.62	0.15
21	1	0.10	0.13	0.35	-0.01	-0.02	-0.05	0.20	-0.03	-0.04
22	1	0.11	0.19	0.50	-0.03	-0.05	-0.12	0.02	-0.11	0.05
23	1	0.00	0.00	-0.01	-0.12	-0.11	-0.39	0.11	-0.07	0.01
24	1	0.03	0.06	0.21	0.04	0.03	0.10	-0.03	-0.04	0.01
25	1	0.10	0.12	0.32	-0.04	-0.04	-0.14	-0.01	0.05	0.00
26	1	0.00	0.02	0.04	-0.03	-0.06	-0.16	0.01	0.03	0.00
27	1	0.03	0.00	0.04	0.03	0.00	0.02	-0.04	0.15	-0.01
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			37			38			39	
			A			A			A	
Frequencies	--		982.4483			997.0096			1009.3078	
Red. masses	--		1.4288			4.6623			6.1620	
Frc consts	--		0.8126			2.7305			3.6984	
IR Inten	--		1.9197			10.4549			16.0128	

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.00	0.04	-0.01	-0.14	0.03	-0.01	0.04	-0.01
2	6	0.01	0.01	0.02	0.09	-0.04	-0.03	-0.13	0.20	0.01
3	6	-0.01	0.00	-0.02	0.04	0.07	-0.03	-0.05	-0.04	0.01
4	6	0.01	0.01	0.00	0.11	0.20	-0.08	0.27	-0.15	-0.03
5	6	0.01	0.01	0.01	0.03	0.07	-0.05	0.01	0.00	-0.03
6	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.17	-0.04	0.09	-0.14	-0.05	0.10
7	6	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.03	-0.01	-0.04	0.00	-0.01
8	6	0.01	0.01	-0.01	0.10	0.20	-0.09	0.26	-0.15	-0.03

9	6	0.01	0.02	0.04	0.00	0.08	-0.04	-0.01	-0.03	0.00
10	6	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.15	0.06	0.00	0.03	0.02
11	6	-0.01	-0.02	-0.03	-0.07	-0.11	0.07	0.00	0.02	-0.01
12	6	0.00	0.00	0.01	-0.09	-0.13	0.06	0.04	0.06	-0.02
13	6	-0.01	-0.01	-0.05	0.03	0.09	-0.02	-0.01	-0.02	0.01
14	6	0.02	0.03	0.12	-0.15	-0.07	0.04	-0.16	-0.17	0.09
15	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.01	0.04	-0.01	0.00
16	6	-0.03	-0.04	-0.11	0.07	-0.04	0.02	-0.10	0.29	-0.06
17	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.08	-0.04	-0.02
18	1	-0.06	-0.07	-0.24	0.21	-0.10	0.01	-0.05	0.05	0.03
19	1	-0.02	-0.02	-0.11	0.17	-0.02	-0.01	-0.23	0.19	-0.01
20	1	0.00	0.01	0.03	-0.31	-0.10	-0.08	-0.36	-0.15	-0.17
21	1	-0.01	-0.03	-0.08	0.20	-0.15	-0.09	-0.05	-0.02	-0.14
22	1	0.04	0.08	0.22	-0.27	0.04	0.01	0.06	0.00	0.02
23	1	-0.01	0.00	0.01	-0.25	0.03	0.08	0.10	-0.03	-0.09
24	1	-0.18	-0.19	-0.60	-0.09	-0.06	0.17	-0.20	-0.13	0.13
25	1	0.00	0.01	-0.04	0.10	0.35	-0.16	-0.01	-0.12	0.00
26	1	0.16	0.18	0.58	-0.01	-0.10	-0.09	-0.13	0.29	-0.09
27	1	0.01	-0.01	0.00	0.13	-0.16	-0.01	-0.06	0.11	-0.01
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

40

41

42

Frequencies	--	1033.0607		1044.5098		1054.3430
Red. masses	--	1.3721		1.4127		1.4428
Frc consts	--	0.8628		0.9081		0.9450
IR Inten	--	0.0366		1.1365		1.1386

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.01	0.04	-0.03	-0.02	-0.08	-0.02	-0.02	-0.06
2	6	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
3	6	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01
4	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.01	0.02	0.01	0.01	0.03	-0.01	-0.01	-0.02
10	6	-0.03	-0.03	-0.10	-0.02	-0.03	-0.07	0.01	0.01	0.04
11	6	0.02	0.03	0.08	0.01	0.02	0.05	-0.01	-0.01	-0.02
12	6	-0.01	-0.01	-0.04	0.03	0.03	0.09	0.02	0.02	0.08
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.03
14	6	0.01	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.08
15	6	-0.02	-0.02	-0.07	0.01	0.01	0.04	-0.03	-0.03	-0.10
16	6	0.00	0.01	0.02	-0.02	-0.02	-0.06	0.02	0.02	0.07
17	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.07	-0.07	-0.24	0.13	0.12	0.44	0.09	0.08	0.30
19	1	-0.02	0.00	-0.04	0.01	0.01	0.06	0.01	0.01	0.04
20	1	-0.03	-0.02	-0.03	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.01
21	1	0.14	0.18	0.53	0.11	0.13	0.39	-0.05	-0.07	-0.19
22	1	-0.12	-0.17	-0.45	-0.08	-0.10	-0.28	0.03	0.05	0.12
23	1	0.06	0.07	0.23	-0.14	-0.15	-0.51	-0.11	-0.11	-0.39
24	1	-0.07	-0.08	-0.23	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.12	-0.38
25	1	0.10	0.12	0.38	-0.07	-0.07	-0.24	0.14	0.16	0.52
26	1	-0.04	-0.03	-0.13	0.07	0.09	0.28	-0.09	-0.11	-0.33
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

43

44

45

Frequencies	--	1108.2729		1143.9008		1159.8630
Red. masses	--	2.0632		1.4968		2.3108
Frc consts	--	1.4931		1.1539		1.8316
IR Inten	--	31.4121		361.2056		58.4385

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.05	0.02	-0.02	-0.08	0.03

2	6	-0.02	0.04	0.00	-0.03	-0.06	0.02	0.04	0.01	-0.02
3	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.04	-0.01	0.02	0.05	-0.02
4	6	0.06	-0.02	-0.01	0.03	0.05	-0.02	0.02	0.15	-0.05
5	6	0.03	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.03	0.09	-0.04
6	6	-0.04	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.01
7	6	-0.04	0.01	0.01	0.08	0.01	-0.02	-0.06	0.00	0.01
8	6	0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.06	0.01	-0.05	-0.11	0.05
9	6	-0.05	0.03	0.01	0.00	-0.04	0.01	0.00	-0.05	0.02
10	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.04	-0.01	0.03	0.07	-0.03
11	6	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.05	-0.10	0.05
12	6	0.01	0.01	-0.01	0.02	0.03	-0.02	0.02	0.09	-0.03
13	6	-0.06	0.01	0.02	-0.02	-0.01	0.01	-0.02	-0.08	0.03
14	6	0.00	0.16	-0.05	0.00	0.02	0.00	0.03	0.01	-0.01
15	6	0.13	-0.05	-0.02	0.02	-0.01	0.00	-0.03	-0.02	0.01
16	6	-0.06	-0.13	0.06	-0.03	0.01	0.01	0.01	0.02	-0.01
17	8	0.03	-0.03	0.00	-0.05	0.08	-0.01	0.03	-0.05	0.00
18	1	0.00	-0.01	0.00	-0.10	-0.07	0.05	-0.26	-0.14	0.12
19	1	0.01	0.05	-0.02	-0.40	-0.14	0.16	0.24	0.06	-0.08
20	1	-0.08	0.00	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.07	-0.12	0.01
21	1	0.11	0.01	-0.03	0.01	0.05	-0.02	0.40	0.15	-0.16
22	1	-0.02	0.03	-0.01	0.11	-0.14	0.01	0.03	-0.20	0.05
23	1	0.09	-0.07	0.00	-0.04	0.10	-0.02	-0.13	0.25	-0.04
24	1	-0.35	0.54	-0.07	-0.09	0.12	-0.01	-0.05	0.10	-0.02
25	1	0.15	-0.07	-0.01	0.00	-0.11	0.03	-0.11	-0.33	0.13
26	1	-0.53	-0.24	0.22	-0.06	0.00	0.02	0.25	0.08	-0.09
27	1	-0.10	0.12	0.00	0.57	-0.57	-0.03	-0.26	0.26	0.01
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

46

47

48

		A	A	A
Frequencies	--	1177.4949	1207.2581	1213.1884
Red. masses	--	1.6032	1.3512	1.3101
Frc consts	--	1.3096	1.1603	1.1361
IR Inten	--	15.2378	50.8106	5.1959

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.07	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.05	0.00	-0.02
2	6	0.04	0.00	-0.01	-0.01	-0.03	0.01	-0.01	-0.01	0.00
3	6	0.05	0.08	-0.04	-0.04	0.01	0.01	-0.03	0.00	0.01
4	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.01	-0.02	-0.06	0.02
5	6	-0.02	-0.05	0.02	-0.03	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00
6	6	0.03	0.03	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.05	-0.07	0.00	-0.09	0.07	0.02	-0.03	0.01	0.01
8	6	0.01	-0.02	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	-0.05	0.02	-0.01	-0.03	0.01	0.03	0.01	-0.01
10	6	-0.02	0.03	-0.01	-0.04	0.02	0.00	0.03	-0.03	0.00
11	6	0.04	0.02	-0.02	0.04	-0.03	0.00	-0.03	0.02	0.00
12	6	-0.06	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.01
13	6	0.00	0.05	-0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.05	-0.01
14	6	-0.03	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.04	-0.01
15	6	0.03	-0.02	0.00	0.02	0.02	-0.01	-0.01	-0.06	0.02
16	6	-0.02	0.03	0.00	-0.03	0.00	0.01	0.03	0.03	-0.02
17	8	-0.04	-0.01	0.03	0.05	-0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.01
18	1	0.32	-0.02	-0.08	0.24	0.05	-0.08	0.50	0.09	-0.17
19	1	-0.19	-0.05	0.06	0.34	0.04	-0.11	0.09	0.01	-0.02
20	1	-0.18	0.32	0.03	0.32	-0.34	0.00	0.15	-0.17	-0.02
21	1	-0.29	-0.02	0.08	-0.34	-0.04	0.11	0.18	0.00	-0.05
22	1	0.24	-0.18	0.00	0.41	-0.40	0.03	-0.22	0.20	-0.01
23	1	-0.39	0.33	0.01	-0.09	0.09	0.00	-0.21	0.16	0.01
24	1	-0.08	0.05	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.13	0.15	-0.01
25	1	0.02	-0.09	0.02	0.06	0.14	-0.06	-0.12	-0.49	0.19
26	1	-0.06	0.02	0.01	-0.11	-0.02	0.04	0.18	0.06	-0.07
27	1	-0.34	0.28	0.02	0.17	-0.11	-0.02	0.18	-0.15	-0.01
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

49

50

51

		A			A			A		
Frequencies		--	1226.7003		1242.0583		1279.1716			
Red. masses		--	1.5642		1.5398		1.6549			
Frc consts		--	1.3868		1.3995		1.5954			
IR Inten		--	11.6671		30.2126		0.4903			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.02	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.04	0.01
2	6	0.00	0.04	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.03	0.01
3	6	0.08	0.02	-0.03	-0.06	0.01	0.02	-0.03	0.03	0.00
4	6	-0.02	-0.06	0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.04	-0.01
5	6	-0.10	0.10	0.01	0.08	-0.06	-0.01	0.07	-0.01	-0.02
6	6	0.03	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.01
7	6	0.01	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01
8	6	0.00	-0.07	0.02	-0.03	-0.07	0.03	-0.03	-0.07	0.03
9	6	0.03	0.02	-0.02	-0.10	-0.02	0.03	0.14	-0.01	-0.04
10	6	0.04	-0.04	0.00	0.00	0.05	-0.02	0.01	0.02	-0.01
11	6	-0.04	-0.01	0.01	0.01	0.03	-0.01	-0.02	-0.03	0.02
12	6	-0.03	0.00	0.01	0.01	0.04	-0.01	0.00	0.02	0.00
13	6	0.00	0.02	0.00	0.06	-0.06	0.00	-0.10	0.05	0.01
14	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.03	0.03	-0.02
15	6	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.00
16	6	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.04	-0.01
17	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00
18	1	0.05	-0.02	-0.01	0.29	0.08	-0.11	0.17	-0.01	-0.05
19	1	-0.33	-0.02	0.11	0.24	0.02	-0.07	0.23	0.02	-0.08
20	1	0.37	-0.33	-0.01	-0.22	0.18	0.00	-0.21	0.18	0.01
21	1	0.34	0.02	-0.09	0.31	0.12	-0.13	-0.26	-0.05	0.08
22	1	-0.09	0.02	0.02	-0.16	0.21	-0.03	-0.19	0.13	0.00
23	1	-0.19	0.16	0.01	-0.26	0.33	-0.02	0.10	-0.10	0.00
24	1	0.21	-0.21	0.01	0.06	-0.08	0.01	0.40	-0.35	-0.01
25	1	0.08	0.33	-0.12	0.13	0.49	-0.19	-0.04	-0.11	0.05
26	1	-0.37	-0.07	0.12	-0.03	-0.03	0.02	-0.54	-0.06	0.17
27	1	-0.06	0.05	0.00	0.13	-0.11	0.00	0.04	-0.04	0.00
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		A			A			A		
Frequencies		--	1287.7494		1314.2781		1372.3674			
Red. masses		--	2.1623		2.3611		3.2983			
Frc consts		--	2.1126		2.4029		3.6600			
IR Inten		--	96.8877		41.8839		7.0924			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.04	0.01	0.02	0.00	-0.01	0.02	0.05	-0.02
2	6	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.07	-0.02
3	6	0.05	0.00	-0.02	0.13	0.02	-0.05	-0.05	-0.16	0.05
4	6	0.07	-0.03	-0.01	0.03	-0.05	0.01	0.06	-0.06	0.00
5	6	0.04	-0.02	-0.01	0.13	-0.10	-0.01	0.11	0.18	-0.09
6	6	-0.03	0.01	0.01	-0.07	0.01	0.03	-0.09	0.03	0.02
7	6	-0.04	0.03	0.00	-0.14	0.12	0.02	0.09	-0.10	-0.01
8	6	-0.07	0.01	0.02	-0.09	0.03	0.02	-0.10	0.02	0.02
9	6	-0.14	-0.06	0.06	0.01	0.05	-0.02	-0.02	0.15	-0.04
10	6	-0.01	0.04	-0.01	-0.01	0.02	0.00	-0.04	-0.05	0.03
11	6	0.02	0.02	-0.01	0.03	-0.01	0.00	0.00	-0.06	0.02
12	6	-0.03	-0.03	0.02	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.07	-0.02
13	6	-0.12	0.16	-0.02	0.00	-0.05	0.01	-0.06	-0.11	0.05
14	6	0.02	0.03	-0.02	0.03	0.00	-0.01	0.05	0.02	-0.02
15	6	0.08	-0.03	-0.01	-0.03	0.01	0.01	-0.03	0.00	0.01
16	6	0.01	-0.02	0.00	0.03	-0.01	0.00	0.06	-0.04	0.00
17	8	0.02	-0.01	-0.01	0.07	-0.04	-0.02	-0.04	0.02	0.01
18	1	0.16	-0.02	-0.04	-0.26	-0.07	0.10	0.42	0.14	-0.16
19	1	-0.16	-0.02	0.06	-0.48	-0.08	0.18	-0.23	0.03	0.08
20	1	0.01	-0.06	-0.01	0.05	-0.19	-0.01	-0.11	0.04	0.01
21	1	0.29	0.12	-0.12	-0.44	-0.07	0.14	-0.25	-0.10	0.10
22	1	0.16	-0.10	0.00	-0.18	0.21	-0.02	0.34	-0.41	0.04

23	1	0.24	-0.33	0.03	-0.31	0.30	0.00	-0.09	0.15	-0.02
24	1	0.44	-0.39	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.20	-0.12	-0.02
25	1	0.09	-0.04	-0.01	-0.03	0.01	0.01	-0.03	0.00	0.01
26	1	0.38	0.04	-0.12	0.04	-0.01	-0.01	0.19	-0.02	-0.05
27	1	0.02	0.00	0.00	0.06	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.01
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
		55			56			57		
		A			A			A		
Frequencies	--	1399.2553			1415.5192			1446.5075		
Red. masses	--	4.6835			2.5357			3.6319		
Frc consts	--	5.4027			2.9935			4.4774		
IR Inten	--	19.9442			11.3267			62.4732		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	-0.03	0.02	-0.05	-0.03	0.02	0.02	0.02	-0.01
2	6	0.18	0.00	-0.06	0.12	-0.03	-0.03	0.04	-0.05	0.00
3	6	-0.13	0.17	0.00	-0.08	0.00	0.03	0.00	-0.16	0.04
4	6	-0.08	-0.10	0.05	-0.08	0.00	0.02	-0.14	0.15	0.00
5	6	0.15	-0.01	-0.03	0.07	-0.01	-0.01	0.01	0.02	-0.02
6	6	-0.14	0.16	0.00	-0.09	0.05	0.01	0.06	-0.13	0.01
7	6	0.01	-0.13	0.02	0.05	0.05	-0.04	-0.01	0.23	-0.05
8	6	0.01	-0.12	0.03	0.06	0.05	-0.03	0.09	-0.12	0.01
9	6	-0.09	0.06	0.01	0.06	-0.10	0.01	-0.05	0.05	0.00
10	6	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.06	-0.02	-0.09	0.00	0.02
11	6	0.02	-0.02	0.00	0.05	-0.06	0.01	0.05	-0.02	-0.01
12	6	0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.08	-0.02	-0.05	0.04	0.00
13	6	0.17	0.07	-0.07	-0.06	-0.02	0.02	0.11	0.00	-0.03
14	6	-0.13	0.10	0.00	0.08	-0.09	0.01	-0.10	0.07	0.01
15	6	-0.03	-0.13	0.05	0.03	0.07	-0.03	-0.02	-0.06	0.03
16	6	0.13	0.06	-0.05	-0.13	-0.01	0.04	0.10	0.03	-0.04
17	8	-0.03	0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.02	0.02	-0.04	0.01
18	1	-0.28	-0.08	0.11	0.41	0.07	-0.14	0.25	0.07	-0.09
19	1	-0.01	-0.04	0.05	-0.34	-0.14	0.15	-0.57	-0.19	0.22
20	1	0.34	-0.37	-0.02	0.22	-0.29	0.00	-0.20	0.13	0.02
21	1	-0.20	-0.01	0.06	-0.05	0.06	-0.01	0.14	0.05	-0.06
22	1	0.03	-0.02	-0.01	-0.24	0.23	-0.02	0.08	-0.04	-0.01
23	1	0.30	-0.33	0.01	0.24	-0.17	-0.02	0.16	-0.18	0.01
24	1	0.03	-0.06	0.01	-0.17	0.18	0.00	0.05	-0.09	0.01
25	1	0.01	0.03	-0.01	0.04	0.13	-0.05	-0.03	-0.09	0.03
26	1	-0.22	-0.01	0.07	0.16	0.05	-0.06	-0.20	-0.03	0.07
27	1	0.02	-0.04	0.03	-0.19	0.15	0.01	-0.17	0.17	0.00
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
		58			59			60		
		A			A			A		
Frequencies	--	1449.3518			1464.3286			1481.0562		
Red. masses	--	4.0584			1.9360			2.6822		
Frc consts	--	5.0229			2.4459			3.4664		
IR Inten	--	91.8480			6.4891			16.2252		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.15	0.00	0.05	0.02	0.05	-0.02	0.09	0.01	-0.03
2	6	0.00	-0.02	0.00	0.05	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00
3	6	-0.04	-0.04	0.02	-0.06	-0.03	0.02	-0.06	-0.06	0.03
4	6	0.24	0.07	-0.08	-0.01	-0.01	0.01	0.04	0.12	-0.05
5	6	-0.09	-0.11	0.06	0.07	-0.05	0.00	-0.10	-0.11	0.07
6	6	-0.01	0.00	0.01	-0.04	0.03	0.01	-0.03	0.07	-0.01
7	6	0.09	0.07	-0.06	0.01	0.00	-0.01	0.07	-0.04	-0.02
8	6	-0.22	0.03	0.05	-0.01	0.11	-0.03	0.12	0.00	-0.03
9	6	-0.02	-0.05	0.02	0.01	-0.11	0.03	-0.11	0.05	0.02
10	6	0.16	-0.01	-0.04	-0.05	-0.01	0.02	0.05	0.02	-0.02
11	6	-0.13	0.07	0.01	-0.04	0.08	-0.02	0.05	-0.02	-0.01
12	6	0.07	0.02	-0.03	0.03	-0.05	0.00	-0.02	0.04	0.00
13	6	0.10	-0.01	-0.03	0.00	-0.04	0.01	-0.07	-0.12	0.05
14	6	0.00	0.01	0.00	-0.04	-0.02	0.02	-0.07	0.10	-0.01
15	6	-0.06	-0.04	0.03	0.02	0.13	-0.04	0.05	-0.01	-0.01

16	6	0.09	0.04	-0.04	0.05	-0.01	-0.01	0.01	-0.03	0.01
17	8	-0.02	-0.02	0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01
18	1	0.45	0.14	-0.17	-0.16	0.02	0.04	-0.13	-0.03	0.05
19	1	-0.15	-0.06	0.06	-0.11	-0.04	0.05	0.05	0.01	-0.02
20	1	0.21	-0.26	-0.01	0.06	-0.09	0.00	0.31	-0.27	-0.01
21	1	-0.18	-0.09	0.09	0.39	0.08	-0.14	-0.29	-0.04	0.10
22	1	-0.03	-0.03	0.03	0.24	-0.19	0.00	-0.27	0.30	-0.03
23	1	0.21	-0.11	-0.03	-0.18	0.19	0.00	-0.14	0.15	-0.01
24	1	-0.13	0.14	-0.01	0.12	-0.20	0.03	0.39	-0.38	0.01
25	1	-0.04	0.09	-0.02	-0.13	-0.44	0.17	0.03	-0.15	0.04
26	1	-0.30	-0.04	0.10	-0.43	-0.13	0.16	0.14	-0.01	-0.03
27	1	-0.20	0.16	0.01	-0.04	0.03	0.01	-0.07	0.04	0.00
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			61			62			63	
			A			A			A	
Frequencies	--	1495.1559			1515.9209			1531.8880		
Red. masses	--	6.4424			4.1441			3.1000		
Frc consts	--	8.4853			5.6109			4.2861		
IR Inten	--	23.6489			32.9998			5.8362		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.20	-0.09	0.08	0.07	-0.11	0.01	-0.10	-0.06	0.05
2	6	0.05	-0.13	0.02	0.06	0.05	-0.03	-0.05	0.07	0.00
3	6	-0.08	0.31	-0.05	0.04	0.04	-0.03	0.16	-0.01	-0.05
4	6	0.11	-0.17	0.01	0.00	0.05	-0.01	-0.02	0.01	0.00
5	6	-0.09	-0.04	0.03	0.02	-0.17	0.05	-0.04	0.02	0.00
6	6	0.06	-0.09	0.01	0.01	0.04	-0.02	0.01	0.04	-0.02
7	6	0.03	0.17	-0.06	-0.12	-0.07	0.07	-0.07	-0.11	0.05
8	6	0.07	-0.07	0.01	0.08	0.06	-0.04	-0.01	-0.01	0.01
9	6	-0.03	0.27	-0.08	0.04	0.03	-0.02	-0.10	0.01	0.03
10	6	-0.15	-0.10	0.08	-0.02	-0.09	0.04	-0.02	0.05	-0.01
11	6	0.07	0.07	-0.04	-0.11	0.17	-0.03	0.10	-0.08	0.00
12	6	0.14	0.05	-0.06	-0.17	0.20	-0.01	-0.06	0.10	-0.01
13	6	-0.09	-0.11	0.06	-0.07	-0.16	0.07	0.11	-0.05	-0.02
14	6	0.00	0.00	0.00	0.08	0.01	-0.02	-0.04	-0.08	0.03
15	6	0.02	0.10	-0.04	-0.07	-0.08	0.05	0.01	0.18	-0.06
16	6	0.03	-0.10	0.02	0.04	0.05	-0.03	0.09	-0.06	-0.01
17	8	0.00	-0.03	0.01	0.02	0.01	-0.02	0.01	0.02	-0.01
18	1	0.20	0.00	-0.07	0.19	-0.10	-0.02	0.38	0.03	-0.12
19	1	0.12	-0.14	-0.01	-0.09	0.03	0.04	0.08	0.12	-0.05
20	1	-0.04	-0.01	0.00	0.03	0.04	0.01	0.00	0.08	0.00
21	1	0.20	-0.03	-0.04	0.30	-0.04	-0.07	-0.10	0.04	0.01
22	1	0.18	-0.03	-0.04	0.35	-0.27	0.01	-0.18	0.21	-0.03
23	1	0.08	0.14	-0.06	0.31	-0.32	0.00	0.29	-0.26	-0.01
24	1	0.18	-0.19	0.01	0.00	0.10	-0.03	-0.09	-0.05	0.04
25	1	-0.09	-0.32	0.12	0.01	0.30	-0.10	-0.15	-0.43	0.18
26	1	0.22	-0.07	-0.04	-0.09	0.03	0.02	-0.24	-0.15	0.11
27	1	-0.19	0.17	0.01	0.17	-0.13	0.00	0.15	-0.13	-0.01
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			64			65			66	
			A			A			A	
Frequencies	--	1574.2807			1620.3621			1634.9348		
Red. masses	--	4.3384			5.0707			6.1813		
Frc consts	--	6.3350			7.8440			9.7349		
IR Inten	--	180.1594			89.4480			40.7030		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.01	0.00	0.21	-0.02	-0.06	0.19	0.00	-0.06
2	6	0.19	0.02	-0.07	0.04	-0.05	0.00	0.01	-0.03	0.00
3	6	-0.10	0.07	0.01	-0.15	0.07	0.03	-0.09	-0.02	0.03
4	6	0.02	-0.11	0.03	0.12	-0.10	0.00	-0.01	0.06	-0.01
5	6	-0.06	0.14	-0.04	-0.10	0.09	0.00	0.07	-0.07	0.00
6	6	0.13	-0.13	-0.01	0.04	-0.06	0.00	-0.02	0.00	0.01
7	6	-0.17	0.02	0.07	0.03	0.07	-0.02	0.03	0.04	-0.02
8	6	0.01	0.10	-0.04	-0.01	0.05	-0.01	-0.02	-0.24	0.08



9	6	-0.06	-0.08	0.04	-0.17	-0.04	0.06	-0.05	0.19	-0.05
10	6	0.23	0.02	-0.07	-0.02	0.05	-0.01	0.19	-0.07	-0.03
11	6	-0.12	-0.03	0.04	0.11	-0.10	0.00	-0.20	0.13	0.01
12	6	-0.01	0.04	-0.01	-0.13	0.04	0.03	-0.15	0.03	0.03
13	6	0.05	-0.11	0.02	-0.12	0.05	0.02	0.07	0.14	-0.06
14	6	-0.09	0.08	0.00	0.18	-0.14	-0.01	0.04	-0.18	0.04
15	6	0.07	0.02	-0.03	-0.13	0.02	0.03	0.06	0.25	-0.09
16	6	-0.07	-0.03	0.03	0.24	0.04	-0.08	-0.09	-0.13	0.07
17	8	0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
18	1	-0.02	-0.01	0.01	-0.31	-0.14	0.13	-0.22	-0.10	0.10
19	1	-0.33	-0.08	0.14	0.00	-0.07	0.02	-0.01	-0.04	0.01
20	1	-0.31	0.36	0.02	-0.05	0.05	0.01	0.02	-0.06	0.00
21	1	-0.34	-0.10	0.13	-0.09	0.06	0.01	-0.21	-0.17	0.12
22	1	-0.10	-0.08	0.05	-0.18	0.19	-0.02	0.16	-0.25	0.05
23	1	0.06	-0.02	-0.01	-0.02	-0.10	0.04	0.05	-0.20	0.04
24	1	0.22	-0.26	0.02	-0.25	0.31	-0.02	-0.23	0.08	0.04
25	1	0.05	-0.11	0.02	-0.14	0.08	0.01	-0.08	-0.30	0.12
26	1	0.11	0.00	-0.03	-0.42	-0.10	0.15	0.22	-0.09	-0.03
27	1	0.14	-0.10	0.00	-0.05	0.04	0.00	-0.05	0.04	0.00
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

67

68

69

		A			A			A		
Frequencies	--	1647.1012			1665.7569			3143.9908		
Red. masses	--	6.4495			6.8228			1.0881		
Frc consts	--	10.3091			11.1541			6.3373		
IR Inten	--	340.0294			141.3915			5.9693		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	0.06	0.00	-0.21	0.04	0.05	0.00	0.00	0.00
2	6	0.29	0.13	-0.13	0.03	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.15	-0.11	0.08	0.09	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00
4	6	0.15	0.16	-0.08	-0.19	0.07	0.03	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.15	-0.09	0.07	0.07	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
6	6	0.06	0.02	-0.04	0.01	0.01	0.00	0.05	0.05	-0.05
7	6	-0.22	-0.15	0.13	-0.06	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.07	-0.12	0.05	0.26	-0.07	-0.05	0.00	0.00	0.00
9	6	0.08	0.09	-0.05	-0.23	0.05	0.05	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.16	-0.02	0.05	0.20	-0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00
11	6	0.13	-0.02	-0.03	-0.14	0.06	0.02	0.00	0.00	0.00
12	6	0.11	-0.11	0.00	0.23	-0.14	-0.03	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.05	0.13	-0.03	-0.25	0.09	0.04	0.00	0.00	0.00
14	6	0.06	-0.06	0.00	0.15	-0.09	-0.01	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.04	-0.01	-0.08	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.03	-0.02	0.01	0.17	0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00
17	8	0.03	0.02	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.04	0.08	-0.01	0.19	0.14	-0.10	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.44	0.00	0.16	-0.07	0.03	0.02	0.00	-0.01	0.00
20	1	0.00	0.17	0.04	-0.03	0.04	-0.01	-0.56	-0.53	0.63
21	1	0.17	0.06	-0.07	-0.27	-0.11	0.12	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.07	0.19	-0.05	0.06	-0.16	0.04	0.01	0.01	-0.01
23	1	-0.13	0.15	-0.01	-0.20	0.33	-0.04	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.09	0.10	0.00	-0.10	0.19	-0.03	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.01	0.00	0.00	-0.08	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	0.08	0.01	-0.03	-0.20	-0.07	0.08	0.00	0.00	0.00
27	1	0.24	-0.20	-0.01	0.05	-0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

70

71

72

		A			A			A		
Frequencies	--	3196.5833			3207.5925			3209.0797		
Red. masses	--	1.0885			1.0888			1.0890		
Frc consts	--	6.5533			6.6004			6.6074		
IR Inten	--	1.8046			0.1993			0.1127		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.04	-0.01	0.00	0.02	0.00

2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.01	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.05	-0.05	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.04	0.02	-0.02	-0.02	0.01
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.01	-0.03	-0.03	0.02
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.01
16	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.02	0.05	-0.01
17	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.49	0.10	0.06	-0.22	0.04
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.13	-0.45	0.12	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.04	-0.01
22	1	0.57	0.55	-0.35	-0.01	-0.01	0.01	0.03	0.03	-0.02
23	1	0.00	0.00	0.00	0.51	0.48	-0.29	0.20	0.19	-0.11
24	1	0.00	0.00	0.00	-0.20	-0.19	0.11	0.32	0.30	-0.18
25	1	0.01	0.00	0.00	0.17	-0.05	-0.03	-0.41	0.13	0.07
26	1	-0.01	0.03	-0.01	-0.05	0.18	-0.04	0.18	-0.61	0.15
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

73

74

75

		A			A			A		
Frequencies	--	3214.7399			3221.7814			3230.1396		
Red. masses	--	1.0929			1.0974			1.0981		
Frc consts	--	6.6547			6.7112			6.7507		
IR Inten	--	3.1468			9.0393			8.8470		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.07	0.01
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.07	0.02	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.03	0.02
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.04	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.02	-0.05	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
17	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.02	-0.09	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.21	0.77	-0.15
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.10	0.01
20	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.02	-0.06	0.02	-0.24	0.80	-0.21	0.00	-0.01	0.00
22	1	-0.04	-0.04	0.02	0.32	0.30	-0.19	0.00	0.00	0.00
23	1	0.05	0.05	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.38	0.36	-0.21
24	1	0.51	0.47	-0.28	0.03	0.03	-0.02	0.02	0.01	-0.01
25	1	-0.05	0.01	0.01	0.04	-0.01	-0.01	-0.04	0.01	0.01
26	1	-0.18	0.59	-0.14	-0.03	0.08	-0.02	-0.01	0.02	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

76

77

78



**Table S35.** Cartesian coordinates of optimized structure for (14-C<sub>4</sub>C<sub>5</sub>)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	0.408322	-1.216056	1.243837
2	6	0	-2.003788	-1.631704	0.749002
3	6	0	-0.881263	-0.784947	0.728209
4	6	0	-3.237157	-1.174070	0.247629
5	1	0	-1.949919	-2.639944	1.149302
6	6	0	1.511099	-0.324693	1.276560
7	1	0	0.459462	-2.151758	1.800827
8	6	0	1.395620	1.024896	0.779641
9	6	0	0.129487	1.447504	0.236659
10	6	0	2.477826	1.936094	0.837756
11	1	0	2.412890	-0.608974	1.818152
12	6	0	-3.363741	0.124832	-0.278186
13	6	0	-2.256688	1.004006	-0.297070
14	1	0	-4.322106	0.467010	-0.664915
15	8	0	-4.285115	-2.079526	0.305689
16	1	0	-5.139485	-1.723076	-0.014073
17	6	0	-0.991483	0.555657	0.211617
18	6	0	-2.364787	2.353680	-0.805623
19	6	0	-0.010952	2.787810	-0.255090
20	6	0	2.327264	3.244627	0.353578
21	1	0	3.427468	1.619276	1.262961
22	6	0	-1.288774	3.206969	-0.785687
23	6	0	1.099733	3.663196	-0.191832
24	1	0	3.160124	3.939199	0.403678
25	1	0	-1.385663	4.222068	-1.161788
26	1	0	0.994721	4.679783	-0.562748
27	1	0	-3.322370	2.686201	-1.197514
28	47	0	1.749819	-1.939583	-0.629476

**Table S36. Vibrational frequencies for (14-C<sub>4</sub>C<sub>5</sub>)**

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	35.5327			44.8309			73.8472		
Red. masses	--	11.0184			11.3420			6.5258		
Frc consts	--	0.0082			0.0134			0.0210		
IR Inten	--	0.1119			0.5287			0.2835		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.16	0.11	-0.01	-0.05	0.03	-0.14	0.02	-0.01	-0.07
2	6	0.18	0.00	-0.05	-0.05	0.05	-0.12	-0.02	0.03	0.04
3	6	0.14	0.06	-0.02	-0.05	0.05	-0.11	0.01	0.00	-0.05
4	6	0.17	-0.05	-0.07	-0.08	0.08	-0.03	-0.03	0.06	0.10
5	1	0.22	0.00	-0.06	-0.03	0.02	-0.18	-0.03	0.06	0.10
6	6	0.11	0.17	0.01	-0.04	0.03	-0.15	0.00	0.02	-0.02
7	1	0.19	0.14	0.03	-0.05	0.04	-0.13	0.02	-0.01	-0.08
8	6	0.06	0.16	0.02	-0.05	0.04	-0.12	-0.03	0.03	0.04
9	6	0.04	0.11	0.02	-0.07	0.07	-0.03	0.00	0.00	-0.04
10	6	0.02	0.21	0.04	-0.04	0.03	-0.15	-0.08	0.09	0.20
11	1	0.15	0.19	-0.03	-0.04	0.03	-0.14	-0.01	0.01	-0.01
12	6	0.11	-0.05	-0.05	-0.10	0.12	0.07	0.00	0.01	-0.02
13	6	0.06	0.00	-0.01	-0.10	0.12	0.08	0.02	-0.03	-0.12
14	1	0.10	-0.10	-0.07	-0.13	0.14	0.15	-0.01	0.01	-0.01
15	8	0.22	-0.12	-0.12	-0.07	0.07	-0.05	-0.08	0.13	0.29
16	1	0.21	-0.16	-0.13	-0.08	0.09	0.01	-0.09	0.14	0.32
17	6	0.08	0.06	-0.01	-0.08	0.08	-0.02	0.02	-0.02	-0.09
18	6	0.00	0.01	0.01	-0.14	0.15	0.19	0.04	-0.05	-0.19
19	6	-0.02	0.11	0.05	-0.10	0.11	0.06	-0.01	0.01	-0.02
20	6	-0.04	0.21	0.07	-0.06	0.05	-0.07	-0.10	0.11	0.26
21	1	0.03	0.24	0.03	-0.01	0.00	-0.22	-0.10	0.11	0.27
22	6	-0.04	0.06	0.05	-0.13	0.15	0.18	0.03	-0.03	-0.14
23	6	-0.06	0.16	0.08	-0.09	0.10	0.04	-0.06	0.06	0.13
24	1	-0.08	0.25	0.08	-0.05	0.04	-0.09	-0.15	0.15	0.39
25	1	-0.08	0.07	0.07	-0.15	0.18	0.26	0.03	-0.04	-0.18
26	1	-0.11	0.17	0.10	-0.11	0.12	0.11	-0.07	0.07	0.16
27	1	-0.01	-0.03	0.01	-0.16	0.18	0.27	0.06	-0.08	-0.26
28	47	-0.15	-0.14	0.00	0.16	-0.16	0.04	0.04	-0.05	-0.05
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	151.1423			162.3968			201.9894		
Red. masses	--	6.7946			4.8260			5.7042		
Frc consts	--	0.0915			0.0750			0.1371		
IR Inten	--	1.8770			5.1020			2.6143		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.03	0.05	-0.05	0.05	0.14	0.00	-0.01	-0.02
2	6	-0.03	0.03	0.06	-0.09	0.11	0.28	-0.02	0.03	0.08
3	6	-0.04	0.05	0.13	-0.07	0.08	0.22	-0.01	0.01	0.04
4	6	-0.02	0.03	0.04	-0.02	0.02	0.03	-0.02	0.03	0.09
5	1	-0.01	0.00	-0.02	-0.13	0.15	0.40	0.00	0.01	0.04
6	6	-0.05	0.06	0.14	0.02	-0.03	-0.07	0.06	-0.07	-0.18
7	1	0.02	-0.02	-0.04	-0.02	0.05	0.14	0.00	0.02	0.02
8	6	-0.07	0.08	0.21	0.01	-0.01	-0.05	0.06	-0.07	-0.20
9	6	-0.05	0.05	0.12	-0.02	0.03	0.06	0.05	-0.06	-0.17
10	6	-0.08	0.09	0.21	0.04	-0.04	-0.13	0.01	-0.02	-0.03
11	1	-0.04	0.04	0.11	0.06	-0.05	-0.15	0.06	-0.06	-0.18
12	6	-0.05	0.06	0.14	0.04	-0.05	-0.15	-0.07	0.09	0.25
13	6	-0.05	0.07	0.16	0.01	-0.02	-0.05	-0.03	0.04	0.12
14	1	-0.05	0.06	0.13	0.09	-0.12	-0.35	-0.09	0.12	0.35
15	8	0.03	-0.05	-0.17	0.00	-0.02	-0.09	0.06	-0.08	-0.19

16	1	0.03	-0.06	-0.18	0.05	-0.07	-0.27	0.05	-0.09	-0.18
17	6	-0.06	0.07	0.17	-0.03	0.04	0.10	0.01	-0.01	-0.03
18	6	-0.01	0.02	0.02	0.03	-0.04	-0.12	0.00	0.00	0.00
19	6	0.02	-0.02	-0.09	-0.04	0.04	0.10	0.05	-0.05	-0.14
20	6	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.07	0.06	0.21
21	1	-0.12	0.13	0.33	0.08	-0.08	-0.26	0.00	-0.01	-0.01
22	6	0.04	-0.05	-0.17	-0.01	0.01	0.02	0.05	-0.06	-0.17
23	6	0.06	-0.06	-0.22	-0.05	0.05	0.13	-0.03	0.03	0.09
24	1	0.01	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.02	-0.14	0.13	0.44
25	1	0.09	-0.10	-0.34	-0.02	0.01	0.03	0.08	-0.09	-0.25
26	1	0.12	-0.13	-0.43	-0.07	0.08	0.20	-0.07	0.07	0.22
27	1	-0.01	0.01	-0.01	0.06	-0.08	-0.24	0.00	0.01	0.03
28	47	0.04	-0.05	-0.08	0.03	-0.02	-0.04	-0.01	0.02	0.03

		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies	--	243.3978			264.0631			310.3977		
Red. masses	--	3.7368			5.5133			4.2843		
Frc consts	--	0.1304			0.2265			0.2432		
IR Inten	--	3.0003			5.7307			2.3939		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.02	-0.06	0.10	-0.04	0.05	-0.07	0.09	0.26
2	6	0.04	-0.07	-0.17	-0.03	-0.09	0.01	0.02	-0.02	-0.07
3	6	0.00	-0.01	-0.02	0.04	-0.12	0.05	0.01	0.00	-0.02
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00
5	1	0.09	-0.13	-0.34	-0.08	-0.10	-0.01	0.01	-0.02	-0.06
6	6	0.01	0.00	-0.02	0.09	0.02	0.02	-0.09	0.09	0.29
7	1	0.03	-0.05	-0.10	0.18	-0.01	0.08	-0.15	0.16	0.39
8	6	-0.01	0.02	0.04	0.08	0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.01
9	6	-0.05	0.06	0.17	0.05	-0.06	0.02	0.03	-0.04	-0.12
10	6	0.05	-0.04	-0.14	0.02	0.12	-0.04	0.03	-0.04	-0.11
11	1	0.03	-0.03	-0.06	0.09	0.03	0.02	-0.16	0.18	0.45
12	6	-0.03	0.04	0.11	0.09	0.01	0.03	-0.04	0.05	0.12
13	6	-0.02	0.02	0.07	0.10	-0.07	0.06	0.01	-0.01	-0.04
14	1	-0.04	0.05	0.14	0.11	0.08	0.03	-0.08	0.11	0.29
15	8	-0.01	0.01	0.01	-0.23	0.27	-0.16	0.01	-0.01	-0.01
16	1	-0.04	0.05	0.14	-0.10	0.55	-0.21	-0.01	-0.01	0.05
17	6	-0.04	0.05	0.14	0.08	-0.11	0.05	0.03	-0.04	-0.13
18	6	0.05	-0.07	-0.18	0.01	-0.10	0.06	0.01	0.00	-0.02
19	6	-0.04	0.04	0.13	-0.04	-0.07	0.00	0.01	-0.01	-0.02
20	6	0.02	-0.01	-0.05	-0.09	0.11	-0.05	0.01	-0.01	-0.03
21	1	0.11	-0.10	-0.32	0.05	0.22	-0.05	0.04	-0.05	-0.15
22	6	0.04	-0.05	-0.14	-0.04	-0.08	0.02	0.00	0.00	0.00
23	6	-0.04	0.04	0.12	-0.12	0.01	-0.04	-0.04	0.04	0.13
24	1	0.05	-0.04	-0.15	-0.14	0.17	-0.07	0.01	-0.01	-0.02
25	1	0.10	-0.12	-0.35	-0.05	-0.08	0.03	-0.01	0.02	0.04
26	1	-0.05	0.05	0.14	-0.22	0.00	-0.06	-0.10	0.10	0.31
27	1	0.12	-0.15	-0.43	-0.03	-0.17	0.09	0.00	0.01	0.01
28	47	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.04

		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies	--	352.9390			371.8704			382.5054		
Red. masses	--	5.7688			8.6319			1.1121		
Frc consts	--	0.4234			0.7033			0.0959		
IR Inten	--	2.4655			1.4903			162.6145		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.08	-0.09	-0.20	0.05	-0.10	0.08	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.03	0.08	0.20	0.17	0.06	-0.01	0.00	0.01	0.02
3	6	0.05	-0.05	-0.12	0.12	0.03	0.05	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.03	0.10	0.19	0.25	0.17	-0.03	0.00	0.01	0.02
5	1	-0.07	0.11	0.28	0.08	0.05	-0.05	-0.01	0.02	0.05
6	6	-0.01	0.01	0.04	0.03	-0.12	0.05	0.00	0.00	0.01
7	1	0.07	-0.11	-0.24	-0.04	-0.12	0.04	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.05	0.03	0.13	-0.11	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.00

9	6	-0.01	-0.02	-0.01	-0.08	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.03	0.01	0.07	-0.15	-0.16	-0.02	0.00	0.00	0.00
11	1	-0.02	0.01	0.05	0.07	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.01
12	6	-0.04	0.08	0.17	0.12	0.12	-0.04	0.01	-0.01	-0.03
13	6	0.04	-0.03	-0.12	0.04	0.12	0.01	0.00	0.00	0.01
14	1	-0.07	0.11	0.27	0.09	0.02	-0.04	0.03	-0.04	-0.10
15	8	0.06	-0.02	-0.15	0.27	0.23	0.01	0.02	-0.02	-0.07
16	1	0.06	-0.02	-0.13	0.29	0.21	-0.04	-0.21	0.31	0.91
17	6	0.06	-0.08	-0.20	-0.01	0.02	0.04	0.00	0.00	0.00
18	6	0.03	-0.05	-0.15	-0.10	0.09	-0.02	0.00	0.00	0.01
19	6	-0.06	0.03	0.14	-0.16	-0.08	-0.05	0.00	0.00	-0.01
20	6	0.03	-0.07	-0.15	-0.22	-0.17	0.01	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.04	0.02	0.09	-0.13	-0.13	-0.05	0.00	0.00	-0.01
22	6	-0.04	0.03	0.10	-0.11	0.05	-0.08	0.00	0.00	0.00
23	6	-0.03	-0.01	0.03	-0.18	-0.12	-0.01	0.00	0.00	0.00
24	1	0.10	-0.14	-0.38	-0.23	-0.17	0.04	0.00	0.00	0.01
25	1	-0.06	0.06	0.19	-0.01	0.05	-0.08	0.00	0.00	-0.01
26	1	-0.02	-0.02	0.01	-0.13	-0.11	0.01	0.00	0.00	0.01
27	1	0.05	-0.09	-0.24	-0.15	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
28	47	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

13

14

15

		A		A		A
Frequencies	--	411.8401		418.4161		476.6732
Red. masses	--	3.7335		4.5555		7.1528
Frc consts	--	0.3731		0.4699		0.9576
IR Inten	--	3.5155		9.8499		6.6204

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	0.06	0.18	-0.03	-0.01	0.05	0.14	0.24	-0.03
2	6	0.05	-0.07	-0.10	-0.09	0.12	-0.11	0.07	0.09	-0.03
3	6	-0.02	0.03	0.09	-0.03	0.02	0.02	0.05	0.15	-0.02
4	6	0.03	-0.03	0.01	-0.10	0.13	-0.08	0.00	0.00	0.00
5	1	0.11	-0.12	-0.22	-0.19	0.09	-0.17	0.15	0.10	-0.03
6	6	0.03	-0.05	-0.16	0.09	-0.11	0.00	0.20	0.14	0.02
7	1	-0.05	0.10	0.24	-0.09	-0.02	0.04	0.11	0.26	0.00
8	6	-0.01	-0.02	-0.10	0.15	-0.06	0.03	0.13	0.04	0.00
9	6	-0.02	0.03	-0.02	0.09	-0.11	0.07	0.01	-0.06	0.02
10	6	-0.06	0.00	0.12	0.03	0.13	0.01	0.20	-0.06	0.09
11	1	0.07	-0.03	-0.22	0.06	-0.22	0.01	0.20	0.12	-0.01
12	6	0.01	0.02	0.13	-0.11	0.14	-0.05	-0.15	-0.03	-0.02
13	6	0.04	-0.04	-0.09	0.01	0.02	-0.04	-0.20	-0.01	-0.05
14	1	-0.05	0.06	0.30	-0.08	0.25	-0.02	-0.20	-0.12	0.01
15	8	-0.02	0.02	-0.02	0.10	-0.10	0.06	-0.06	0.07	-0.04
16	1	-0.03	0.13	0.14	-0.05	-0.33	0.19	-0.01	0.18	-0.07
17	6	0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.10	0.07	-0.04
18	6	0.04	-0.05	-0.15	0.04	-0.01	-0.04	-0.22	-0.04	-0.07
19	6	-0.03	0.08	0.08	0.00	-0.14	0.08	-0.07	-0.15	0.03
20	6	0.01	-0.03	0.02	-0.10	0.11	-0.06	0.10	-0.11	0.08
21	1	-0.13	0.03	0.29	0.09	0.30	0.02	0.17	-0.12	0.11
22	6	-0.07	0.08	0.14	0.06	-0.07	0.10	-0.13	-0.14	0.03
23	6	0.07	-0.02	-0.12	-0.12	-0.03	-0.07	0.03	-0.25	0.07
24	1	0.02	-0.05	0.04	-0.16	0.19	-0.10	-0.01	0.02	0.03
25	1	-0.13	0.12	0.27	0.15	-0.04	0.17	-0.06	-0.12	0.06
26	1	0.16	-0.07	-0.28	-0.26	-0.08	-0.16	0.06	-0.25	0.07
27	1	0.07	-0.12	-0.28	0.07	0.03	-0.08	-0.18	0.03	-0.10
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

16

17

18

		A		A		A
Frequencies	--	501.5143		512.4731		518.9294
Red. masses	--	4.8701		4.3785		3.8289
Frc consts	--	0.7217		0.6775		0.6075
IR Inten	--	2.5061		3.0511		4.4916

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.21	-0.01	0.04	-0.09	0.09	-0.02	0.01	-0.06	-0.17

2	6	-0.04	-0.06	0.00	0.07	-0.17	0.08	0.02	-0.03	-0.01
3	6	0.04	-0.16	0.09	-0.08	0.02	-0.04	-0.03	0.03	0.04
4	6	-0.03	0.08	-0.03	0.11	-0.13	0.07	0.00	0.01	0.09
5	1	-0.24	-0.10	-0.07	0.19	-0.13	0.15	0.10	-0.10	-0.21
6	6	0.06	0.19	-0.02	0.00	-0.04	-0.02	-0.08	0.05	0.17
7	1	0.41	0.06	0.14	-0.15	0.07	-0.04	0.00	-0.11	-0.26
8	6	-0.15	0.07	-0.10	0.02	-0.02	0.03	0.05	-0.04	-0.10
9	6	-0.16	-0.08	-0.04	-0.01	-0.10	0.06	0.06	-0.06	-0.15
10	6	-0.12	0.01	-0.05	-0.02	0.08	-0.03	0.02	0.00	-0.03
11	1	0.17	0.38	-0.10	-0.04	-0.13	0.01	-0.18	0.08	0.36
12	6	-0.13	0.07	-0.06	0.07	-0.09	0.06	0.03	-0.02	-0.01
13	6	-0.06	0.01	-0.02	-0.09	0.13	-0.08	-0.01	0.03	0.05
14	1	-0.13	0.05	-0.07	-0.03	-0.28	0.13	0.08	-0.12	-0.22
15	8	0.04	0.00	0.01	-0.02	0.03	-0.02	0.00	0.00	-0.01
16	1	-0.01	-0.11	0.04	0.06	0.21	-0.06	0.03	0.01	-0.07
17	6	-0.11	-0.14	0.05	-0.10	0.01	-0.07	-0.06	0.09	0.21
18	6	0.13	0.06	-0.01	0.02	0.22	-0.06	0.04	-0.04	-0.15
19	6	0.04	-0.06	0.02	0.05	-0.13	0.07	0.03	-0.03	-0.08
20	6	0.04	0.02	0.03	-0.04	0.08	-0.04	-0.02	0.03	0.03
21	1	-0.18	-0.14	-0.01	0.01	0.12	-0.06	-0.01	0.06	0.08
22	6	0.13	0.06	0.05	0.17	0.03	0.02	-0.04	0.06	0.16
23	6	0.04	-0.07	0.02	-0.06	-0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.05
24	1	0.05	-0.01	0.07	-0.06	0.10	-0.08	-0.08	0.09	0.20
25	1	0.18	0.08	0.10	0.40	0.07	0.05	-0.09	0.13	0.38
26	1	-0.03	-0.08	0.00	-0.20	-0.08	-0.06	-0.04	0.02	0.06
27	1	0.17	0.14	-0.05	0.09	0.39	-0.08	0.09	-0.09	-0.32
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies	--	553.6350			562.9572			568.0230		
Red. masses	--	3.5437			4.7285			4.2587		
Frc consts	--	0.6400			0.8829			0.8096		
IR Inten	--	0.1468			2.5880			3.7911		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	0.00	0.14	-0.11	0.03	0.09	-0.07	0.09
2	6	-0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.05	-0.03	-0.04	-0.01	0.05
3	6	0.02	-0.04	-0.10	0.02	0.00	0.18	0.09	-0.12	-0.15
4	6	-0.02	0.04	0.11	-0.07	-0.05	0.01	-0.06	-0.04	0.00
5	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.11	-0.19	-0.10	0.05	0.23
6	6	-0.03	0.02	0.05	0.15	-0.09	0.05	0.10	-0.04	0.09
7	1	-0.05	0.05	0.08	0.19	-0.21	-0.15	0.01	0.05	0.28
8	6	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01	0.18	0.11	-0.09	-0.14
9	6	-0.06	0.07	0.20	0.03	0.03	0.00	0.02	0.02	0.00
10	6	0.06	-0.06	-0.17	0.06	-0.03	-0.03	0.03	0.00	0.05
11	1	-0.06	0.03	0.09	0.26	-0.13	-0.14	0.03	0.08	0.28
12	6	0.00	0.01	0.02	-0.02	0.01	0.04	0.01	-0.01	-0.05
13	6	0.04	-0.05	-0.11	0.02	0.03	-0.19	-0.05	0.13	0.14
14	1	0.00	0.02	0.05	-0.07	0.06	0.18	0.05	-0.07	-0.22
15	8	0.02	-0.01	-0.03	-0.12	-0.10	0.00	-0.09	-0.08	0.01
16	1	0.02	-0.03	-0.06	-0.13	-0.06	0.06	-0.07	-0.11	-0.08
17	6	0.01	-0.02	-0.04	0.01	0.02	0.02	0.03	-0.01	-0.02
18	6	0.00	-0.01	0.00	-0.06	0.15	-0.07	-0.05	0.12	-0.06
19	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.20	-0.10	0.11	0.14
20	6	-0.07	0.07	0.22	-0.03	-0.03	0.01	-0.03	-0.03	0.01
21	1	0.15	-0.15	-0.44	0.14	-0.01	-0.19	0.00	0.10	0.20
22	6	-0.01	0.01	0.03	-0.06	0.18	-0.06	-0.05	0.14	-0.08
23	6	0.05	-0.06	-0.16	-0.03	0.04	0.02	0.00	-0.01	-0.07
24	1	-0.14	0.15	0.44	-0.04	-0.02	0.01	-0.05	0.00	0.02
25	1	-0.05	0.04	0.13	-0.09	0.29	0.22	0.09	0.05	-0.36
26	1	0.15	-0.15	-0.44	0.00	0.10	0.19	0.12	-0.06	-0.24
27	1	-0.04	0.02	0.13	-0.16	0.21	0.19	0.02	-0.02	-0.35
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

22

23

24



		A			A			A		
Frequencies		--	578.2831		617.4927		635.1599			
Red. masses		--	6.4281		6.5356		3.0586			
Frc consts		--	1.2665		1.4682		0.7270			
IR Inten		--	10.6756		2.3518		5.7270			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.11	-0.07	0.05	-0.05	-0.19	0.05	-0.02	0.03	0.09
2	6	0.12	0.14	-0.01	-0.03	-0.14	0.05	0.02	-0.03	-0.08
3	6	0.14	0.13	-0.03	-0.06	-0.17	0.05	0.03	-0.04	-0.09
4	6	0.00	-0.03	0.02	0.11	0.07	-0.02	-0.08	0.12	0.32
5	1	0.24	0.16	0.03	-0.25	-0.16	0.03	0.12	-0.20	-0.50
6	6	0.16	-0.16	0.12	-0.05	-0.12	0.02	0.03	-0.02	-0.06
7	1	-0.09	-0.12	-0.01	-0.02	-0.19	0.05	-0.06	0.10	0.21
8	6	-0.08	-0.16	0.01	0.09	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.22	-0.02	-0.08	0.15	0.11	0.01	-0.02	0.02	0.05
11	1	0.19	-0.06	0.12	-0.07	-0.19	0.03	0.02	0.00	-0.03
12	6	-0.18	-0.09	-0.02	-0.15	0.00	-0.04	0.02	-0.03	-0.08
13	6	-0.18	-0.07	-0.01	-0.18	-0.01	-0.05	0.00	-0.01	-0.04
14	1	-0.22	-0.19	-0.02	-0.24	-0.17	0.04	0.13	-0.20	-0.51
15	8	-0.08	0.05	-0.04	0.19	0.15	0.00	0.02	-0.01	-0.05
16	1	0.00	0.21	-0.10	0.17	0.11	0.03	0.04	-0.07	-0.17
17	6	-0.07	0.09	-0.05	-0.11	-0.09	-0.01	-0.02	0.01	0.04
18	6	0.03	-0.07	0.03	-0.18	0.00	-0.05	-0.02	0.02	0.04
19	6	0.15	0.07	0.04	0.02	0.08	-0.02	0.01	-0.01	-0.03
20	6	-0.05	0.05	-0.01	0.21	0.17	0.01	0.02	-0.02	-0.06
21	1	-0.20	0.01	-0.09	0.14	0.11	0.04	-0.04	0.03	0.11
22	6	0.10	-0.14	0.09	-0.12	-0.02	-0.03	0.01	-0.01	-0.04
23	6	0.07	0.23	-0.07	0.13	0.12	0.00	-0.01	0.02	0.05
24	1	0.10	-0.14	0.12	0.21	0.18	0.01	0.04	-0.03	-0.11
25	1	0.03	-0.16	0.05	-0.19	-0.03	-0.07	-0.01	0.00	0.01
26	1	0.06	0.22	-0.11	0.13	0.12	-0.01	-0.04	0.05	0.13
27	1	0.12	0.10	-0.05	-0.17	0.03	-0.06	-0.06	0.07	0.19
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		A			A			A		
Frequencies		--	700.5651		755.1911		773.9242			
Red. masses		--	4.0394		2.6803		5.8359			
Frc consts		--	1.1680		0.9006		2.0595			
IR Inten		--	2.1356		38.3868		12.8626			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	0.05	0.11	0.00	0.01	0.00	0.00	0.30	-0.11
2	6	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.04	-0.12	-0.22	0.04
3	6	0.06	-0.08	-0.21	0.03	-0.06	-0.14	-0.16	-0.07	0.01
4	6	0.01	-0.01	-0.04	0.02	-0.02	-0.05	0.00	0.04	0.00
5	1	-0.11	0.12	0.34	-0.11	0.12	0.36	-0.29	-0.26	-0.03
6	6	0.04	-0.04	-0.11	0.01	0.00	0.00	0.19	0.03	0.05
7	1	-0.08	0.10	0.21	-0.06	0.10	0.15	0.08	0.24	-0.21
8	6	-0.07	0.08	0.22	0.05	-0.05	-0.12	0.09	-0.07	0.07
9	6	0.01	-0.01	-0.03	-0.04	0.06	0.16	0.07	0.00	-0.01
10	6	0.01	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.05	0.00	-0.12	0.03
11	1	0.11	-0.11	-0.25	-0.06	0.06	0.15	0.09	-0.12	0.13
12	6	-0.01	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.03	-0.04	0.03	-0.03
13	6	-0.05	0.07	0.20	0.02	-0.04	-0.11	-0.02	-0.02	0.01
14	1	0.05	-0.07	-0.20	-0.10	0.11	0.31	-0.05	0.00	-0.05
15	8	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.10	0.06	0.01
16	1	0.01	-0.01	-0.04	0.00	0.01	0.01	0.04	-0.09	0.04
17	6	-0.01	0.00	0.02	-0.05	0.05	0.15	-0.04	-0.04	-0.02
18	6	0.04	-0.05	-0.12	0.02	-0.01	-0.01	0.06	-0.05	0.04
19	6	0.05	-0.06	-0.19	0.04	-0.02	-0.11	0.03	0.13	-0.01
20	6	0.00	0.01	0.02	0.01	-0.05	-0.09	-0.19	-0.17	0.01
21	1	0.09	-0.10	-0.27	-0.12	0.14	0.40	0.08	0.03	-0.07
22	6	-0.04	0.05	0.12	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00

23	6	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.03	0.04	-0.01	0.19	-0.07
24	1	-0.01	0.01	0.04	-0.06	0.02	0.12	-0.08	-0.31	0.03
25	1	-0.10	0.11	0.30	-0.08	0.08	0.23	-0.11	-0.04	-0.07
26	1	-0.06	0.06	0.19	-0.10	0.13	0.35	0.22	0.22	-0.08
27	1	0.10	-0.13	-0.33	-0.06	0.09	0.26	0.08	-0.06	0.01
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			28				29			30
			A				A			A
Frequencies	--	777.9190				815.8592			827.5718	
Red. masses	--	5.3916				1.4002			4.8983	
Frc consts	--	1.9224				0.5491			1.9766	
IR Inten	--	0.3881				7.3902			6.5702	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	-0.08	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.15	-0.05
2	6	0.09	0.05	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.03	-0.02
3	6	0.06	0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.04	-0.04	0.07	-0.04
4	6	0.04	-0.03	0.03	0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.01
5	1	0.17	0.05	-0.03	-0.02	0.04	0.09	0.07	0.06	0.03
6	6	-0.11	0.00	-0.04	0.01	-0.01	-0.02	0.19	-0.14	0.10
7	1	-0.04	-0.06	0.06	-0.04	0.07	0.12	-0.29	-0.01	-0.29
8	6	0.08	0.06	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.07	0.01
9	6	0.00	0.07	-0.03	0.02	-0.02	-0.07	-0.13	-0.10	-0.01
10	6	0.21	-0.01	0.07	-0.02	0.02	0.06	-0.08	0.08	-0.06
11	1	-0.11	-0.06	-0.07	-0.08	0.06	0.17	0.10	-0.27	0.19
12	6	-0.24	-0.09	-0.04	-0.01	0.01	0.02	0.02	-0.01	0.00
13	6	-0.12	-0.13	0.02	0.01	-0.01	-0.03	0.06	-0.09	0.03
14	1	-0.31	-0.24	-0.02	-0.01	0.01	0.04	0.03	0.06	0.04
15	8	0.02	0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
16	1	0.08	0.19	-0.05	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
17	6	-0.01	-0.03	-0.01	-0.03	0.03	0.09	-0.09	-0.07	0.01
18	6	0.27	-0.04	0.09	0.01	-0.01	-0.02	0.14	-0.08	0.08
19	6	-0.07	0.07	-0.04	-0.01	0.01	0.02	-0.09	0.00	-0.02
20	6	-0.15	-0.08	-0.02	-0.02	0.02	0.06	0.16	0.13	0.00
21	1	0.28	0.14	0.03	0.14	-0.14	-0.43	-0.14	0.00	0.02
22	6	0.09	0.19	-0.03	0.01	-0.01	-0.05	-0.08	0.23	-0.10
23	6	-0.12	-0.07	-0.02	-0.01	0.01	0.05	0.05	-0.12	0.05
24	1	-0.30	0.11	-0.14	0.17	-0.16	-0.50	0.13	0.17	0.04
25	1	-0.02	0.16	-0.08	-0.07	0.08	0.23	-0.24	0.19	-0.18
26	1	-0.03	-0.06	0.00	0.14	-0.14	-0.42	-0.06	-0.13	0.05
27	1	0.30	0.00	0.05	-0.07	0.09	0.27	0.04	-0.34	0.11
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			31				32			33
			A				A			A
Frequencies	--	849.9082				877.0513			899.9419	
Red. masses	--	2.3321				1.4803			1.5957	
Frc consts	--	0.9925				0.6709			0.7614	
IR Inten	--	0.3662				4.3075			33.3859	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.01	0.04	0.02	-0.02	-0.05	0.02	-0.02	-0.06
2	6	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.03	-0.02	0.03	0.08
3	6	0.03	-0.03	-0.08	-0.01	0.01	0.03	0.00	0.00	-0.01
4	6	-0.01	0.02	0.05	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.02	-0.06
5	1	-0.05	0.07	0.19	0.08	-0.10	-0.27	0.11	-0.14	-0.38
6	6	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.02	-0.03	0.02	-0.03	-0.06
7	1	0.01	-0.05	-0.06	-0.08	0.21	0.34	-0.15	0.33	0.54
8	6	-0.03	0.03	0.08	0.01	-0.02	-0.03	-0.03	0.02	0.10
9	6	0.05	-0.04	-0.15	-0.02	0.02	0.07	0.02	-0.03	-0.06
10	6	0.01	-0.01	-0.03	-0.02	0.02	0.06	0.01	-0.01	-0.05
11	1	0.06	-0.04	-0.15	-0.17	0.11	0.35	-0.15	0.06	0.28
12	6	0.01	-0.02	-0.06	0.01	-0.02	-0.05	-0.01	0.01	0.04
13	6	0.03	-0.04	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.02
14	1	-0.15	0.20	0.54	-0.08	0.11	0.29	0.04	-0.05	-0.13
15	8	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01

16	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.03
17	6	-0.04	0.06	0.16	0.01	-0.01	-0.04	-0.01	0.01	0.03
18	6	-0.03	0.04	0.09	-0.01	0.01	0.04	0.01	-0.01	-0.01
19	6	-0.02	0.02	0.07	0.03	-0.03	-0.10	-0.02	0.03	0.08
20	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.02
21	1	0.01	0.00	0.00	0.08	-0.08	-0.26	-0.05	0.04	0.13
22	6	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.03	0.06	0.01	0.00	-0.03
23	6	0.01	-0.01	-0.04	0.00	0.01	0.02	0.02	-0.01	-0.04
24	1	-0.05	0.04	0.13	0.08	-0.07	-0.21	-0.10	0.10	0.32
25	1	0.16	-0.17	-0.48	0.07	-0.08	-0.26	-0.02	0.02	0.04
26	1	-0.02	0.02	0.06	-0.02	0.02	0.07	-0.04	0.04	0.12
27	1	0.09	-0.10	-0.33	0.12	-0.16	-0.42	-0.06	0.06	0.22
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		34			35			36		
		A			A			A		
Frequencies	--	932.2597			946.2792			973.7858		
Red. masses	--	1.4541			1.8081			1.3559		
Frc consts	--	0.7446			0.9539			0.7575		
IR Inten	--	6.7335			111.1227			11.5317		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	0.02	0.01	-0.01	-0.04	0.02	-0.03	-0.06
2	6	-0.02	0.03	0.08	0.04	-0.05	-0.13	0.00	0.00	-0.05
3	6	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	0.03	0.09	-0.03	0.02	0.02
4	6	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.04	0.09	-0.01	0.00	0.01
5	1	0.12	-0.18	-0.46	-0.13	0.22	0.56	-0.05	0.09	0.19
6	6	-0.01	0.01	0.03	0.01	-0.02	-0.06	-0.01	0.02	0.04
7	1	-0.01	-0.04	-0.05	0.00	0.12	0.18	-0.13	0.26	0.45
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.04	0.00	-0.01	0.02
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.01
10	6	0.01	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.02	0.03	-0.02	-0.07
11	1	0.13	-0.08	-0.25	-0.21	0.11	0.38	0.15	-0.13	-0.31
12	6	0.04	-0.05	-0.12	0.02	-0.03	-0.10	0.01	-0.01	0.03
13	6	-0.02	0.03	0.08	-0.02	0.03	0.08	0.01	-0.01	-0.02
14	1	-0.15	0.22	0.59	-0.10	0.14	0.36	0.04	-0.05	-0.08
15	8	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00
16	1	-0.01	0.01	0.03	0.00	-0.02	-0.03	0.00	-0.01	-0.01
17	6	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00
18	6	0.01	-0.01	-0.04	0.01	-0.01	-0.04	0.00	0.01	0.03
19	6	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.04	0.02	-0.02	-0.04
20	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.02
21	1	-0.06	0.06	0.18	-0.01	0.00	0.03	-0.14	0.15	0.42
22	6	0.01	-0.01	-0.04	0.01	-0.01	-0.04	-0.01	0.01	0.01
23	6	-0.01	0.01	0.03	0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.04	0.07
24	1	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.06	0.17	0.06	-0.06	-0.14
25	1	-0.09	0.10	0.30	-0.07	0.09	0.25	-0.01	0.00	-0.03
26	1	0.06	-0.06	-0.18	-0.02	0.01	0.04	0.13	-0.13	-0.42
27	1	-0.03	0.04	0.11	-0.05	0.05	0.15	0.05	-0.08	-0.17
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		37			38			39		
		A			A			A		
Frequencies	--	987.5515			991.3154			998.3665		
Red. masses	--	2.4612			2.0925			4.0531		
Frc consts	--	1.4142			1.2115			2.3802		
IR Inten	--	7.1500			30.9205			26.7892		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	0.10	0.01	0.01	-0.04	0.07	0.00	-0.04	-0.02
2	6	0.12	-0.02	0.06	-0.06	-0.04	0.02	0.15	-0.19	0.10
3	6	0.09	-0.03	0.02	-0.03	0.01	-0.02	0.01	0.04	0.00
4	6	0.05	0.02	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.07	0.07	0.00
5	1	0.22	-0.05	-0.03	-0.12	-0.08	-0.08	0.28	-0.16	0.18
6	6	-0.07	-0.01	-0.09	0.11	-0.06	-0.04	0.01	-0.04	0.06
7	1	0.14	-0.09	-0.34	0.04	-0.26	-0.28	-0.27	0.07	0.19
8	6	0.01	-0.01	0.05	-0.04	0.06	0.01	-0.02	0.00	-0.03

9	6	0.04	-0.06	0.04	-0.04	0.10	-0.04	-0.11	0.05	-0.05
10	6	-0.01	-0.03	-0.07	0.05	-0.01	-0.06	0.09	0.00	0.06
11	1	-0.35	0.02	0.38	-0.12	0.27	0.52	0.15	-0.14	-0.23
12	6	-0.11	0.10	-0.05	0.05	-0.01	0.03	0.00	0.24	-0.09
13	6	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.02	0.01	0.11	-0.03
14	1	-0.07	0.14	-0.14	0.06	-0.05	-0.02	0.07	0.42	-0.13
15	8	-0.06	-0.05	0.00	0.02	0.02	0.00	-0.10	-0.10	0.01
16	1	0.00	0.09	-0.03	-0.02	-0.08	0.02	-0.08	-0.03	-0.01
17	6	0.05	-0.08	0.04	-0.03	0.09	-0.04	-0.11	0.05	-0.05
18	6	-0.04	0.03	0.00	0.03	-0.02	0.04	0.08	-0.09	0.05
19	6	0.02	-0.04	-0.02	-0.01	0.02	-0.05	-0.04	0.04	-0.02
20	6	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.02	0.00
21	1	-0.16	0.09	0.35	-0.10	0.08	0.34	0.13	-0.07	-0.07
22	6	-0.03	0.03	-0.01	0.03	-0.07	0.04	0.00	-0.12	0.04
23	6	-0.01	0.07	0.05	-0.03	-0.06	0.08	-0.01	-0.01	-0.03
24	1	0.09	-0.09	0.04	-0.12	0.13	-0.07	-0.08	0.13	-0.11
25	1	0.02	0.04	-0.01	-0.03	-0.08	0.04	-0.22	-0.18	-0.02
26	1	0.10	-0.07	-0.37	0.12	-0.19	-0.30	-0.05	0.04	0.12
27	1	-0.04	-0.11	-0.14	0.13	0.04	-0.13	0.09	-0.04	0.10
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

40

41

42

		A			A			A		
Frequencies	--	1015.3183			1036.3430			1050.1658		
Red. masses	--	6.7298			1.3707			1.4251		
Frc consts	--	4.0875			0.8673			0.9260		
IR Inten	--	3.1787			0.7586			0.9521		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.01	0.24	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.04	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
5	1	0.04	0.24	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.01	0.00	-0.04	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01
7	1	0.05	-0.11	-0.20	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01
8	6	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
9	6	-0.26	-0.19	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.27	-0.09	0.11	-0.02	0.02	0.05	-0.02	0.02	0.05
11	1	-0.12	0.07	0.21	0.03	-0.02	-0.06	0.02	-0.01	-0.04
12	6	0.24	-0.03	0.08	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01
13	6	0.00	0.03	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.01
14	1	0.27	0.00	0.07	0.02	-0.02	-0.08	-0.01	0.02	0.04
15	8	-0.03	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	0.01	0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.25	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.01	0.01	0.00	-0.03	0.03	0.09	0.02	-0.02	-0.06
19	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.03
20	6	-0.03	-0.02	-0.01	0.03	-0.02	-0.07	0.03	-0.03	-0.10
21	1	0.28	-0.06	0.15	0.09	-0.08	-0.27	0.09	-0.08	-0.26
22	6	0.02	-0.03	0.02	0.03	-0.03	-0.09	-0.02	0.03	0.08
23	6	-0.03	0.28	-0.09	-0.01	0.01	0.03	-0.03	0.03	0.09
24	1	-0.03	0.00	0.01	-0.14	0.13	0.41	-0.17	0.17	0.52
25	1	-0.01	-0.03	0.01	-0.15	0.17	0.50	0.11	-0.13	-0.39
26	1	0.01	0.28	-0.15	0.06	-0.06	-0.18	0.15	-0.15	-0.44
27	1	0.02	0.01	-0.02	0.15	-0.18	-0.52	-0.09	0.11	0.32
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

43

44

45

		A			A			A		
Frequencies	--	1110.9549			1138.7902			1157.2269		
Red. masses	--	2.0580			2.3952			1.6458		
Frc consts	--	1.4965			1.8301			1.2985		
IR Inten	--	26.7835			11.2987			179.0150		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	-0.01	0.00	0.04	-0.09	0.07	0.03	0.02	0.01

2	6	0.01	0.04	-0.01	0.01	-0.04	0.02	-0.05	0.04	-0.03
3	6	0.02	-0.02	0.01	-0.08	0.06	-0.05	0.01	-0.02	0.01
4	6	0.03	0.01	0.00	-0.04	-0.01	-0.01	0.09	0.03	0.02
5	1	-0.02	0.04	-0.02	0.32	0.00	0.07	-0.47	-0.02	-0.12
6	6	-0.01	0.00	0.00	-0.04	0.07	-0.06	-0.05	0.00	-0.01
7	1	-0.02	-0.01	0.00	0.31	-0.13	0.00	0.35	0.07	0.04
8	6	0.05	0.03	0.01	0.04	-0.04	0.04	0.03	-0.05	0.02
9	6	-0.04	-0.02	-0.01	0.07	-0.12	0.06	0.04	0.00	0.01
10	6	-0.06	0.13	-0.06	-0.02	0.02	-0.02	-0.03	-0.01	0.00
11	1	-0.06	-0.12	0.02	0.04	0.43	-0.01	-0.10	-0.13	0.00
12	6	0.04	0.02	0.00	0.02	0.01	0.00	0.03	0.00	0.01
13	6	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.05	-0.03	-0.04	0.06	-0.03
14	1	0.05	0.03	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.04	-0.15	0.05
15	8	-0.02	-0.03	0.01	0.01	0.03	-0.01	-0.03	-0.08	0.02
16	1	0.04	0.11	-0.03	-0.13	-0.27	0.06	0.25	0.52	-0.12
17	6	-0.05	-0.05	0.00	-0.09	0.10	-0.06	-0.02	0.05	-0.03
18	6	-0.02	-0.01	0.00	0.06	-0.07	0.04	0.06	-0.03	0.03
19	6	0.04	0.05	0.00	0.04	-0.06	0.03	-0.01	0.01	-0.01
20	6	-0.11	-0.09	-0.01	0.00	-0.03	0.01	0.03	0.02	0.00
21	1	0.13	0.61	-0.15	0.06	0.25	-0.04	-0.04	-0.04	0.00
22	6	0.00	-0.02	0.01	-0.05	0.08	-0.04	-0.03	-0.01	-0.01
23	6	0.12	-0.09	0.07	0.01	0.03	-0.01	-0.02	-0.02	0.00
24	1	-0.13	-0.09	-0.02	0.16	-0.24	0.13	0.07	-0.02	0.03
25	1	-0.10	-0.04	-0.01	-0.26	0.04	-0.09	-0.33	-0.07	-0.08
26	1	0.61	0.00	0.20	-0.05	0.02	-0.02	-0.16	-0.05	-0.04
27	1	-0.01	0.02	-0.01	-0.06	-0.33	0.10	0.11	0.06	0.01
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

46

47

48

Frequencies	--	1162.4661	1206.8250	1216.8486
Red. masses	--	1.4854	1.3293	1.3083
Frc consts	--	1.1827	1.1407	1.1414
IR Inten	--	126.6273	48.3782	1.8878

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	-0.07	0.00	0.03	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.01
2	6	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.01	-0.01
3	6	-0.05	0.03	-0.02	-0.03	0.01	-0.02	-0.08	0.00	-0.03
4	6	0.05	-0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	-0.06	-0.08	0.01
5	1	-0.08	0.00	-0.01	-0.07	-0.02	-0.01	0.49	0.09	0.09
6	6	0.08	0.04	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.01
7	1	-0.49	-0.14	-0.05	0.24	0.03	0.04	0.39	0.04	0.06
8	6	-0.02	0.05	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00
9	6	0.02	-0.02	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	0.01	0.01	0.00	0.02	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00
11	1	0.24	0.47	-0.02	-0.03	-0.05	0.00	-0.02	-0.08	0.02
12	6	-0.04	0.03	-0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01
13	6	0.01	-0.02	0.01	0.03	-0.01	0.01	0.00	-0.04	0.01
14	1	-0.01	0.11	-0.04	0.01	0.07	-0.02	0.18	0.45	-0.12
15	8	0.00	-0.05	0.02	0.00	-0.02	0.01	0.05	0.01	0.01
16	1	0.27	0.52	-0.11	0.12	0.22	-0.05	0.21	0.34	-0.06
17	6	0.02	-0.03	0.01	-0.04	0.05	-0.03	0.00	-0.02	0.01
18	6	-0.01	0.01	-0.01	-0.05	-0.03	0.00	0.00	0.03	-0.01
19	6	0.02	-0.02	0.01	0.05	-0.02	0.02	-0.01	0.02	-0.01
20	6	0.00	-0.04	0.01	-0.04	0.03	-0.03	0.01	0.01	0.00
21	1	0.01	0.02	0.01	-0.02	-0.12	0.03	-0.02	-0.05	0.01
22	6	-0.01	0.02	-0.01	0.03	0.05	-0.01	-0.01	-0.02	0.00
23	6	-0.01	0.03	-0.01	0.04	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00
24	1	0.07	-0.13	0.07	-0.27	0.32	-0.19	-0.05	0.08	-0.04
25	1	0.08	0.04	0.01	0.43	0.13	0.08	-0.12	-0.04	-0.02
26	1	-0.03	0.03	-0.02	0.17	0.03	0.04	0.04	0.00	0.01
27	1	-0.05	-0.08	0.01	-0.27	-0.52	0.11	0.12	0.30	-0.07
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

49

50

51

		A			A			A		
Frequencies	--	1229.8141			1245.5562			1280.9177		
Red. masses	--	1.2447			1.8279			1.7121		
Frc consts	--	1.1092			1.6708			1.6551		
IR Inten	--	11.5230			22.6742			45.8607		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.00	0.01	0.01	0.04	-0.01	0.02	-0.05	0.02
2	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.03	0.01	0.02	-0.02	0.01
3	6	0.01	0.00	0.00	0.10	0.03	0.02	0.04	0.03	0.00
4	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.01	-0.01	-0.02	0.00
5	1	-0.08	-0.03	-0.01	-0.40	-0.10	-0.07	-0.24	-0.06	-0.04
6	6	0.00	-0.02	0.01	-0.05	0.00	-0.02	0.01	0.02	0.00
7	1	0.13	0.02	0.02	-0.17	0.02	-0.05	-0.19	-0.08	-0.01
8	6	0.02	0.03	-0.01	-0.06	-0.12	0.02	0.07	0.15	-0.03
9	6	-0.05	0.07	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.03	0.03
10	6	0.01	0.02	0.00	0.04	0.00	0.01	-0.04	0.02	-0.02
11	1	-0.09	-0.25	0.04	0.05	0.28	-0.07	-0.17	-0.44	0.07
12	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.01	0.03	-0.01	0.01
13	6	0.00	-0.04	0.02	-0.04	-0.10	0.02	-0.05	-0.04	0.00
14	1	0.10	0.20	-0.05	0.25	0.46	-0.11	0.21	0.38	-0.09
15	8	0.01	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00	0.01	0.01	0.00
16	1	0.05	0.09	-0.02	-0.04	-0.09	0.02	-0.02	-0.05	0.01
17	6	-0.03	0.04	-0.02	-0.02	0.02	-0.02	-0.06	0.02	-0.03
18	6	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00
19	6	-0.03	-0.02	0.00	0.12	0.03	0.03	0.05	-0.04	0.03
20	6	0.02	-0.03	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.05	-0.03	-0.01
21	1	0.14	0.33	-0.07	0.17	0.29	-0.04	-0.28	-0.54	0.08
22	6	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.04	-0.02	-0.02	0.04	-0.02
23	6	-0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.01	0.00
24	1	0.36	-0.45	0.27	-0.15	0.19	-0.11	-0.02	-0.08	0.02
25	1	0.36	0.07	0.09	-0.19	0.02	-0.06	-0.15	0.02	-0.05
26	1	-0.32	-0.05	-0.09	-0.26	-0.09	-0.06	0.07	0.02	0.02
27	1	-0.07	-0.13	0.03	0.02	0.17	-0.05	0.02	0.05	-0.01
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		A			A			A		
Frequencies	--	1287.6797			1344.5721			1366.7058		
Red. masses	--	1.7186			3.1733			2.9356		
Frc consts	--	1.6790			3.3801			3.2307		
IR Inten	--	9.7495			87.3537			15.8039		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.03	0.00	0.05	-0.02	0.02
2	6	-0.01	0.03	-0.01	0.05	0.03	0.00	0.00	-0.06	0.02
3	6	-0.03	-0.04	0.00	-0.14	0.02	-0.05	-0.06	0.16	-0.08
4	6	0.01	0.01	0.00	0.18	0.18	-0.02	0.04	0.03	0.00
5	1	0.29	0.07	0.05	0.11	0.05	0.00	-0.32	-0.11	-0.04
6	6	0.04	-0.02	0.02	0.02	-0.02	0.02	0.00	-0.07	0.03
7	1	0.02	0.00	0.01	0.38	0.03	0.09	0.34	0.03	0.08
8	6	-0.03	0.07	-0.03	0.04	0.01	0.01	-0.13	0.08	-0.07
9	6	-0.01	0.05	-0.02	0.08	0.07	0.00	-0.08	-0.07	0.00
10	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.07	0.01	0.02
11	1	-0.03	-0.21	0.04	0.15	0.25	-0.03	-0.06	-0.25	0.05
12	6	0.00	0.02	-0.01	0.08	0.02	0.01	-0.07	-0.01	-0.02
13	6	0.02	0.03	0.00	-0.07	-0.20	0.05	0.13	-0.08	0.06
14	1	-0.12	-0.24	0.06	0.07	-0.06	0.04	-0.19	-0.25	0.04
15	8	0.00	-0.01	0.00	-0.09	-0.05	0.00	-0.01	-0.01	0.00
16	1	0.01	0.02	-0.01	-0.21	-0.28	0.04	-0.02	-0.02	0.00
17	6	-0.01	-0.05	0.02	-0.07	-0.07	0.00	0.09	0.05	0.01
18	6	-0.04	0.02	-0.02	-0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.05	-0.02
19	6	0.18	0.03	0.05	0.02	0.04	0.00	0.03	-0.13	0.05
20	6	-0.04	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.00
21	1	0.01	0.01	0.00	-0.09	-0.15	0.02	0.17	0.23	-0.02
22	6	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.04	-0.02	-0.05	0.02	-0.02

23	6	0.01	-0.04	0.02	-0.01	-0.03	0.01	0.03	0.07	-0.01
24	1	-0.09	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.00
25	1	-0.41	-0.05	-0.10	0.36	0.12	0.07	-0.32	-0.03	-0.09
26	1	-0.62	-0.18	-0.14	-0.14	-0.05	-0.03	0.22	0.11	0.04
27	1	-0.16	-0.25	0.04	0.14	0.43	-0.11	0.13	0.38	-0.09
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			55			56			57	
			A			A			A	
Frequencies	--	1396.3147			1422.8376			1437.2356		
Red. masses	--	5.0258			2.2817			3.2426		
Frc consts	--	5.7733			2.7216			3.9464		
IR Inten	--	16.1066			51.5557			106.9749		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	0.00	-0.01	0.18	0.03	0.04	-0.09	-0.08	0.01
2	6	0.13	0.02	0.03	-0.11	-0.05	-0.01	-0.04	-0.02	0.00
3	6	-0.04	-0.15	0.05	0.02	0.07	-0.01	0.02	-0.05	0.02
4	6	-0.07	0.13	-0.07	-0.04	0.03	-0.02	0.02	0.05	-0.01
5	1	0.03	0.00	0.02	0.34	0.00	0.08	0.21	0.01	0.05
6	6	0.01	0.05	-0.02	-0.07	0.01	-0.03	0.10	0.19	-0.04
7	1	-0.25	-0.04	-0.05	-0.54	-0.11	-0.12	-0.07	-0.10	-0.01
8	6	0.20	0.02	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.02
9	6	-0.11	0.09	-0.07	0.06	0.06	0.00	-0.13	-0.16	0.01
10	6	-0.08	-0.19	0.03	-0.03	-0.07	0.01	-0.01	0.01	-0.01
11	1	0.10	0.27	-0.05	-0.19	-0.23	0.02	-0.20	-0.49	0.12
12	6	-0.06	-0.14	0.04	0.07	0.07	-0.01	0.02	0.01	0.00
13	6	0.14	0.01	0.04	-0.05	-0.03	0.00	-0.06	-0.02	-0.01
14	1	0.07	0.13	-0.03	-0.10	-0.31	0.09	0.00	-0.06	0.02
15	8	0.00	-0.02	0.01	0.02	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.00
16	1	0.09	0.20	-0.04	0.09	0.15	-0.03	0.01	0.03	-0.01
17	6	-0.04	0.10	-0.05	-0.03	-0.06	0.01	0.15	0.16	-0.01
18	6	-0.03	-0.01	-0.01	0.02	-0.04	0.02	-0.06	-0.12	0.03
19	6	-0.06	-0.17	0.04	-0.01	-0.06	0.02	0.02	0.07	-0.02
20	6	-0.11	0.13	-0.08	0.00	0.03	-0.01	0.04	-0.07	0.04
21	1	0.06	0.14	-0.01	0.09	0.23	-0.04	0.02	0.10	-0.02
22	6	0.00	0.04	-0.01	-0.07	0.02	-0.03	0.02	0.06	-0.02
23	6	0.20	0.04	0.05	0.05	0.02	0.01	0.02	0.03	0.00
24	1	-0.01	0.00	0.00	-0.06	0.11	-0.06	-0.21	0.24	-0.15
25	1	-0.35	-0.02	-0.10	0.23	0.08	0.04	0.27	0.12	0.04
26	1	-0.26	-0.05	-0.07	-0.04	0.00	-0.02	-0.29	-0.03	-0.08
27	1	0.14	0.38	-0.10	0.13	0.21	-0.03	0.13	0.32	-0.08
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			58			59			60	
			A			A			A	
Frequencies	--	1439.7919			1468.4016			1478.3315		
Red. masses	--	5.3793			2.4126			4.2143		
Frc consts	--	6.5702			3.0649			5.4265		
IR Inten	--	10.6305			6.1323			6.5988		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.10	0.06	0.01	-0.05	0.04	-0.03	0.10	-0.04	0.05
2	6	0.11	0.00	0.03	-0.10	-0.05	-0.01	0.00	-0.06	0.02
3	6	-0.04	-0.17	0.06	0.11	-0.04	0.04	-0.02	0.18	-0.07
4	6	-0.12	0.20	-0.11	-0.03	0.07	-0.03	-0.05	0.00	-0.01
5	1	0.27	0.02	0.07	0.37	0.01	0.09	-0.19	-0.10	-0.01
6	6	-0.03	-0.03	-0.01	-0.02	-0.04	0.01	-0.07	0.07	-0.06
7	1	-0.46	-0.04	-0.12	0.08	0.08	0.01	-0.13	-0.10	-0.04
8	6	-0.16	-0.02	-0.05	-0.01	-0.04	0.01	0.19	-0.13	0.10
9	6	0.15	-0.08	0.07	-0.08	0.02	-0.03	-0.14	-0.07	-0.02
10	6	0.07	0.13	-0.02	0.08	0.06	0.01	0.00	0.08	-0.03
11	1	-0.09	-0.15	0.03	0.10	0.20	-0.05	-0.11	0.05	-0.02
12	6	-0.04	-0.16	0.05	0.07	0.04	0.00	-0.03	0.03	-0.02
13	6	0.18	-0.04	0.06	-0.09	-0.07	0.00	0.17	-0.08	0.07
14	1	0.00	-0.10	0.04	-0.03	-0.19	0.06	-0.20	-0.32	0.07
15	8	0.00	-0.04	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.02	0.00	0.00

16	1	0.16	0.32	-0.07	0.07	0.13	-0.03	0.07	0.11	-0.02
17	6	-0.17	0.14	-0.09	0.07	0.08	-0.01	-0.05	-0.05	0.00
18	6	-0.02	0.03	-0.01	-0.03	-0.02	0.00	-0.07	0.06	-0.04
19	6	0.05	0.09	-0.02	0.07	-0.07	0.05	0.01	0.20	-0.06
20	6	0.08	-0.07	0.05	-0.08	0.07	-0.05	-0.05	0.02	-0.02
21	1	0.00	-0.04	0.01	-0.08	-0.36	0.09	-0.24	-0.50	0.08
22	6	-0.01	-0.01	0.00	0.04	0.06	-0.01	0.08	-0.05	0.04
23	6	-0.16	-0.04	-0.04	-0.04	-0.03	0.00	0.00	-0.07	0.03
24	1	0.06	-0.05	0.03	0.27	-0.37	0.21	0.11	-0.20	0.10
25	1	0.05	0.00	0.01	-0.19	0.02	-0.07	-0.03	-0.07	0.01
26	1	0.25	0.05	0.07	0.37	0.04	0.11	-0.19	-0.12	-0.02
27	1	0.05	0.19	-0.05	-0.03	0.00	-0.01	-0.08	0.04	-0.04
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			61			62			63	
			A			A			A	
Frequencies	--	1490.3929			1503.1985			1534.3084		
Red. masses	--	2.2089			6.0452			3.3583		
Frc consts	--	2.8908			8.0481			4.6579		
IR Inten	--	55.5985			62.1926			3.6743		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	-0.03	0.03	0.17	0.07	0.02	-0.09	-0.01	-0.03
2	6	-0.02	0.01	-0.01	0.03	-0.04	0.02	-0.04	-0.09	0.02
3	6	-0.08	-0.01	-0.02	-0.11	0.07	-0.05	0.15	0.08	0.01
4	6	0.10	0.05	0.01	-0.01	0.15	-0.06	-0.11	0.11	-0.07
5	1	0.10	0.04	0.01	0.02	-0.05	0.02	0.15	-0.08	0.07
6	6	0.04	0.12	-0.04	-0.11	-0.18	0.03	-0.01	-0.06	0.02
7	1	-0.23	-0.11	-0.05	-0.16	0.03	-0.04	0.26	0.07	0.06
8	6	-0.01	-0.07	0.02	-0.05	0.13	-0.06	0.09	0.09	0.00
9	6	0.00	0.05	-0.02	0.01	-0.19	0.07	0.00	-0.02	0.01
10	6	-0.02	-0.06	0.02	0.03	-0.04	0.02	-0.09	0.00	-0.03
11	1	-0.17	-0.33	0.07	0.06	0.21	-0.06	0.12	0.20	-0.04
12	6	0.00	-0.03	0.01	0.02	-0.14	0.06	0.06	0.00	0.02
13	6	-0.05	-0.08	0.02	-0.17	0.10	-0.08	-0.04	-0.12	0.03
14	1	0.10	0.18	-0.04	0.28	0.39	-0.07	-0.01	-0.19	0.07
15	8	-0.03	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.01	0.02	-0.02	0.01
16	1	-0.08	-0.12	0.02	0.03	0.08	-0.02	0.12	0.21	-0.04
17	6	0.03	0.00	0.01	0.20	-0.05	0.08	-0.03	0.01	-0.01
18	6	0.00	0.12	-0.04	-0.11	-0.13	0.01	0.02	0.11	-0.03
19	6	-0.04	-0.03	0.00	-0.11	0.14	-0.08	-0.11	-0.03	-0.03
20	6	0.04	0.05	0.00	-0.06	0.05	-0.04	0.12	-0.14	0.09
21	1	0.09	0.18	-0.03	0.07	0.07	0.00	-0.04	0.18	-0.07
22	6	0.11	-0.01	0.04	0.23	0.07	0.04	0.08	-0.03	0.03
23	6	-0.07	-0.01	-0.02	0.08	-0.03	0.04	0.00	0.08	-0.03
24	1	0.08	0.02	0.02	0.09	-0.16	0.08	-0.29	0.37	-0.22
25	1	-0.46	-0.12	-0.09	-0.21	0.00	-0.07	-0.26	-0.10	-0.04
26	1	0.31	0.07	0.08	-0.30	-0.11	-0.06	-0.16	0.06	-0.07
27	1	-0.23	-0.39	0.07	-0.11	-0.08	-0.01	-0.15	-0.26	0.05
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			64			65			66	
			A			A			A	
Frequencies	--	1586.2496			1624.4541			1627.3815		
Red. masses	--	4.3405			5.8514			6.8989		
Frc consts	--	6.4348			9.0976			10.7648		
IR Inten	--	27.0852			69.9194			14.4356		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.16	0.09	0.01	-0.08	-0.05	0.01	0.06	0.01	0.03
2	6	-0.13	0.04	-0.05	0.03	-0.08	0.04	0.18	0.00	0.05
3	6	-0.06	-0.11	0.03	0.04	0.14	-0.04	-0.14	0.05	-0.06
4	6	0.19	-0.02	0.06	-0.08	0.20	-0.10	-0.13	0.05	-0.05
5	1	0.26	0.12	0.02	0.03	-0.09	0.05	-0.28	-0.07	-0.05
6	6	-0.11	-0.11	0.00	0.07	0.13	-0.02	-0.04	-0.02	-0.02
7	1	-0.29	0.01	-0.09	0.14	-0.03	0.03	-0.06	-0.03	-0.03
8	6	0.07	-0.04	0.04	-0.13	-0.18	0.01	0.14	-0.06	0.07



9	6	-0.12	0.01	-0.04	0.04	0.09	-0.02	-0.17	0.20	-0.12
10	6	0.02	0.20	-0.06	0.11	0.16	-0.01	-0.06	0.09	-0.05
11	1	0.03	0.23	-0.07	-0.09	-0.22	0.06	-0.01	0.09	-0.01
12	6	-0.07	-0.04	0.00	-0.01	-0.21	0.07	0.02	-0.06	0.03
13	6	0.02	-0.01	0.01	-0.08	0.10	-0.06	-0.07	0.14	-0.07
14	1	0.07	0.25	-0.08	0.21	0.25	-0.04	0.06	0.03	0.00
15	8	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.01	0.01	-0.01	0.00
16	1	-0.13	-0.22	0.04	0.07	0.15	-0.03	0.07	0.13	-0.02
17	6	0.07	0.12	-0.02	0.07	-0.15	0.07	0.13	-0.15	0.09
18	6	0.07	0.07	-0.01	0.15	0.12	0.00	-0.06	-0.15	0.03
19	6	-0.05	-0.09	0.01	-0.04	-0.05	0.01	0.18	-0.14	0.10
20	6	0.01	-0.17	0.06	-0.10	-0.02	-0.03	0.18	-0.15	0.11
21	1	-0.20	-0.32	0.03	-0.08	-0.33	0.08	-0.12	-0.03	-0.03
22	6	-0.06	-0.04	0.00	-0.17	-0.09	-0.02	0.02	0.09	-0.03
23	6	0.10	0.09	0.00	0.17	0.03	0.05	-0.25	0.04	-0.09
24	1	-0.24	0.11	-0.12	-0.03	-0.14	0.04	-0.12	0.23	-0.12
25	1	0.02	-0.04	0.02	0.19	-0.05	0.07	-0.05	0.10	-0.05
26	1	-0.27	0.03	-0.10	-0.26	-0.06	-0.06	0.38	0.17	0.07
27	1	-0.01	-0.12	0.04	0.02	-0.25	0.09	0.08	0.18	-0.04
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

67

68

69

		A	A	A
Frequencies	--	1650.6715	1673.7421	3177.9818
Red. masses	--	5.5859	6.8788	1.0878
Frc consts	--	8.9674	11.3538	6.4731
IR Inten	--	88.6188	105.7503	2.9373

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.01	0.01	0.06	0.03	0.01	0.00	-0.06	0.04
2	6	0.22	0.07	0.03	0.20	0.04	0.04	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.15	-0.10	0.00	-0.16	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.15	-0.13	0.01	-0.14	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00
5	1	-0.36	-0.01	-0.09	-0.23	-0.02	-0.05	0.00	-0.01	0.01
6	6	0.02	0.03	-0.01	-0.04	-0.06	0.01	-0.04	0.02	-0.03
7	1	-0.09	-0.03	-0.03	-0.12	-0.01	-0.03	-0.04	0.69	-0.41
8	6	-0.12	-0.11	-0.01	0.08	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.10	0.07	0.01	-0.14	-0.14	0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	0.08	0.15	-0.02	-0.04	-0.11	0.02	0.00	0.00	0.00
11	1	-0.05	-0.10	0.03	0.04	0.10	-0.02	0.49	-0.16	0.30
12	6	0.13	0.22	-0.05	0.10	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.10	-0.13	0.02	-0.19	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	-0.16	-0.40	0.11	-0.02	-0.20	0.07	0.00	0.00	0.00
15	8	0.02	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	0.06	0.09	-0.01	0.06	0.12	-0.02	0.00	0.00	0.00
17	6	0.01	0.03	-0.01	0.19	0.12	0.01	0.00	0.00	0.00
18	6	-0.06	-0.02	-0.01	0.21	0.24	-0.02	0.00	0.00	0.00
19	6	-0.18	-0.11	-0.02	0.13	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00
20	6	-0.05	-0.07	0.01	-0.01	0.07	-0.03	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.07	-0.22	0.05	0.05	0.11	-0.02	-0.02	0.01	-0.01
22	6	0.15	0.06	0.02	-0.27	-0.15	-0.03	0.00	0.00	0.00
23	6	0.16	0.07	0.03	-0.04	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.10	-0.04	-0.02	0.07	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.25	-0.01	-0.07	0.34	-0.06	0.12	0.00	0.00	0.00
26	1	-0.25	0.00	-0.08	0.07	-0.04	0.04	0.00	0.00	0.00
27	1	-0.07	-0.01	-0.02	-0.03	-0.37	0.12	0.00	0.00	0.00
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

70

71

72

		A	A	A
Frequencies	--	3197.0773	3197.3640	3203.1639
Red. masses	--	1.0929	1.0942	1.0900
Frc consts	--	6.5817	6.5907	6.5894
IR Inten	--	3.9004	3.1628	1.5118

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00

2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00
6	6	-0.02	0.01	-0.01	-0.05	0.02	-0.03	-0.01	0.00	-0.01
7	1	0.01	-0.21	0.12	0.02	-0.46	0.27	0.00	-0.06	0.03
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.07	0.02	-0.03
11	1	0.27	-0.08	0.16	0.60	-0.19	0.36	0.10	-0.04	0.06
12	6	-0.07	0.03	-0.03	0.03	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	0.79	-0.29	0.32	-0.36	0.13	-0.15	-0.02	0.01	-0.01
15	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00
21	1	-0.04	0.01	-0.02	-0.11	0.04	-0.05	0.79	-0.26	0.35
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01
24	1	0.01	0.01	0.00	0.03	0.03	0.00	-0.27	-0.22	-0.02
25	1	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.01
26	1	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.02	0.18	-0.07
27	1	-0.07	0.02	-0.03	0.03	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

73

74

75

		A	A	A
Frequencies	--	3206.4255	3213.2887	3227.0419
Red. masses	--	1.0880	1.0918	1.0933
Frc consts	--	6.5904	6.6417	6.7084
IR Inten	--	0.5346	2.6585	0.4443

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.03
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.92	-0.37
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
11	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	0.08	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.01
15	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	-0.05	0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
19	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.05	-0.02	0.02	-0.26	0.09	-0.12	-0.01	0.00	0.00
22	6	0.01	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
23	6	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.07	0.03	0.00	0.00	0.00
24	1	0.01	0.01	0.00	-0.21	-0.18	-0.01	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.06	0.63	-0.23	-0.01	0.03	-0.01	-0.01	0.08	-0.03
26	1	0.01	-0.10	0.04	-0.08	0.84	-0.31	0.00	0.01	0.00
27	1	0.63	-0.22	0.26	0.11	-0.04	0.05	-0.07	0.02	-0.03
28	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

76

77

78



**Table S37.** Cartesian coordinates of optimized structure for (15-C<sub>4</sub>)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	-2.627561	1.927016	-0.839252
2	6	0	-3.825552	-0.301519	-0.632094
3	6	0	-2.606808	0.588198	-0.441666
4	6	0	-3.891816	-1.413786	0.434009
5	1	0	-3.788941	-0.764747	-1.631173
6	1	0	-4.735234	0.309936	-0.609203
7	6	0	-1.507890	2.776915	-0.661222
8	1	0	-3.529268	2.331705	-1.292961
9	6	0	-0.332730	2.316717	-0.069632
10	6	0	-0.269849	0.941330	0.340801
11	6	0	0.840484	3.262388	0.157059
12	1	0	-1.573947	3.813119	-0.984473
13	6	0	-2.570294	-2.208071	0.443471
14	6	0	-1.357867	-1.305315	0.609984
15	1	0	-2.576622	-2.968076	1.233921
16	1	0	-2.480779	-2.752604	-0.511155
17	1	0	-4.729405	-2.088337	0.222593
18	1	0	-4.069659	-0.971938	1.423781
19	6	0	-1.414037	0.070483	0.159661
20	6	0	-0.192949	-1.789520	1.188917
21	6	0	0.923571	0.428221	0.967531
22	6	0	2.184662	2.525735	0.327735
23	1	0	0.645647	3.855364	1.064413
24	1	0	0.900351	3.980898	-0.669200
25	6	0	0.964029	-0.947510	1.353620
26	6	0	2.031952	1.391008	1.361435
27	1	0	2.958670	3.229937	0.652538
28	1	0	2.512461	2.108264	-0.637970
29	1	0	1.778921	-1.285987	1.995133
30	1	0	2.978521	0.860278	1.522056
31	1	0	1.758282	1.836365	2.331995
32	1	0	-0.152187	-2.810546	1.559032
33	47	0	2.042960	-1.239519	-0.720670

**Table S38.** Vibrational frequencies for (15-C<sub>4</sub>)

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	23.7677			44.1255			80.6895		
Red. masses	--	8.4899			7.8897			3.3788		
Frc consts	--	0.0028			0.0091			0.0130		
IR Inten	--	0.1482			0.3267			0.2131		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.10	0.09	0.11	-0.09	0.06	0.08	0.02	-0.03	-0.11
2	6	-0.02	0.04	0.02	-0.17	0.11	0.14	0.03	-0.04	-0.09
3	6	-0.05	0.07	0.04	-0.12	0.05	0.07	0.01	-0.02	-0.07
4	6	-0.04	-0.03	-0.04	-0.13	0.07	0.11	-0.06	0.11	0.07
5	1	-0.04	0.10	-0.01	-0.28	0.14	0.12	0.13	-0.18	-0.02
6	1	-0.04	0.00	0.08	-0.15	0.15	0.24	0.03	-0.04	-0.26
7	6	-0.13	0.12	0.12	-0.05	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.04
8	1	-0.13	0.08	0.15	-0.11	0.09	0.14	0.05	-0.05	-0.17
9	6	-0.10	0.13	0.07	-0.03	-0.04	-0.05	-0.03	0.01	0.03
10	6	-0.04	0.11	0.00	-0.07	-0.04	-0.05	-0.02	0.00	0.01
11	6	-0.13	0.15	0.08	0.01	-0.08	-0.11	-0.08	0.03	0.15
12	1	-0.17	0.13	0.17	-0.02	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.03
13	6	0.07	0.02	-0.12	-0.15	0.03	-0.02	-0.09	0.05	0.22
14	6	0.04	0.05	-0.09	-0.12	-0.01	-0.04	-0.04	0.02	0.07
15	1	0.11	-0.03	-0.17	-0.13	-0.02	-0.07	-0.14	0.20	0.36
16	1	0.07	0.08	-0.16	-0.23	0.08	-0.06	-0.11	-0.13	0.32
17	1	0.06	-0.05	-0.06	-0.17	0.10	0.14	-0.08	0.11	0.13
18	1	0.05	-0.09	-0.01	-0.04	0.04	0.14	-0.08	0.26	0.00
19	6	-0.02	0.08	-0.01	-0.10	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00
20	6	0.06	0.07	-0.12	-0.12	-0.05	-0.09	-0.03	0.01	0.03
21	6	-0.02	0.13	-0.04	-0.07	-0.08	-0.07	-0.01	-0.01	-0.02
22	6	-0.10	0.18	-0.02	-0.02	-0.12	-0.08	-0.05	0.07	0.10
23	1	-0.11	0.09	0.13	0.04	-0.02	-0.15	-0.12	-0.07	0.21
24	1	-0.19	0.21	0.13	0.04	-0.13	-0.16	-0.09	0.12	0.23
25	6	0.04	0.11	-0.10	-0.10	-0.08	-0.08	0.00	-0.02	-0.04
26	6	-0.02	0.13	-0.07	-0.07	-0.09	-0.05	-0.01	-0.02	0.01
27	1	-0.10	0.19	-0.03	0.01	-0.14	-0.09	-0.08	0.07	0.16
28	1	-0.14	0.24	-0.06	-0.02	-0.16	-0.06	-0.03	0.16	0.07
29	1	0.04	0.13	-0.08	-0.12	-0.10	-0.06	0.01	-0.03	-0.07
30	1	0.00	0.14	-0.15	-0.08	-0.10	0.00	0.00	-0.01	-0.05
31	1	0.04	0.08	-0.03	-0.10	-0.05	-0.07	0.01	-0.10	0.06
32	1	0.10	0.06	-0.15	-0.13	-0.06	-0.12	-0.04	0.02	0.06
33	47	0.06	-0.17	0.02	0.17	0.03	0.03	0.05	-0.02	-0.05
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	100.4571			135.4339			169.1023		
Red. masses	--	3.1439			2.4880			4.6534		
Frc consts	--	0.0187			0.0269			0.0784		
IR Inten	--	0.1374			0.3077			4.5631		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.03	-0.10	0.04	-0.03	-0.10	-0.04	0.02	0.10
2	6	-0.07	0.05	0.16	-0.05	0.04	0.08	0.04	-0.04	-0.04
3	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.02	0.04	-0.03	-0.10
4	6	0.04	0.02	0.14	0.01	0.00	0.04	0.05	0.12	0.14
5	1	-0.26	0.08	0.14	-0.18	0.08	0.05	0.07	-0.21	0.04
6	1	-0.03	0.10	0.33	-0.02	0.08	0.20	0.04	-0.04	-0.15
7	6	0.05	-0.04	-0.15	0.03	-0.03	-0.07	-0.05	0.03	0.13
8	1	0.04	-0.04	-0.12	0.05	-0.04	-0.13	-0.10	0.06	0.25
9	6	0.02	-0.01	-0.07	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.04
10	6	0.01	0.00	-0.03	0.01	-0.01	-0.01	0.07	-0.06	-0.18

11	6	-0.01	0.02	0.00	-0.06	0.01	0.18	-0.01	0.00	-0.01
12	1	0.07	-0.06	-0.22	0.04	-0.03	-0.08	-0.12	0.08	0.30
13	6	0.03	0.00	-0.06	0.01	-0.01	-0.08	-0.02	0.01	0.06
14	6	0.03	-0.01	-0.05	0.00	-0.01	-0.02	0.06	-0.05	-0.17
15	1	0.09	-0.09	-0.14	0.03	-0.09	-0.17	0.02	0.10	0.14
16	1	-0.06	0.11	-0.13	-0.01	0.10	-0.15	-0.19	-0.11	0.11
17	1	0.00	0.05	0.22	-0.01	0.02	0.07	-0.04	0.17	0.36
18	1	0.18	-0.01	0.18	0.09	-0.04	0.07	0.23	0.30	0.10
19	6	0.01	0.00	-0.03	0.01	-0.01	-0.02	0.08	-0.06	-0.20
20	6	0.04	-0.02	-0.07	-0.02	0.00	0.03	0.05	-0.05	-0.14
21	6	-0.01	0.02	0.03	0.02	-0.03	-0.05	0.05	-0.04	-0.13
22	6	-0.01	0.07	0.18	-0.03	0.02	-0.07	0.01	0.03	0.03
23	1	-0.13	0.05	-0.05	-0.04	-0.22	0.34	-0.05	-0.01	-0.01
24	1	0.06	-0.02	-0.03	-0.14	0.22	0.35	0.00	0.00	0.00
25	6	0.02	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.03	-0.04	-0.08
26	6	-0.08	0.05	0.15	0.11	-0.07	-0.15	0.00	-0.02	-0.03
27	1	-0.08	0.10	0.28	0.01	0.00	-0.10	-0.03	0.04	0.10
28	1	0.14	0.09	0.22	-0.15	0.13	-0.16	0.07	0.09	0.03
29	1	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.01
30	1	-0.08	0.08	0.23	0.12	-0.10	-0.34	0.01	0.01	-0.01
31	1	-0.20	0.02	0.13	0.27	-0.14	-0.07	-0.07	-0.08	-0.03
32	1	0.05	-0.03	-0.11	-0.03	0.00	0.05	0.02	-0.03	-0.08
33	47	-0.01	-0.02	-0.02	-0.01	0.02	0.03	-0.04	0.02	0.06
			7			8			9	
			A			A			A	
Frequencies	--	201.4802			234.3159			298.3481		
Red. masses	--	3.3563			3.1246			1.9277		
Frc consts	--	0.0803			0.1011			0.1011		
IR Inten	--	2.5612			0.4121			3.5611		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.02	0.09	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.03	0.01
2	6	-0.04	0.03	0.03	0.01	-0.01	-0.02	-0.03	0.04	0.05
3	6	-0.01	0.00	0.01	0.04	-0.03	-0.11	0.00	0.02	-0.02
4	6	-0.03	-0.07	-0.07	0.07	0.10	0.10	-0.01	-0.07	-0.05
5	1	-0.10	0.12	-0.02	-0.05	-0.12	0.03	-0.16	0.16	-0.01
6	1	-0.02	0.04	0.12	0.03	0.02	-0.03	-0.02	0.07	0.22
7	6	-0.01	0.00	0.04	-0.04	0.02	0.09	0.02	0.02	-0.02
8	1	-0.08	0.06	0.20	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.05	0.07
9	6	0.04	-0.04	-0.10	-0.03	0.01	0.06	0.02	0.01	-0.04
10	6	0.06	-0.05	-0.16	-0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.01	-0.09
11	6	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.02	0.01	-0.01	0.10
12	1	-0.05	0.03	0.14	-0.07	0.04	0.17	0.01	0.03	0.02
13	6	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.02	-0.10	0.02	-0.01	0.10
14	6	-0.03	0.02	0.06	0.02	-0.01	-0.02	0.03	0.01	-0.03
15	1	-0.01	-0.03	-0.04	0.05	-0.12	-0.23	0.01	0.15	0.26
16	1	0.09	0.03	-0.03	-0.07	0.19	-0.21	0.07	-0.22	0.23
17	1	0.02	-0.10	-0.19	-0.02	0.15	0.31	0.06	-0.11	-0.21
18	1	-0.14	-0.16	-0.05	0.30	0.20	0.10	-0.18	-0.16	-0.04
19	6	0.02	-0.02	-0.07	0.04	-0.03	-0.09	0.03	-0.01	-0.09
20	6	-0.08	0.06	0.22	-0.05	0.04	0.17	0.02	0.02	-0.01
21	6	0.06	-0.04	-0.13	-0.04	0.01	0.08	-0.01	0.02	0.00
22	6	0.03	0.12	0.13	-0.05	-0.08	-0.07	-0.02	-0.09	-0.06
23	1	-0.15	0.01	-0.05	0.07	-0.02	0.04	0.05	-0.20	0.23
24	1	0.04	0.01	-0.02	-0.04	-0.01	0.02	-0.02	0.15	0.24
25	6	-0.04	0.01	0.10	-0.06	0.04	0.17	0.01	0.03	0.01
26	6	0.02	-0.03	-0.03	-0.06	0.03	0.06	-0.07	0.04	0.06
27	1	-0.10	0.16	0.35	0.05	-0.12	-0.22	0.09	-0.13	-0.23
28	1	0.24	0.28	0.14	-0.19	-0.21	-0.06	-0.20	-0.21	-0.07
29	1	-0.05	0.06	0.13	-0.07	0.07	0.19	-0.01	0.05	0.05
30	1	0.04	0.00	-0.06	-0.07	0.05	0.15	-0.09	0.06	0.24
31	1	-0.04	-0.17	0.02	-0.10	0.14	-0.01	-0.19	0.16	-0.03
32	1	-0.15	0.12	0.37	-0.10	0.08	0.27	0.01	0.03	0.03
33	47	0.01	-0.01	-0.02	0.02	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00

		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies	--	325.2051			345.1788			373.4469		
Red. masses	--	3.3182			3.0107			3.5479		
Frc consts	--	0.2068			0.2113			0.2915		
IR Inten	--	1.8746			1.4800			3.0644		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.09	-0.07	-0.02	-0.05	0.04	0.17	0.02	0.01	-0.05
2	6	-0.05	0.15	0.01	0.09	0.02	-0.05	0.07	0.02	-0.01
3	6	0.09	-0.06	-0.03	0.00	0.05	0.15	0.02	0.04	0.05
4	6	-0.09	0.08	-0.09	-0.02	0.08	-0.01	0.08	0.03	0.00
5	1	-0.28	0.27	-0.06	0.37	-0.05	-0.01	0.16	0.00	0.00
6	1	0.07	0.31	0.22	0.04	-0.04	-0.32	0.04	-0.02	-0.08
7	6	0.02	-0.05	0.10	0.06	-0.06	-0.14	-0.02	0.04	0.02
8	1	0.09	-0.09	-0.06	-0.10	0.05	0.30	0.05	-0.04	-0.15
9	6	0.00	-0.06	0.10	0.04	-0.09	-0.15	-0.02	0.01	-0.01
10	6	0.05	-0.07	0.04	0.04	-0.05	-0.02	0.01	-0.02	-0.07
11	6	-0.08	0.04	-0.07	-0.08	-0.02	0.04	-0.04	0.00	0.02
12	1	0.01	-0.04	0.15	0.12	-0.08	-0.22	-0.02	0.05	0.05
13	6	-0.09	0.03	-0.01	-0.05	0.02	-0.05	0.08	0.07	-0.03
14	6	0.01	-0.08	0.03	0.01	-0.04	-0.01	0.01	0.06	0.17
15	1	-0.21	0.04	0.00	-0.07	-0.04	-0.11	0.05	-0.12	-0.22
16	1	-0.08	0.01	0.01	-0.09	0.08	-0.10	0.18	0.30	-0.16
17	1	-0.07	0.09	-0.18	-0.05	0.12	0.03	0.09	0.02	0.00
18	1	-0.16	0.02	-0.07	0.03	0.13	-0.02	0.08	0.03	0.00
19	6	0.06	-0.09	0.01	0.02	-0.02	0.05	-0.01	0.04	0.10
20	6	0.04	-0.07	0.01	0.01	-0.04	-0.02	0.02	-0.03	0.08
21	6	0.08	-0.03	0.03	0.02	-0.01	0.06	0.02	-0.11	-0.19
22	6	-0.07	0.11	-0.07	-0.07	0.04	-0.05	-0.08	-0.07	-0.01
23	1	-0.06	0.17	-0.15	-0.17	-0.26	0.18	-0.02	-0.05	0.05
24	1	-0.18	-0.08	-0.18	-0.13	0.18	0.21	-0.03	0.04	0.05
25	6	0.07	-0.06	0.00	-0.01	-0.01	0.08	0.08	-0.10	-0.16
26	6	-0.02	0.13	-0.01	-0.02	0.07	0.01	-0.17	-0.03	0.00
27	1	-0.08	0.13	-0.11	-0.05	0.05	-0.11	-0.03	-0.12	-0.04
28	1	-0.08	0.08	-0.06	-0.12	0.01	-0.06	-0.13	-0.11	-0.01
29	1	0.07	-0.09	-0.01	-0.03	-0.02	0.11	0.15	-0.05	-0.21
30	1	0.04	0.25	0.07	0.01	0.13	0.06	-0.15	0.09	0.27
31	1	-0.11	0.16	-0.06	-0.05	0.13	-0.02	-0.48	-0.02	-0.10
32	1	0.07	-0.07	0.02	0.03	-0.06	-0.05	-0.02	-0.03	0.06
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.02
		13			14			15		
		A			A			A		
Frequencies	--	400.5790			416.3083			454.9064		
Red. masses	--	2.9874			4.4228			3.3520		
Frc consts	--	0.2824			0.4516			0.4087		
IR Inten	--	0.3192			0.2193			1.0718		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	0.07	-0.01	0.12	0.08	-0.02	-0.03	-0.06	-0.04
2	6	0.04	0.12	0.00	0.15	-0.01	0.09	0.06	-0.06	0.08
3	6	0.03	0.07	-0.01	0.06	0.09	0.07	0.05	-0.02	0.04
4	6	0.14	0.06	-0.07	0.07	-0.08	0.04	-0.11	-0.07	0.04
5	1	-0.10	0.24	-0.06	0.25	-0.01	0.09	0.17	-0.14	0.11
6	1	0.04	0.12	0.20	0.09	-0.10	0.02	0.08	-0.03	-0.10
7	6	-0.05	0.03	-0.05	0.11	0.09	-0.02	-0.07	-0.02	-0.01
8	1	-0.09	0.03	0.04	0.16	0.07	-0.10	-0.05	-0.12	-0.05
9	6	-0.09	-0.03	-0.02	0.04	0.08	0.09	-0.01	0.07	-0.02
10	6	-0.03	-0.01	0.04	-0.01	0.02	0.01	0.15	0.05	-0.05
11	6	-0.12	-0.06	-0.07	0.00	0.16	-0.03	-0.04	0.09	-0.03
12	1	0.03	0.03	-0.07	0.16	0.07	-0.08	-0.14	-0.01	0.03
13	6	0.11	0.03	0.06	-0.02	-0.18	0.04	-0.02	0.12	-0.01
14	6	0.08	0.01	-0.02	-0.05	-0.09	-0.10	-0.02	0.12	-0.04
15	1	0.03	0.20	0.23	0.04	-0.03	0.19	0.13	0.04	-0.09
16	1	0.13	-0.19	0.19	-0.07	-0.35	0.13	-0.02	0.22	-0.07

17	1	0.14	0.06	-0.07	-0.01	0.04	-0.02	0.01	-0.14	-0.18
18	1	0.12	0.06	-0.07	0.11	-0.13	0.07	-0.31	-0.19	0.06
19	6	0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.12	0.09	-0.04
20	6	0.05	-0.03	0.01	-0.13	-0.09	0.01	-0.07	-0.01	-0.07
21	6	-0.04	-0.05	0.06	-0.06	-0.08	-0.04	0.09	-0.06	0.06
22	6	-0.14	-0.06	0.06	-0.07	0.08	-0.04	-0.12	-0.05	0.02
23	1	-0.17	0.09	-0.18	0.04	0.29	-0.11	-0.05	0.21	-0.10
24	1	-0.02	-0.18	-0.17	-0.03	0.04	-0.15	0.07	-0.01	-0.11
25	6	0.02	-0.04	0.07	-0.15	-0.07	0.06	-0.04	-0.09	0.04
26	6	0.02	-0.13	-0.01	-0.12	0.01	-0.09	0.08	-0.04	0.09
27	1	-0.17	-0.03	0.07	0.00	-0.02	0.03	0.00	-0.08	-0.18
28	1	-0.09	-0.02	0.05	-0.09	0.13	-0.07	-0.29	-0.17	0.01
29	1	0.03	-0.01	0.07	-0.19	-0.07	0.10	-0.10	-0.19	0.06
30	1	0.05	-0.16	-0.30	-0.08	0.09	-0.05	0.15	0.04	-0.06
31	1	0.25	-0.26	0.11	-0.18	0.00	-0.10	0.15	-0.10	0.13
32	1	0.00	-0.04	0.00	-0.17	-0.07	0.06	-0.18	-0.03	-0.11
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

16				17				18			
A				A				A			
Frequencies	--	465.2466		487.9605		510.9679					
Red. masses	--	4.0717		3.4088		4.9751					
Frc consts	--	0.5193		0.4782		0.7653					
IR Inten	--	2.6189		3.4130		0.7697					

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.10	0.10	-0.04	0.04	0.15	0.01	-0.10	0.08
2	6	0.08	0.06	0.03	-0.05	-0.04	-0.02	-0.18	-0.04	-0.10
3	6	0.15	-0.11	0.03	-0.02	-0.02	-0.06	-0.11	-0.10	0.03
4	6	-0.06	0.05	-0.03	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.05	-0.03
5	1	-0.01	0.10	0.01	-0.08	-0.06	-0.01	-0.20	-0.01	-0.10
6	1	0.18	0.20	0.07	-0.04	-0.03	-0.01	-0.16	-0.01	-0.05
7	6	-0.08	0.08	-0.09	0.10	-0.08	-0.13	0.05	-0.09	-0.01
8	1	-0.10	-0.23	0.23	-0.10	0.16	0.36	0.04	-0.04	0.09
9	6	-0.04	0.16	-0.08	0.01	0.01	0.11	0.10	0.10	0.02
10	6	-0.05	0.12	-0.03	-0.03	0.02	0.15	-0.02	0.04	-0.01
11	6	0.06	0.07	0.01	0.00	0.05	0.00	0.10	0.20	0.02
12	1	-0.24	0.05	-0.15	0.21	-0.15	-0.38	-0.06	-0.13	-0.12
13	6	-0.09	-0.04	-0.02	0.02	0.03	0.00	0.09	0.18	0.02
14	6	0.02	-0.13	0.07	0.01	0.03	-0.05	0.14	0.04	-0.02
15	1	-0.17	-0.12	-0.10	0.07	0.04	0.01	0.05	0.22	0.06
16	1	-0.10	0.05	-0.08	0.01	0.02	0.00	0.08	0.10	0.06
17	1	-0.09	0.11	-0.11	0.01	-0.06	0.04	0.10	-0.13	0.11
18	1	-0.08	0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.14	-0.08
19	6	0.11	-0.10	0.00	0.04	-0.02	-0.17	-0.01	0.02	0.03
20	6	0.04	-0.08	0.07	-0.07	0.07	0.13	0.10	-0.13	-0.03
21	6	-0.12	0.10	-0.01	0.01	-0.02	0.03	-0.10	-0.10	-0.02
22	6	0.00	-0.07	0.05	-0.03	0.01	-0.01	0.01	0.03	-0.01
23	1	0.06	0.06	0.02	0.04	0.17	-0.07	0.12	0.20	0.02
24	1	0.19	0.10	0.04	-0.03	-0.06	-0.09	0.11	0.19	0.01
25	6	-0.03	0.08	-0.11	0.09	-0.09	-0.18	-0.02	-0.05	0.19
26	6	-0.02	-0.09	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.15	-0.07	-0.12
27	1	0.07	-0.14	0.02	0.02	-0.03	-0.06	0.12	-0.15	0.14
28	1	-0.05	-0.10	0.04	-0.10	-0.03	-0.01	-0.01	0.12	-0.06
29	1	0.04	0.19	-0.14	0.16	-0.15	-0.31	-0.03	0.07	0.26
30	1	-0.07	-0.22	-0.16	0.01	0.03	0.00	-0.15	-0.05	-0.09
31	1	0.14	-0.15	0.08	-0.02	0.00	0.01	-0.16	-0.07	-0.12
32	1	0.17	-0.04	0.16	-0.19	0.14	0.34	0.03	-0.17	-0.14
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00

19				20				21			
A				A				A			
Frequencies	--	526.9213		556.7562		566.8653					
Red. masses	--	3.7770		2.5918		3.8226					
Frc consts	--	0.6179		0.4733		0.7237					
IR Inten	--	3.6354		1.2517		0.1317					



Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	-0.06	-0.05	0.11	0.07	0.00	-0.07	0.11	-0.06
2	6	0.01	0.04	0.02	-0.02	-0.03	0.01	-0.14	-0.02	-0.08
3	6	-0.06	0.04	0.21	-0.02	0.04	-0.01	-0.13	0.08	0.00
4	6	-0.06	0.05	-0.02	-0.11	-0.04	0.06	-0.02	-0.01	-0.01
5	1	0.28	0.02	0.03	0.16	-0.18	0.08	-0.07	-0.02	-0.08
6	1	-0.03	-0.02	-0.21	-0.06	-0.08	-0.22	-0.20	-0.12	-0.08
7	6	-0.04	-0.05	-0.05	0.13	0.04	0.04	-0.03	0.11	-0.05
8	1	0.05	-0.17	-0.29	0.15	0.16	0.01	-0.03	0.12	-0.12
9	6	-0.11	0.03	0.19	0.05	-0.05	0.03	0.00	0.10	-0.04
10	6	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.05	-0.06	0.06	0.00	-0.07
11	6	0.00	-0.06	0.03	-0.04	-0.02	-0.01	0.03	0.14	0.01
12	1	0.04	-0.12	-0.29	0.20	0.06	0.11	-0.02	0.12	-0.04
13	6	-0.04	0.02	-0.03	-0.02	0.02	0.01	-0.06	-0.15	-0.02
14	6	0.09	-0.06	-0.19	0.03	-0.01	0.04	0.01	-0.12	0.06
15	1	-0.02	0.13	0.07	0.02	-0.16	-0.17	-0.16	-0.15	-0.01
16	1	-0.17	-0.12	0.04	-0.06	0.24	-0.12	-0.05	-0.15	-0.02
17	1	-0.04	0.03	-0.07	-0.01	-0.10	-0.12	-0.13	0.05	0.22
18	1	-0.11	0.02	-0.02	-0.27	-0.13	0.07	0.19	0.12	-0.02
19	6	0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.04	-0.06	-0.06	-0.02	0.02
20	6	0.05	0.07	0.05	0.11	0.04	-0.01	0.08	-0.08	0.08
21	6	0.09	0.00	-0.18	-0.08	0.05	0.02	0.12	-0.04	0.01
22	6	0.03	-0.06	0.03	-0.11	-0.03	0.03	-0.04	-0.01	0.03
23	1	0.13	0.13	-0.07	-0.09	0.14	-0.12	0.02	0.23	-0.05
24	1	0.00	-0.21	-0.10	-0.02	-0.17	-0.14	0.16	0.06	-0.06
25	6	0.03	0.10	0.06	0.07	0.10	0.02	0.13	-0.08	0.03
26	6	0.01	-0.03	0.01	-0.06	-0.05	-0.03	0.11	0.02	0.10
27	1	0.01	-0.03	0.00	-0.05	-0.07	-0.03	0.13	-0.07	-0.25
28	1	0.03	-0.08	0.04	-0.19	-0.06	0.02	-0.29	-0.20	0.02
29	1	-0.02	0.20	0.16	0.08	0.19	0.05	0.14	-0.07	0.03
30	1	0.00	0.00	0.15	-0.06	-0.13	-0.29	0.17	0.08	0.00
31	1	-0.18	-0.05	-0.03	0.17	-0.16	0.08	0.13	-0.06	0.14
32	1	0.03	0.15	0.27	0.18	0.04	-0.01	0.11	-0.08	0.10
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

22

23

24

		A	A	A
Frequencies	--	590.6874	655.3860	671.6397
Red. masses	--	2.8152	3.5267	4.7208
Frc consts	--	0.5787	0.8925	1.2547
IR Inten	--	0.0526	5.6716	3.3014

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.08	-0.10	0.07	0.05	-0.06	-0.10	-0.06	-0.01	-0.01
2	6	-0.04	0.00	-0.05	-0.03	0.02	0.02	0.03	0.04	0.01
3	6	-0.02	-0.06	0.06	-0.09	0.03	0.18	-0.07	0.04	0.10
4	6	0.08	0.03	-0.05	0.01	0.03	-0.02	0.12	0.04	-0.04
5	1	-0.14	0.14	-0.11	0.22	0.01	0.03	0.19	0.10	-0.02
6	1	-0.02	0.03	0.13	-0.10	-0.08	-0.16	-0.05	-0.08	-0.03
7	6	0.07	-0.11	0.05	-0.03	0.00	0.12	-0.01	-0.08	-0.06
8	1	0.12	-0.05	0.03	0.15	-0.12	-0.35	-0.05	-0.01	-0.05
9	6	0.09	-0.03	-0.01	0.06	-0.02	-0.11	-0.08	0.01	0.20
10	6	0.05	-0.01	-0.06	0.00	-0.02	-0.05	0.02	-0.10	-0.23
11	6	-0.02	0.06	0.01	0.02	0.02	-0.03	0.03	0.02	0.05
12	1	0.00	-0.11	0.07	-0.13	0.04	0.27	0.06	-0.12	-0.20
13	6	0.01	-0.06	-0.02	0.03	0.05	-0.03	0.06	0.04	0.05
14	6	-0.07	0.04	0.00	0.07	-0.03	-0.13	-0.07	0.02	0.21
15	1	-0.04	0.09	0.12	0.04	0.17	0.09	-0.06	-0.13	-0.12
16	1	0.08	-0.21	0.08	-0.04	-0.11	0.06	0.25	0.26	-0.06
17	1	-0.04	0.10	0.24	0.05	-0.02	-0.01	0.14	0.02	-0.04
18	1	0.35	0.19	-0.07	0.00	0.00	-0.01	0.08	0.04	-0.05
19	6	-0.04	0.02	0.08	0.00	-0.01	-0.03	0.01	-0.10	-0.18
20	6	-0.06	0.12	-0.03	-0.05	0.00	0.13	-0.03	-0.11	-0.06
21	6	0.02	0.05	-0.06	-0.13	0.03	0.19	-0.09	0.06	0.08
22	6	-0.11	-0.04	0.04	0.02	0.03	-0.02	0.10	0.05	-0.02

23	1	-0.09	0.18	-0.09	-0.04	-0.13	0.05	0.18	0.25	-0.07
24	1	0.06	-0.06	-0.10	0.00	0.14	0.08	-0.07	-0.18	-0.13
25	6	-0.07	0.09	-0.08	0.06	-0.08	-0.14	-0.12	0.00	-0.04
26	6	0.02	-0.01	0.05	-0.02	0.02	0.00	0.06	0.07	0.04
27	1	0.06	-0.11	-0.22	0.01	0.02	0.04	0.13	0.06	-0.10
28	1	-0.36	-0.21	0.02	0.07	0.05	-0.01	0.03	0.01	-0.03
29	1	-0.10	0.06	-0.05	0.12	-0.10	-0.22	-0.12	-0.03	-0.05
30	1	0.04	-0.03	-0.14	-0.06	-0.09	-0.16	0.00	-0.07	-0.06
31	1	0.12	-0.15	0.14	0.22	0.06	0.06	0.24	0.12	0.06
32	1	-0.01	0.12	-0.04	-0.17	0.07	0.34	0.04	-0.14	-0.17
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

25				26				27		
A				A				A		
Frequencies	--	709.1775		757.5005		829.9074				
Red. masses	--	4.7353		2.7623		4.6969				
Frc consts	--	1.4031		0.9339		1.9060				
IR Inten	--	1.8129		9.0684		0.9872				

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.19	0.02	0.08	0.09	-0.03	0.05	-0.08	0.05	-0.10
2	6	-0.15	-0.08	-0.08	-0.06	-0.04	-0.05	-0.06	0.00	-0.02
3	6	0.00	-0.05	0.04	0.02	-0.02	0.09	-0.05	0.09	0.09
4	6	0.01	-0.04	0.02	-0.05	-0.05	-0.02	-0.02	-0.03	-0.03
5	1	-0.17	-0.08	-0.08	-0.10	0.09	-0.11	0.07	0.10	-0.06
6	1	-0.14	-0.07	-0.03	-0.03	0.01	0.07	-0.11	-0.07	-0.03
7	6	0.07	0.20	-0.02	0.00	0.11	-0.04	0.01	-0.14	0.12
8	1	0.22	-0.04	-0.03	0.10	-0.13	-0.06	0.04	0.15	-0.25
9	6	-0.05	0.03	0.00	-0.06	0.08	0.06	0.10	-0.01	-0.04
10	6	-0.04	0.07	0.00	0.09	0.02	-0.08	0.06	0.15	0.21
11	6	-0.09	-0.16	-0.03	-0.04	-0.08	-0.03	-0.02	-0.01	-0.07
12	1	0.09	0.16	-0.13	0.00	0.06	-0.20	0.13	-0.14	0.09
13	6	0.09	0.14	0.03	-0.04	-0.07	-0.03	-0.02	-0.06	0.02
14	6	0.07	-0.05	-0.04	-0.05	0.08	0.05	0.01	0.00	0.13
15	1	0.13	0.13	0.02	-0.04	0.00	0.04	-0.09	-0.11	-0.03
16	1	0.06	0.12	0.03	0.08	-0.12	0.02	0.13	0.02	-0.01
17	1	0.15	-0.25	0.15	-0.21	0.04	0.35	-0.13	0.03	0.21
18	1	-0.04	0.05	-0.02	0.29	0.17	-0.05	0.18	0.10	-0.04
19	6	0.03	-0.04	0.05	0.08	0.02	-0.05	0.19	0.02	-0.21
20	6	-0.06	-0.18	0.04	0.00	0.10	-0.03	0.05	-0.12	-0.01
21	6	0.03	0.04	-0.10	0.00	-0.02	0.11	0.05	0.04	-0.06
22	6	-0.03	0.02	-0.01	-0.04	-0.05	-0.03	-0.08	-0.05	-0.01
23	1	-0.09	-0.18	-0.02	0.09	-0.13	0.04	-0.04	-0.26	0.09
24	1	-0.11	-0.12	0.00	-0.06	0.00	0.04	-0.02	0.22	0.13
25	6	-0.19	-0.01	-0.06	0.09	-0.04	0.04	-0.14	0.11	-0.02
26	6	0.13	0.08	0.10	-0.05	-0.04	-0.06	-0.02	-0.05	-0.01
27	1	-0.16	0.23	-0.17	-0.27	0.04	0.32	-0.19	0.00	0.16
28	1	0.00	-0.07	0.04	0.31	0.19	-0.01	0.14	0.03	0.03
29	1	-0.19	0.04	-0.04	0.06	-0.11	0.04	-0.03	0.16	-0.14
30	1	0.15	0.12	0.08	-0.05	0.00	0.04	0.02	0.05	0.04
31	1	0.06	0.05	0.09	-0.05	0.10	-0.12	-0.12	-0.05	-0.03
32	1	-0.08	-0.14	0.16	-0.03	0.05	-0.17	0.20	-0.10	0.04
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

28				29				30		
A				A				A		
Frequencies	--	833.4092		856.4228		872.4654				
Red. masses	--	5.2006		1.3307		1.5985				
Frc consts	--	2.1282		0.5750		0.7169				
IR Inten	--	1.2011		3.0397		3.0606				

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.15	-0.11	0.02	-0.04	0.03	0.03	-0.01	0.02	-0.04
2	6	0.00	0.05	0.01	0.04	-0.03	-0.06	-0.01	-0.03	-0.05
3	6	-0.06	-0.04	0.12	0.01	0.01	0.01	0.01	0.02	0.06
4	6	0.08	0.04	-0.01	0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.00
5	1	0.20	0.05	0.02	-0.22	0.15	-0.15	-0.09	0.13	-0.12

6	1	-0.07	-0.05	-0.10	0.08	0.02	0.28	0.00	-0.01	0.13
7	6	-0.05	0.14	0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.01	0.03	-0.04
8	1	0.13	-0.23	-0.04	0.09	-0.07	-0.30	-0.07	0.00	0.07
9	6	-0.01	0.01	-0.13	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.04	-0.05
10	6	-0.20	-0.03	0.20	0.02	-0.02	-0.01	0.02	-0.02	0.03
11	6	0.03	0.06	-0.03	0.02	0.02	-0.04	-0.03	0.03	0.09
12	1	-0.22	0.12	0.00	0.13	-0.09	-0.27	-0.07	0.12	0.26
13	6	0.03	0.00	0.06	-0.01	0.00	0.08	0.01	0.02	0.05
14	6	-0.11	0.03	0.06	0.00	-0.03	-0.03	0.00	-0.03	-0.02
15	1	-0.01	-0.17	-0.11	0.07	-0.25	-0.16	0.06	-0.13	-0.09
16	1	0.10	0.22	-0.06	-0.10	0.29	-0.10	-0.04	0.18	-0.05
17	1	0.13	0.01	-0.12	0.04	-0.04	-0.01	0.03	-0.09	0.09
18	1	-0.05	-0.01	-0.01	-0.13	0.14	-0.08	-0.04	0.13	-0.07
19	6	-0.05	-0.17	-0.24	-0.01	0.00	0.02	0.03	-0.03	0.01
20	6	-0.01	0.14	-0.13	0.01	0.01	-0.05	0.00	0.02	-0.03
21	6	0.07	-0.09	-0.08	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.02	0.06
22	6	0.01	0.03	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.02	0.01
23	1	-0.10	-0.07	0.03	0.03	-0.13	0.06	-0.14	0.33	-0.14
24	1	0.08	0.16	0.06	-0.04	0.16	0.08	0.11	-0.27	-0.16
25	6	0.07	-0.05	0.11	0.02	-0.01	-0.02	-0.04	0.03	-0.02
26	6	0.04	0.01	0.04	-0.03	0.00	0.02	0.04	-0.06	-0.07
27	1	0.13	-0.01	-0.17	-0.01	-0.01	0.02	0.08	-0.11	0.06
28	1	-0.14	-0.12	0.03	0.06	-0.05	0.04	-0.14	0.20	-0.14
29	1	-0.04	-0.20	0.17	-0.16	0.07	0.24	-0.05	-0.04	-0.05
30	1	0.09	0.07	0.00	-0.01	-0.02	-0.12	-0.02	-0.02	0.35
31	1	-0.05	-0.12	0.07	0.08	-0.06	0.08	-0.22	0.20	-0.26
32	1	-0.13	0.15	-0.10	-0.12	0.15	0.35	0.00	0.09	0.16
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		31			32			33		
		A			A			A		
Frequencies	--	893.9416			899.9032			913.4705		
Red. masses	--	2.1761			1.2636			2.3868		
Frc consts	--	1.0246			0.6029			1.1734		
IR Inten	--	1.1088			70.3626			0.5275		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.03	0.02	0.02	-0.02	-0.04	-0.01	-0.02	-0.02
2	6	-0.07	0.10	-0.02	-0.01	0.00	0.03	0.01	-0.06	0.04
3	6	-0.03	-0.01	-0.05	-0.01	0.00	0.00	-0.06	-0.01	0.00
4	6	0.05	0.06	0.04	0.00	-0.01	-0.02	0.12	0.06	-0.03
5	1	0.13	-0.14	0.09	0.09	-0.01	0.04	-0.05	-0.05	0.03
6	1	-0.13	0.02	-0.31	-0.03	-0.03	-0.07	-0.07	-0.19	0.16
7	6	0.01	-0.04	0.00	0.02	-0.02	-0.04	0.01	0.00	-0.02
8	1	0.02	0.07	0.15	-0.11	0.10	0.33	-0.05	0.05	0.12
9	6	-0.01	0.06	0.03	0.00	0.01	0.02	0.03	0.06	0.01
10	6	0.05	0.01	-0.03	-0.01	0.02	0.01	0.03	0.02	0.00
11	6	-0.06	0.08	-0.07	0.00	-0.02	0.00	0.11	-0.08	0.04
12	1	-0.08	-0.04	0.02	-0.13	0.08	0.30	-0.10	0.04	0.11
13	6	0.06	-0.07	0.05	-0.01	0.00	-0.02	-0.06	0.04	0.02
14	6	-0.01	-0.06	-0.01	-0.01	0.02	0.04	-0.03	-0.05	-0.02
15	1	0.04	-0.19	-0.07	-0.07	0.04	0.02	-0.20	-0.02	-0.05
16	1	-0.02	0.06	-0.04	0.11	-0.06	0.02	-0.16	0.11	-0.03
17	1	0.19	-0.02	-0.27	-0.07	0.05	0.06	0.23	-0.01	-0.24
18	1	-0.22	-0.17	0.09	0.13	-0.01	0.00	-0.13	-0.03	-0.05
19	6	-0.05	-0.02	0.04	0.00	0.02	0.01	-0.02	-0.01	0.00
20	6	0.00	0.05	-0.02	0.02	-0.04	-0.07	-0.02	0.00	0.00
21	6	0.04	0.00	0.05	-0.01	0.00	-0.01	0.06	0.02	0.02
22	6	-0.04	-0.06	-0.06	0.00	0.00	-0.01	-0.15	-0.08	0.05
23	1	0.07	-0.09	0.08	0.05	0.00	0.00	0.20	-0.02	0.02
24	1	-0.11	0.24	0.07	-0.02	-0.03	-0.01	0.33	-0.11	0.03
25	6	-0.04	0.02	-0.03	0.04	-0.03	-0.04	0.00	0.01	0.01
26	6	0.06	-0.10	0.04	0.00	0.02	0.01	-0.02	0.12	-0.09
27	1	-0.23	0.02	0.25	-0.04	0.03	0.00	-0.28	-0.04	0.25
28	1	0.27	0.15	-0.03	0.04	-0.01	0.01	0.08	0.05	0.08

29	1	-0.10	-0.05	-0.01	-0.27	0.20	0.48	0.05	-0.11	-0.11
30	1	0.06	-0.02	0.29	-0.01	-0.01	-0.06	0.11	0.32	-0.25
31	1	-0.10	0.09	-0.08	0.05	0.01	0.03	0.06	0.10	-0.06
32	1	0.05	0.10	0.09	-0.20	0.15	0.49	0.03	-0.01	-0.01
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
		34			35			36		
		A			A			A		
Frequencies	--	919.9031			925.0680			939.2989		
Red. masses	--	1.8145			1.9496			3.0982		
Frc consts	--	0.9047			0.9830			1.6105		
IR Inten	--	0.5504			6.0516			9.9081		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.03	0.05	-0.03	-0.01	0.06	0.07	-0.06	0.05
2	6	0.00	-0.08	0.09	-0.04	0.12	-0.03	0.11	-0.02	0.01
3	6	-0.01	-0.02	-0.04	0.02	-0.01	-0.05	-0.09	-0.01	-0.01
4	6	0.08	0.03	-0.05	-0.05	0.00	0.05	0.02	0.03	-0.01
5	1	-0.02	-0.22	0.16	0.11	-0.11	0.08	-0.06	0.14	-0.06
6	1	-0.05	-0.16	0.07	-0.01	0.18	-0.33	0.09	-0.05	0.26
7	6	0.00	0.04	0.05	-0.04	0.00	0.05	0.04	-0.09	0.04
8	1	0.14	-0.05	-0.33	0.11	-0.15	-0.33	0.19	0.10	-0.02
9	6	0.01	-0.01	-0.03	0.02	0.00	-0.05	0.05	0.07	-0.02
10	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.09	0.15	-0.07
11	6	-0.04	0.04	0.00	0.05	-0.07	0.08	-0.07	-0.08	0.04
12	1	0.18	-0.08	-0.35	0.06	-0.13	-0.38	-0.14	-0.12	0.02
13	6	-0.08	0.09	-0.09	0.08	-0.09	0.00	-0.06	-0.08	0.05
14	6	-0.03	-0.01	0.05	0.00	0.03	0.03	0.04	0.06	-0.02
15	1	-0.32	0.28	0.11	0.14	-0.07	0.02	0.00	-0.23	-0.10
16	1	0.02	-0.16	0.07	0.16	-0.09	0.01	-0.17	0.12	-0.08
17	1	0.09	0.04	-0.13	-0.06	0.04	-0.03	-0.08	0.19	-0.17
18	1	0.09	-0.15	0.03	-0.01	-0.13	0.12	-0.11	0.10	-0.07
19	6	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.02	0.00	-0.08	0.14	-0.08
20	6	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03	-0.03	0.02	-0.08	0.04
21	6	0.00	0.01	0.03	0.00	0.01	0.02	-0.07	0.00	-0.03
22	6	0.01	-0.01	-0.01	-0.04	-0.01	0.05	0.00	0.01	-0.02
23	1	-0.14	0.07	-0.04	-0.07	0.13	-0.09	-0.14	0.09	-0.09
24	1	0.00	0.01	-0.02	0.27	-0.25	-0.06	0.01	-0.21	-0.07
25	6	0.02	0.02	-0.02	0.00	-0.03	-0.02	0.08	-0.05	0.05
26	6	0.04	-0.07	0.00	0.00	0.07	-0.08	0.11	-0.03	0.03
27	1	0.01	-0.04	0.04	0.00	-0.04	0.00	-0.13	0.20	-0.12
28	1	-0.04	0.12	-0.08	-0.17	0.07	-0.03	-0.06	0.13	-0.09
29	1	-0.10	0.11	0.18	-0.11	0.01	0.14	0.18	0.11	0.01
30	1	0.00	-0.06	0.26	0.03	0.14	-0.04	0.04	-0.06	0.33
31	1	-0.12	0.10	-0.12	-0.02	0.13	-0.11	-0.09	0.15	-0.10
32	1	0.02	0.06	0.17	-0.13	0.04	0.18	-0.11	-0.13	-0.08
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
		37			38			39		
		A			A			A		
Frequencies	--	976.1996			1008.4669			1025.6040		
Red. masses	--	1.3080			2.3335			1.3946		
Frc consts	--	0.7344			1.3982			0.8643		
IR Inten	--	23.9643			10.1537			0.1764		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.05	-0.03	-0.12
2	6	-0.02	0.00	-0.02	-0.11	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.01
3	6	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01
4	6	0.02	0.01	0.02	0.12	0.07	0.00	0.00	-0.01	-0.01
5	1	-0.02	0.01	-0.02	-0.04	-0.18	0.07	0.07	0.08	-0.02
6	1	-0.02	-0.01	0.00	-0.21	-0.16	-0.09	-0.03	-0.04	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01	-0.04	0.03	0.11
8	1	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	0.03	-0.22	0.18	0.62
9	6	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
10	6	0.01	0.01	0.03	0.11	0.07	0.02	0.01	0.00	-0.01
11	6	0.00	0.00	0.01	-0.05	-0.09	0.01	0.01	-0.01	-0.01

12	1	0.01	0.00	0.02	-0.03	0.03	0.01	0.22	-0.18	-0.60
13	6	0.01	0.00	0.01	-0.05	-0.08	0.03	0.00	0.01	0.02
14	6	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01
15	1	0.02	-0.02	0.00	-0.20	-0.17	-0.06	0.00	-0.03	-0.02
16	1	-0.09	0.02	-0.01	-0.17	0.04	-0.05	-0.01	0.05	-0.01
17	1	0.08	-0.06	-0.04	0.25	-0.01	-0.28	-0.01	-0.02	0.06
18	1	-0.08	0.00	0.00	-0.17	-0.12	0.02	0.03	0.06	-0.04
19	6	0.02	-0.01	-0.01	0.10	0.07	0.02	-0.01	0.00	0.01
20	6	-0.06	0.02	0.09	-0.01	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
21	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
22	6	0.00	0.00	0.00	0.11	0.09	0.01	0.00	0.01	0.02
23	1	-0.02	0.02	-0.01	-0.15	-0.02	-0.06	-0.09	-0.03	-0.01
24	1	0.01	-0.03	-0.01	-0.19	-0.15	-0.05	0.05	0.02	0.02
25	6	0.05	-0.03	-0.08	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00
26	6	0.00	0.00	-0.01	-0.11	-0.02	-0.03	0.01	-0.01	-0.02
27	1	0.01	-0.01	0.01	0.28	0.03	-0.27	0.04	-0.01	-0.04
28	1	-0.01	0.02	-0.01	-0.18	-0.15	0.01	-0.08	0.01	-0.01
29	1	-0.35	0.28	0.59	0.06	-0.09	-0.09	0.00	0.00	0.00
30	1	-0.02	-0.02	-0.01	-0.19	-0.19	-0.15	0.00	0.00	0.04
31	1	0.01	0.03	-0.01	-0.02	-0.21	0.09	-0.04	0.01	-0.03
32	1	0.15	-0.21	-0.57	-0.05	0.05	0.07	0.01	0.00	-0.01
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

40

41

42

		A	A	A
Frequencies	--	1066.8255	1076.6376	1096.3077
Red. masses	--	2.6048	2.1519	1.9007
Frc consts	--	1.7467	1.4696	1.3460
IR Inten	--	0.8838	1.5584	4.3966

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.07	0.00	-0.03	0.04	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.03
2	6	0.01	-0.07	0.06	0.01	-0.08	0.07	0.01	0.01	0.03
3	6	-0.03	-0.04	0.01	-0.06	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.03
4	6	-0.08	0.11	-0.06	-0.07	0.12	-0.07	-0.01	-0.03	-0.03
5	1	-0.10	-0.13	0.09	-0.12	-0.15	0.10	0.11	0.05	0.02
6	1	0.02	-0.06	0.10	-0.02	-0.14	0.15	-0.03	-0.04	-0.03
7	6	0.02	0.06	-0.01	0.01	0.05	-0.01	0.01	-0.03	-0.03
8	1	-0.11	-0.07	-0.02	0.03	0.02	0.04	0.08	0.05	-0.07
9	6	0.05	0.02	0.01	-0.04	-0.04	0.00	-0.04	0.03	0.07
10	6	0.01	-0.02	0.01	0.02	-0.03	0.02	0.01	0.00	-0.03
11	6	0.11	-0.08	0.02	-0.07	0.06	-0.01	0.03	-0.04	-0.12
12	1	0.08	0.08	0.02	0.06	0.05	-0.01	-0.11	0.01	0.14
13	6	0.07	-0.05	0.00	0.08	-0.07	0.01	-0.01	0.02	0.03
14	6	0.06	0.00	0.01	0.05	0.04	0.00	0.01	-0.02	-0.02
15	1	0.07	-0.06	-0.01	0.16	-0.11	-0.02	-0.04	-0.04	-0.03
16	1	0.18	-0.02	-0.01	0.19	-0.01	-0.02	0.07	0.09	0.00
17	1	-0.20	0.29	-0.16	-0.26	0.41	-0.25	-0.07	0.01	0.09
18	1	-0.08	0.14	-0.08	-0.11	0.16	-0.09	0.11	0.04	-0.04
19	6	0.01	-0.03	0.01	-0.01	0.03	-0.01	-0.02	0.00	0.00
20	6	0.05	0.09	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.01
21	6	-0.04	-0.07	0.02	0.05	0.02	0.01	-0.02	0.01	0.08
22	6	-0.08	0.14	-0.07	0.06	-0.09	0.05	-0.01	0.05	0.13
23	1	0.20	-0.03	0.00	-0.15	0.02	0.00	-0.19	-0.34	0.05
24	1	0.15	-0.09	0.01	-0.18	0.06	-0.02	0.11	0.25	0.15
25	6	-0.09	-0.01	-0.04	-0.04	0.00	-0.03	-0.01	0.01	-0.02
26	6	0.00	-0.08	0.06	-0.01	0.07	-0.05	0.06	-0.03	-0.12
27	1	-0.21	0.36	-0.24	0.22	-0.34	0.22	0.22	-0.04	-0.22
28	1	-0.14	0.17	-0.11	0.10	-0.14	0.09	-0.32	-0.21	0.13
29	1	-0.21	-0.12	0.04	-0.09	-0.02	0.02	-0.07	-0.01	0.05
30	1	0.01	-0.05	0.11	0.03	0.11	-0.14	0.13	0.22	0.19
31	1	-0.13	-0.18	0.08	0.10	0.12	-0.05	-0.37	-0.15	-0.17
32	1	0.22	0.10	-0.02	-0.01	-0.04	-0.02	0.08	-0.01	-0.02
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

43

44

45

		A			A			A		
Frequencies		1103.6532			1140.5993			1158.6105		
Red. masses		1.9515			1.7114			3.1155		
Frc consts		1.4005			1.3118			2.4641		
IR Inten		3.1452			3.4454			6.1627		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.04	-0.04	-0.01	-0.01	0.08	-0.07	0.06
2	6	-0.04	0.04	0.12	-0.06	-0.01	0.02	0.04	0.06	-0.02
3	6	0.03	-0.01	-0.09	0.05	-0.02	0.01	-0.09	0.00	-0.05
4	6	0.01	-0.07	-0.13	0.02	0.03	-0.04	0.04	-0.07	0.04
5	1	0.39	0.07	0.11	0.03	-0.08	0.06	0.14	0.20	-0.09
6	1	-0.20	-0.19	-0.18	-0.12	-0.09	-0.05	-0.06	-0.10	0.03
7	6	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.04	-0.01	-0.06	0.09	-0.04
8	1	0.07	-0.04	-0.13	-0.15	-0.24	0.01	0.02	-0.23	0.05
9	6	0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.06	0.02	-0.03	-0.10	-0.01
10	6	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.05	0.01	0.07	-0.11	0.06
11	6	-0.02	0.00	0.04	0.05	0.03	-0.03	0.08	0.00	0.03
12	1	-0.06	-0.02	-0.04	0.24	0.08	0.09	-0.31	0.04	-0.16
13	6	-0.04	0.04	0.12	0.01	-0.04	0.04	-0.07	0.00	-0.01
14	6	0.04	-0.03	-0.08	-0.03	0.05	-0.03	0.03	0.10	0.00
15	1	-0.18	-0.23	-0.15	0.08	-0.11	-0.03	0.11	0.02	0.02
16	1	0.21	0.34	-0.04	0.05	0.07	-0.02	-0.25	-0.02	-0.01
17	1	-0.16	0.03	0.26	-0.02	0.09	-0.06	-0.06	0.08	-0.04
18	1	0.34	0.13	-0.15	-0.01	0.05	-0.05	0.04	-0.06	0.03
19	6	-0.01	0.01	0.03	0.03	0.00	0.02	-0.08	0.12	-0.07
20	6	-0.01	0.03	0.02	-0.08	-0.08	-0.02	0.04	-0.10	0.05
21	6	0.02	-0.01	-0.02	-0.02	0.05	-0.02	0.09	-0.04	0.08
22	6	0.02	-0.01	-0.04	-0.05	0.01	0.00	-0.03	0.07	-0.05
23	1	0.03	0.11	-0.02	0.06	-0.06	0.04	0.22	0.05	0.02
24	1	-0.05	-0.10	-0.05	0.14	0.11	0.05	-0.14	-0.06	-0.04
25	6	-0.01	-0.01	0.00	0.08	0.05	0.03	-0.07	0.09	-0.07
26	6	-0.03	0.01	0.03	0.04	-0.03	0.01	-0.05	-0.06	0.03
27	1	-0.04	0.00	0.06	-0.08	0.05	-0.01	0.08	-0.11	0.08
28	1	0.09	0.05	-0.03	-0.06	0.09	-0.03	-0.01	0.07	-0.05
29	1	-0.04	-0.08	0.00	0.35	0.46	-0.08	0.02	0.38	-0.04
30	1	-0.06	-0.07	-0.09	-0.01	-0.07	0.13	0.10	0.18	-0.08
31	1	0.11	0.03	0.06	-0.05	0.01	-0.03	-0.11	-0.21	0.08
32	1	0.06	-0.02	-0.11	-0.50	-0.13	-0.09	0.26	-0.07	0.11
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		A			A			A		
Frequencies		1169.9773			1180.5287			1185.1024		
Red. masses		2.2804			1.2601			1.2407		
Frc consts		1.8392			1.0347			1.0267		
IR Inten		13.6306			1.6436			0.1048		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	0.03	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01
2	6	0.04	-0.01	0.03	0.01	-0.01	0.01	0.04	0.00	-0.05
3	6	-0.05	0.02	-0.03	0.00	-0.01	0.01	-0.04	-0.01	0.05
4	6	-0.05	0.02	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01
5	1	0.03	0.06	-0.01	-0.04	-0.05	0.02	-0.31	-0.28	0.07
6	1	-0.01	-0.09	0.08	0.07	0.09	-0.02	0.26	0.33	-0.06
7	6	-0.04	-0.04	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.02	-0.01
8	1	0.22	0.34	-0.03	-0.01	0.03	-0.01	-0.01	0.05	0.05
9	6	-0.01	0.05	-0.01	0.05	0.00	-0.04	0.00	-0.01	0.01
10	6	0.08	0.01	0.03	0.00	0.03	-0.01	0.02	0.00	0.01
11	6	0.01	-0.04	0.00	-0.04	0.01	0.05	0.01	-0.01	-0.01
12	1	-0.39	-0.10	-0.10	0.01	-0.01	-0.06	-0.02	0.02	0.01
13	6	0.09	0.05	-0.02	0.03	0.01	0.01	-0.02	0.02	0.05
14	6	-0.11	-0.08	0.00	-0.03	-0.04	-0.01	0.02	-0.02	-0.05
15	1	0.37	0.11	0.04	-0.01	0.00	-0.01	-0.33	-0.09	-0.06
16	1	0.14	-0.03	0.04	0.12	0.02	0.01	0.44	0.15	0.02
17	1	-0.10	0.10	-0.02	0.00	-0.02	0.02	-0.06	0.08	-0.04

18	1	-0.06	0.14	-0.06	0.02	0.00	0.00	0.24	-0.35	0.20
19	6	-0.04	-0.07	0.01	-0.01	-0.02	0.00	-0.03	0.02	-0.02
20	6	-0.07	-0.07	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.01
21	6	0.12	0.10	0.02	0.00	0.02	0.05	0.04	0.01	0.01
22	6	0.01	0.04	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01
23	1	-0.06	-0.02	-0.03	0.36	0.17	0.03	-0.07	-0.04	-0.01
24	1	0.13	-0.03	0.02	-0.37	-0.14	-0.10	0.00	0.01	0.01
25	6	0.07	0.04	0.03	0.03	0.02	0.00	0.00	0.02	0.00
26	6	-0.09	-0.05	0.00	0.02	-0.02	-0.04	-0.02	-0.01	0.01
27	1	-0.02	0.08	-0.07	-0.06	0.10	-0.07	0.04	-0.06	0.04
28	1	-0.10	0.11	-0.09	0.24	-0.34	0.21	-0.07	0.09	-0.06
29	1	0.10	0.00	0.00	0.06	0.09	0.01	0.02	0.02	-0.02
30	1	-0.27	-0.37	0.00	0.16	0.26	-0.01	-0.04	-0.06	-0.01
31	1	0.02	-0.09	0.05	-0.32	-0.39	0.04	0.04	0.03	0.01
32	1	-0.09	-0.07	0.02	-0.09	-0.02	-0.02	-0.04	-0.04	-0.06
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

49

50

51

		A			A			A		
Frequencies	--	1200.2967			1217.8094			1236.8329		
Red. masses	--	2.2083			1.4436			1.3933		
Frc consts	--	1.8745			1.2614			1.2557		
IR Inten	--	2.0165			6.2791			2.5280		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.12	0.06	0.02	-0.02	-0.04	0.00	-0.02	0.00	-0.01
2	6	-0.05	-0.05	-0.03	0.02	0.04	-0.05	-0.01	0.03	-0.05
3	6	0.09	0.12	0.02	-0.04	0.01	-0.01	0.03	0.03	0.01
4	6	0.00	0.02	-0.01	0.03	-0.05	0.03	0.02	-0.03	0.01
5	1	-0.21	-0.24	0.06	-0.04	0.00	-0.04	-0.07	-0.07	-0.01
6	1	-0.14	-0.17	0.08	-0.12	-0.17	0.07	-0.20	-0.26	0.10
7	6	-0.09	-0.10	0.00	0.04	0.02	0.01	0.01	-0.01	0.00
8	1	0.28	0.38	0.02	-0.08	-0.15	0.03	-0.07	-0.08	0.01
9	6	-0.12	-0.05	-0.05	-0.01	0.02	-0.02	0.05	0.05	0.01
10	6	-0.04	-0.07	0.01	0.03	-0.04	0.02	-0.01	0.04	-0.02
11	6	0.04	0.04	0.03	-0.05	0.03	0.01	0.01	-0.04	-0.01
12	1	-0.41	-0.18	-0.12	0.18	0.04	0.04	-0.10	-0.03	-0.02
13	6	-0.02	-0.02	0.01	-0.06	0.03	0.01	-0.03	0.05	0.01
14	6	0.04	0.03	-0.01	0.01	0.04	-0.02	-0.05	-0.03	-0.01
15	1	-0.10	-0.04	-0.01	0.22	0.02	0.01	0.39	0.06	0.02
16	1	0.11	0.02	0.00	0.02	0.05	0.01	0.10	0.05	0.03
17	1	-0.06	0.11	-0.08	-0.21	0.31	-0.17	-0.22	0.33	-0.18
18	1	0.02	-0.09	0.04	0.15	-0.22	0.12	0.13	-0.18	0.10
19	6	0.08	0.01	0.03	0.02	-0.03	0.02	0.03	-0.06	0.03
20	6	0.01	0.03	0.00	0.03	-0.01	0.02	0.00	0.02	-0.01
21	6	-0.06	-0.04	0.00	0.00	0.05	-0.01	-0.05	-0.05	-0.01
22	6	-0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.03	0.00	0.01	-0.01
23	1	0.24	0.09	0.04	0.10	0.06	0.02	-0.13	-0.05	-0.03
24	1	0.27	0.03	0.03	0.23	0.04	0.03	-0.26	-0.05	-0.03
25	6	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.01
26	6	0.03	0.02	0.00	0.01	0.03	-0.06	0.01	-0.01	0.04
27	1	-0.10	0.15	-0.08	-0.21	0.32	-0.21	0.15	-0.22	0.14
28	1	0.08	-0.05	0.05	0.13	-0.22	0.15	-0.08	0.12	-0.09
29	1	0.03	0.11	-0.01	-0.10	-0.19	0.04	0.11	0.18	-0.02
30	1	0.07	0.08	0.01	-0.19	-0.28	0.08	0.19	0.28	-0.06
31	1	-0.05	-0.06	0.01	-0.06	-0.05	-0.04	0.04	0.07	0.01
32	1	-0.07	0.01	-0.04	0.09	-0.02	0.01	0.14	0.04	0.02
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

52

53

54

		A			A			A		
Frequencies	--	1251.6200			1271.7316			1279.1810		
Red. masses	--	1.8141			1.8165			1.3936		
Frc consts	--	1.6744			1.7310			1.3435		
IR Inten	--	6.4682			12.6164			9.8010		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
------	----	---	---	---	---	---	---	---	---	---

1	6	0.01	0.01	0.00	-0.05	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00
2	6	-0.01	0.01	-0.02	0.03	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.02
3	6	0.02	-0.01	0.01	-0.09	-0.10	-0.01	-0.03	-0.06	0.02
4	6	0.01	-0.02	0.02	0.02	-0.03	0.02	0.03	-0.01	-0.04
5	1	0.03	0.05	-0.04	0.12	0.19	-0.08	-0.04	-0.12	0.08
6	1	-0.10	-0.13	0.04	0.07	0.09	-0.05	0.13	0.21	-0.13
7	6	-0.01	-0.03	0.01	0.01	0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.00
8	1	0.04	0.07	0.00	0.21	0.54	-0.09	0.14	0.25	-0.02
9	6	-0.06	-0.06	-0.02	0.01	0.04	-0.01	-0.10	-0.02	-0.02
10	6	-0.09	0.07	-0.05	0.06	-0.03	0.03	0.00	0.05	-0.02
11	6	0.07	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.02
12	1	0.23	0.00	0.08	-0.08	0.03	-0.04	0.45	0.06	0.16
13	6	-0.03	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.02
14	6	0.07	0.03	0.02	0.09	0.06	0.03	-0.06	-0.01	0.00
15	1	0.00	0.01	0.01	-0.08	0.00	0.01	0.33	0.00	0.00
16	1	-0.10	-0.01	-0.01	-0.21	0.01	-0.02	-0.17	0.03	0.00
17	1	-0.09	0.14	-0.08	-0.07	0.11	-0.06	-0.01	0.04	-0.01
18	1	0.02	-0.07	0.04	0.05	-0.06	0.03	0.09	0.01	-0.05
19	6	0.02	-0.02	0.01	0.05	-0.12	0.05	0.02	0.03	0.00
20	6	0.00	-0.01	0.01	0.02	0.05	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
21	6	0.07	0.14	0.00	-0.03	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.02
22	6	-0.05	0.05	-0.03	0.02	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.05
23	1	0.23	-0.02	0.04	-0.09	0.00	-0.02	-0.12	0.03	-0.02
24	1	-0.21	-0.02	-0.04	0.00	-0.02	0.00	0.39	0.01	0.04
25	6	0.03	-0.01	0.01	-0.05	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.01
26	6	-0.01	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.02
27	1	0.15	-0.29	0.20	0.03	-0.02	0.01	0.02	-0.01	0.01
28	1	-0.11	0.16	-0.09	0.01	0.01	-0.02	0.08	0.06	-0.06
29	1	-0.24	-0.55	0.08	0.07	0.24	-0.05	0.05	0.07	0.01
30	1	0.02	0.02	0.03	0.07	0.11	-0.04	0.12	0.20	-0.10
31	1	-0.11	-0.17	0.06	-0.01	-0.01	0.01	-0.09	-0.21	0.10
32	1	-0.25	-0.05	-0.07	-0.54	-0.02	-0.17	0.28	0.03	0.09
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

55				56			57			
A				A			A			
Frequencies	--	1290.1023		1307.6995		1345.3922				
Red. masses	--	1.2457		1.3307		1.6880				
Frc consts	--	1.2215		1.3407		1.8002				
IR Inten	--	0.7748		13.7483		7.1733				
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.05	0.00	-0.02
2	6	0.02	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.01	-0.05	-0.05	0.01
3	6	0.00	0.02	-0.03	-0.03	-0.06	-0.02	0.02	-0.07	0.01
4	6	-0.03	0.02	0.07	0.00	0.03	0.05	0.04	0.04	0.03
5	1	0.14	0.28	-0.15	0.19	0.32	-0.15	0.20	0.30	-0.14
6	1	-0.15	-0.26	0.16	-0.03	-0.07	0.04	0.07	0.14	-0.08
7	6	0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.05	-0.01
8	1	-0.06	-0.16	0.02	0.13	0.22	-0.03	0.09	0.28	-0.06
9	6	-0.03	0.02	0.01	-0.06	-0.03	-0.04	0.05	-0.04	0.04
10	6	0.01	0.02	-0.01	0.02	0.03	0.00	-0.05	-0.06	-0.01
11	6	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.05	0.03	0.00
12	1	0.16	0.01	0.07	0.28	0.05	0.08	-0.30	0.01	-0.11
13	6	0.02	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.06	-0.02	0.00
14	6	0.02	-0.02	-0.01	-0.04	-0.03	-0.03	-0.02	0.03	-0.03
15	1	-0.33	0.02	0.00	-0.09	0.01	0.00	0.14	-0.02	0.01
16	1	0.37	-0.03	0.03	0.37	-0.01	0.03	0.31	0.02	0.01
17	1	0.01	-0.01	-0.02	0.03	0.02	-0.05	0.06	0.05	-0.09
18	1	-0.13	-0.03	0.09	-0.09	-0.04	0.07	-0.08	-0.06	0.05
19	6	-0.02	-0.01	0.00	0.03	0.02	0.01	0.07	0.05	0.01
20	6	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.01	-0.03	-0.03	0.00
21	6	0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.04	-0.01	-0.04	0.03	-0.02
22	6	0.04	-0.02	-0.06	-0.02	0.04	0.05	-0.03	-0.05	-0.02
23	1	-0.30	0.01	-0.05	0.46	0.02	0.07	-0.34	-0.04	-0.04



24	1	0.33	0.00	0.04	-0.12	0.01	-0.02	-0.15	0.01	-0.03
25	6	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.04	0.01	0.01
26	6	-0.02	0.00	0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.05	0.05	0.00
27	1	-0.01	0.01	0.01	0.06	-0.02	-0.02	-0.09	0.00	0.03
28	1	0.11	0.05	-0.07	-0.12	-0.05	0.06	0.08	0.05	-0.03
29	1	0.02	0.05	-0.01	0.09	0.14	-0.02	-0.06	-0.20	0.04
30	1	0.10	0.19	-0.10	-0.04	-0.08	0.04	-0.05	-0.11	0.06
31	1	-0.13	-0.27	0.11	0.18	0.33	-0.12	-0.15	-0.25	0.08
32	1	-0.12	-0.01	-0.05	0.19	0.04	0.04	0.29	0.01	0.09
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

58

59

60

Frequencies	--	1351.8462	1366.9634	1385.5673
Red. masses	--	1.7159	1.4281	2.2307
Frc consts	--	1.8475	1.5723	2.5232
IR Inten	--	18.8427	1.2005	16.9838

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	-0.06	0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.04	0.08	-0.01
2	6	0.04	0.04	0.01	0.03	0.06	0.00	-0.01	0.05	-0.01
3	6	-0.06	0.06	-0.03	-0.02	0.01	0.00	0.04	-0.07	0.04
4	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	0.02	0.07	-0.09	0.05
5	1	-0.11	-0.20	0.12	-0.10	-0.24	0.14	-0.05	-0.19	0.10
6	1	0.01	0.00	0.03	-0.03	-0.03	0.02	-0.03	0.02	-0.04
7	6	0.06	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	-0.10	-0.01	-0.03
8	1	0.01	-0.01	0.00	0.02	0.05	0.00	-0.01	-0.02	0.01
9	6	-0.03	0.07	-0.04	-0.02	0.01	0.00	0.03	-0.08	0.03
10	6	0.03	-0.07	0.03	-0.02	0.00	-0.01	0.06	0.11	-0.01
11	6	-0.06	-0.03	-0.03	0.04	0.00	0.03	0.03	0.03	-0.01
12	1	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.11	0.02	0.03
13	6	-0.04	-0.02	-0.01	-0.09	-0.02	-0.03	-0.06	0.02	-0.04
14	6	-0.03	0.04	-0.03	0.01	0.04	-0.02	0.05	-0.01	0.01
15	1	0.03	-0.03	-0.01	0.16	0.00	-0.01	0.05	0.05	0.00
16	1	0.28	-0.02	0.01	0.40	-0.04	0.02	0.26	-0.05	0.03
17	1	0.15	-0.23	0.13	0.12	-0.15	0.08	-0.10	0.18	-0.12
18	1	-0.15	0.23	-0.13	-0.24	0.34	-0.19	-0.28	0.42	-0.24
19	6	0.05	-0.03	0.03	0.02	-0.03	0.02	-0.10	-0.03	-0.03
20	6	0.03	-0.01	0.02	0.02	-0.01	0.01	0.02	0.02	0.00
21	6	-0.05	0.04	-0.02	0.02	0.03	-0.01	0.00	-0.05	0.02
22	6	0.02	-0.03	0.02	-0.03	0.06	-0.04	0.03	-0.09	0.05
23	1	0.35	-0.01	0.04	-0.28	0.02	-0.05	0.03	-0.04	0.03
24	1	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.20	0.03	-0.04
25	6	-0.01	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01
26	6	0.04	0.06	0.01	-0.03	-0.08	0.01	0.00	0.07	-0.02
27	1	0.12	-0.20	0.14	0.01	0.01	-0.02	-0.20	0.24	-0.13
28	1	-0.23	0.35	-0.23	0.22	-0.34	0.22	-0.18	0.28	-0.17
29	1	0.02	0.02	0.01	-0.03	-0.05	0.00	0.02	0.09	-0.02
30	1	-0.02	-0.03	0.06	0.10	0.13	-0.05	-0.10	-0.11	0.01
31	1	-0.16	-0.34	0.14	0.10	0.28	-0.13	-0.05	-0.17	0.08
32	1	0.08	-0.01	0.02	-0.02	-0.02	-0.01	-0.07	0.01	-0.04
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

61

62

63

Frequencies	--	1392.2650	1396.5126	1402.4757
Red. masses	--	1.8471	2.5670	1.4184
Frc consts	--	2.1096	2.9496	1.6437
IR Inten	--	8.2038	32.5870	0.1645

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.03	0.01	0.05	0.06	0.00	0.00	-0.02	0.01
2	6	0.06	0.07	-0.02	-0.03	-0.08	0.02	0.05	0.04	-0.01
3	6	-0.05	-0.01	-0.01	0.05	0.02	0.00	-0.02	-0.01	-0.01
4	6	-0.04	-0.03	0.00	-0.01	0.11	-0.05	-0.06	0.07	-0.04
5	1	-0.12	-0.18	0.09	0.10	0.18	-0.09	-0.05	-0.07	0.03
6	1	-0.15	-0.25	0.13	0.10	0.11	-0.02	-0.13	-0.25	0.15

7	6	-0.02	0.01	-0.01	-0.05	-0.04	-0.01	-0.01	0.01	-0.01
8	1	0.07	0.10	0.01	-0.06	-0.17	0.02	0.07	0.10	-0.01
9	6	-0.05	-0.04	0.00	-0.01	-0.03	0.00	-0.02	-0.02	-0.01
10	6	0.05	0.03	0.01	0.12	0.08	0.03	0.00	0.00	0.00
11	6	0.11	0.02	0.03	0.02	-0.01	0.01	0.07	0.03	0.00
12	1	0.11	0.04	0.04	0.06	-0.02	0.03	0.09	0.03	0.03
13	6	0.09	0.02	0.00	-0.10	-0.03	0.01	-0.02	-0.02	0.01
14	6	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.07	-0.02	0.00	0.01	0.00
15	1	-0.30	0.00	-0.02	0.45	-0.03	0.02	0.16	-0.04	0.00
16	1	-0.20	-0.01	0.00	0.16	0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.00
17	1	-0.05	-0.04	0.06	0.25	-0.26	0.11	0.20	-0.32	0.20
18	1	0.05	0.04	-0.01	0.15	-0.33	0.17	0.17	-0.25	0.14
19	6	0.03	0.01	0.00	-0.13	-0.11	-0.02	0.01	0.00	0.00
20	6	0.00	0.03	-0.01	0.10	0.02	0.03	0.00	-0.01	0.00
21	6	-0.05	0.00	-0.02	-0.03	0.05	-0.02	0.00	0.01	0.00
22	6	-0.09	0.02	-0.04	-0.05	0.04	-0.03	0.04	-0.08	0.05
23	1	-0.33	-0.03	-0.04	-0.03	0.00	0.00	-0.14	-0.02	-0.01
24	1	-0.25	-0.05	-0.05	0.04	-0.03	0.00	-0.33	0.01	-0.06
25	6	-0.01	-0.06	0.02	-0.07	-0.11	0.00	0.00	0.01	0.00
26	6	0.08	0.07	-0.02	0.03	0.03	-0.01	-0.04	-0.02	0.00
27	1	0.03	-0.19	0.13	0.10	-0.20	0.13	-0.24	0.36	-0.21
28	1	0.20	-0.16	0.14	0.10	-0.13	0.10	-0.13	0.20	-0.13
29	1	0.10	0.14	-0.01	0.07	0.20	-0.01	-0.03	-0.06	0.01
30	1	-0.19	-0.35	0.17	-0.09	-0.15	0.10	0.09	0.18	-0.11
31	1	-0.10	-0.16	0.05	-0.06	-0.09	0.02	0.02	0.06	-0.03
32	1	0.11	0.05	0.03	-0.07	0.00	-0.03	-0.04	-0.02	-0.01
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

64

65

66

		A			A			A		
Frequencies		--	1415.9212		1437.9556		1439.4677			
Red. masses		--	2.1126		2.6638		2.4248			
Frc consts		--	2.4954		3.2452		2.9602			
IR Inten		--	19.7215		53.7431		32.3750			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	-0.01	0.01	0.00	-0.04	0.01	-0.05	0.03	-0.03
2	6	-0.04	-0.07	0.03	-0.04	-0.06	0.02	0.00	0.04	-0.03
3	6	-0.02	0.09	-0.03	0.04	0.09	-0.01	0.12	-0.08	0.07
4	6	0.03	-0.04	0.03	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
5	1	0.03	0.15	-0.08	0.04	0.09	-0.05	0.00	-0.13	0.05
6	1	0.19	0.30	-0.17	0.11	0.18	-0.08	-0.18	-0.25	0.15
7	6	0.01	-0.02	0.01	0.02	-0.07	0.03	-0.02	0.00	-0.01
8	1	-0.03	-0.15	0.03	0.03	0.00	0.01	0.08	0.29	-0.05
9	6	-0.07	0.01	-0.03	-0.06	0.17	-0.07	0.07	0.03	0.02
10	6	0.08	-0.01	0.04	-0.13	-0.06	-0.04	-0.05	0.00	-0.02
11	6	0.08	0.02	0.02	0.08	-0.02	0.02	-0.05	-0.02	-0.01
12	1	0.03	-0.02	0.02	0.37	-0.01	0.15	0.02	0.02	0.01
13	6	0.07	0.01	0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.04	-0.05	0.01
14	6	-0.08	0.06	-0.05	0.05	0.03	0.01	-0.01	0.20	-0.07
15	1	-0.35	0.01	0.00	0.06	0.02	0.03	-0.39	0.01	0.05
16	1	-0.13	0.05	-0.03	0.03	0.03	-0.02	-0.14	0.11	-0.09
17	1	-0.16	0.26	-0.15	-0.02	0.06	-0.03	-0.01	-0.03	0.06
18	1	-0.08	0.13	-0.07	-0.04	0.00	-0.01	-0.04	-0.04	0.02
19	6	0.00	-0.06	0.02	0.01	-0.03	0.01	-0.08	-0.10	0.00
20	6	0.04	-0.01	0.02	-0.02	0.01	-0.01	-0.04	-0.06	0.00
21	6	-0.06	0.12	-0.06	0.17	-0.09	0.10	0.07	0.06	0.02
22	6	0.02	-0.04	0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.02	0.01	0.00
23	1	-0.18	0.01	-0.03	-0.25	0.02	-0.08	0.09	0.02	-0.01
24	1	-0.30	-0.02	-0.04	-0.45	-0.04	-0.04	0.12	0.03	0.04
25	6	0.00	-0.08	0.02	-0.05	0.01	-0.03	-0.01	-0.06	0.01
26	6	-0.02	-0.06	0.02	-0.02	0.05	-0.05	-0.03	-0.03	-0.01
27	1	-0.14	0.21	-0.13	-0.09	0.07	0.00	0.01	0.00	0.02
28	1	-0.04	0.08	-0.05	-0.04	-0.02	0.01	-0.05	-0.02	-0.01
29	1	0.03	-0.03	0.02	0.11	0.37	-0.05	0.11	0.19	0.01

30	1	0.19	0.28	-0.12	-0.22	-0.27	0.14	0.02	0.06	-0.01
31	1	-0.03	0.12	-0.07	0.08	-0.14	0.07	0.02	-0.01	0.00
32	1	0.15	0.00	0.06	0.02	0.02	0.00	0.56	0.04	0.20
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		67			68			69		
		A			A			A		
Frequencies	--	1485.6658			1496.6129			1502.7539		
Red. masses	--	2.1619			1.1680			1.1867		
Frc consts	--	2.8114			1.5414			1.5790		
IR Inten	--	5.8993			10.4148			15.1733		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.04	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00
2	6	-0.04	0.00	-0.03	0.03	0.00	0.03	-0.01	0.00	-0.01
3	6	0.10	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.03	0.01	0.01
4	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.17	-0.12	0.05	-0.29	0.14	-0.06	0.06	-0.04	0.02
6	1	-0.02	0.01	0.20	-0.06	-0.10	-0.30	0.00	0.01	0.07
7	6	-0.08	-0.02	-0.03	-0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.01
8	1	0.16	0.27	-0.01	-0.01	-0.05	0.01	0.05	0.08	0.00
9	6	0.03	0.12	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.01	0.03	0.00
10	6	0.08	-0.10	0.06	0.01	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.02
11	6	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.01
12	1	0.39	0.07	0.13	0.04	0.00	0.02	0.09	0.02	0.02
13	6	0.01	0.02	0.00	0.00	-0.07	-0.01	0.01	-0.02	0.00
14	6	-0.02	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01
15	1	0.00	-0.06	-0.07	-0.01	0.41	0.43	-0.02	0.11	0.11
16	1	0.00	-0.08	0.05	0.03	0.50	-0.31	0.00	0.14	-0.08
17	1	-0.03	0.04	0.01	0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.01	0.01
18	1	-0.04	-0.02	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00
19	6	-0.09	0.04	-0.05	0.00	-0.02	0.01	-0.03	0.01	-0.01
20	6	0.03	-0.04	0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.02	-0.02	0.02
21	6	-0.08	-0.03	-0.03	-0.02	-0.03	0.00	-0.04	-0.02	-0.02
22	6	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
23	1	-0.04	0.25	-0.20	0.00	0.07	-0.05	-0.03	-0.21	0.14
24	1	-0.16	0.18	0.19	-0.02	0.06	0.06	0.02	-0.20	-0.18
25	6	0.03	0.10	-0.01	0.02	0.04	0.00	0.02	0.04	-0.01
26	6	0.04	0.01	0.04	0.02	0.01	0.01	-0.03	0.00	-0.05
27	1	0.06	-0.08	0.04	0.02	-0.02	-0.01	0.05	-0.03	-0.07
28	1	0.02	-0.02	0.02	0.02	0.01	0.00	0.09	0.02	0.03
29	1	-0.17	-0.32	0.01	-0.04	-0.09	0.00	-0.08	-0.14	0.02
30	1	0.03	-0.08	-0.23	-0.01	-0.07	-0.11	0.02	0.24	0.55
31	1	-0.23	0.11	-0.11	-0.11	0.05	-0.04	0.52	-0.18	0.21
32	1	-0.16	-0.09	-0.03	0.01	-0.01	0.01	-0.08	-0.04	-0.01
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		70			71			72		
		A			A			A		
Frequencies	--	1509.8720			1512.6018			1521.0530		
Red. masses	--	1.0938			1.1320			1.1277		
Frc consts	--	1.4691			1.5259			1.5373		
IR Inten	--	1.4880			19.8164			22.3716		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00
2	6	-0.04	0.00	-0.04	-0.02	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.01	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.01
4	6	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.41	-0.22	0.10	0.31	-0.16	0.07	-0.04	0.01	-0.01
6	1	0.10	0.17	0.44	0.08	0.13	0.33	-0.02	-0.02	-0.04
7	6	0.02	0.00	0.01	0.02	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.00
8	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.06	0.01	0.03	0.06	-0.01
9	6	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00
10	6	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00
11	6	0.00	0.04	0.00	0.01	-0.05	0.00	0.00	0.01	0.00
12	1	-0.03	-0.01	-0.01	-0.09	-0.01	-0.02	0.02	0.01	0.00

13	6	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.00
15	1	0.00	0.20	0.20	0.01	0.14	0.14	0.01	0.05	0.04
16	1	0.00	0.23	-0.14	0.00	0.17	-0.10	0.01	0.05	-0.03
17	1	-0.03	0.02	0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.03
18	1	-0.04	-0.03	0.00	0.02	0.01	0.00	0.02	0.02	-0.01
19	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.01
20	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.02	0.01	0.01
21	6	0.01	0.00	0.01	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.01	-0.01
22	6	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.07	0.02	-0.05
23	1	0.00	-0.28	0.19	0.01	0.42	-0.29	-0.02	-0.08	0.05
24	1	0.05	-0.25	-0.23	-0.06	0.38	0.34	0.02	-0.07	-0.07
25	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.01	-0.01	-0.01	0.00
26	6	0.02	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00
27	1	0.02	0.00	-0.03	-0.06	0.03	0.05	-0.34	0.15	0.59
28	1	0.02	0.03	0.00	-0.06	-0.03	-0.01	-0.54	-0.41	-0.03
29	1	0.01	0.03	-0.01	0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	-0.01	-0.11	-0.25	0.00	0.08	0.20	0.02	0.02	0.02
31	1	-0.23	0.10	-0.10	0.18	-0.09	0.08	0.01	-0.02	0.01
32	1	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.06	-0.01	-0.02
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

73

74

75

		A			A			A		
Frequencies	--	1524.2090			1535.0861			1589.2035		
Red. masses	--	1.0910			3.2903			5.3197		
Frc consts	--	1.4933			4.5683			7.9159		
IR Inten	--	14.2055			32.6415			66.2601		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.13	0.01	0.09	0.08	0.01
2	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
3	6	-0.01	0.00	0.00	0.13	0.01	0.05	-0.06	-0.03	-0.01
4	6	0.06	0.01	-0.05	0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01
5	1	-0.03	0.00	0.00	-0.21	0.05	-0.03	0.02	-0.01	0.01
6	1	0.01	0.00	-0.02	-0.13	-0.15	-0.20	0.01	0.01	0.02
7	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.06	0.00	-0.18	-0.06	-0.06
8	1	-0.01	-0.01	0.00	0.17	0.38	-0.05	-0.01	-0.14	0.04
9	6	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.02	0.01	0.11	0.12	0.01
10	6	0.00	0.01	0.00	-0.05	-0.05	-0.01	0.02	-0.20	0.07
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.00
12	1	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.06	-0.02	0.36	0.04	0.13
13	6	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.06	0.00	-0.02
14	6	0.00	-0.01	0.00	-0.08	-0.14	0.01	0.24	-0.12	0.12
15	1	0.01	-0.01	-0.02	0.07	0.20	0.17	0.17	0.06	0.06
16	1	-0.02	-0.02	0.01	0.05	0.18	-0.10	0.01	0.01	-0.01
17	1	-0.27	0.18	0.62	-0.07	0.08	0.01	0.00	-0.02	0.02
18	1	-0.60	-0.37	0.03	-0.07	0.01	-0.02	0.02	-0.02	0.00
19	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.16	-0.07	0.02	0.11	-0.03
20	6	-0.01	0.00	0.00	0.16	0.07	0.03	-0.23	0.08	-0.12
21	6	0.00	0.00	0.00	0.07	0.13	0.01	-0.05	0.21	-0.08
22	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.02	-0.01	0.00	-0.01
23	1	0.00	0.02	-0.02	0.03	0.05	-0.03	-0.03	-0.10	0.06
24	1	0.00	0.02	0.02	0.03	0.06	0.05	-0.02	-0.12	-0.08
25	6	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.17	0.00	0.00	-0.16	0.06
26	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.00	-0.01	-0.05	0.01
27	1	-0.02	0.01	0.04	0.10	-0.02	-0.24	0.04	-0.04	-0.01
28	1	-0.03	-0.02	0.00	0.18	0.17	-0.01	0.03	0.01	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.11	0.30	-0.03	0.24	0.24	-0.01
30	1	0.00	0.01	0.02	0.01	0.04	-0.05	0.11	0.19	0.07
31	1	0.01	-0.01	0.01	-0.04	0.00	-0.01	0.06	0.00	0.01
32	1	0.01	0.00	0.00	-0.30	0.00	-0.10	0.38	0.20	0.09
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

76

77

78

A

A

A

Frequencies		1628.8189			1630.0668			3019.1521		
Red. masses		6.0775			6.6586			1.0681		
Frc consts		9.5000			10.4242			5.7365		
IR Inten		28.1033			32.1011			15.4618		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	0.21	-0.08	0.16	0.30	-0.03	0.00	0.00	0.00
2	6	0.01	0.05	-0.01	0.03	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00
3	6	0.10	-0.26	0.11	-0.13	-0.23	0.02	0.00	0.00	0.00
4	6	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01
5	1	-0.04	0.01	0.00	0.08	0.00	0.01	0.00	-0.02	-0.04
6	1	-0.13	-0.16	-0.04	-0.01	-0.03	0.07	-0.02	0.01	0.00
7	6	0.30	-0.07	0.14	-0.17	-0.11	-0.03	0.00	0.00	0.00
8	1	-0.30	-0.24	-0.05	-0.22	-0.43	0.04	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.29	0.14	-0.16	0.09	0.11	0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	0.11	-0.09	0.07	-0.15	-0.14	-0.02	0.00	0.00	0.00
11	6	0.06	0.00	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
12	1	-0.47	-0.24	-0.12	0.17	-0.06	0.08	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.01	0.00	-0.01	0.05	0.00	0.01	0.01	-0.05	-0.05
14	6	0.05	-0.04	0.03	-0.26	0.03	-0.11	0.00	0.00	0.00
15	1	0.06	0.04	0.03	-0.12	-0.01	0.00	0.00	0.18	-0.23
16	1	0.02	0.02	-0.01	0.01	0.04	-0.01	-0.07	0.46	0.83
17	1	0.00	0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.06	-0.02	-0.02	0.00
18	1	0.00	0.00	0.01	-0.05	-0.03	0.01	0.01	-0.03	-0.08
19	6	-0.14	0.11	-0.08	0.19	0.09	0.05	0.00	0.00	0.00
20	6	-0.03	0.00	-0.01	0.26	-0.01	0.10	0.00	0.00	0.00
21	6	-0.03	0.01	-0.02	0.06	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00
22	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.02	0.00	0.00	-0.03	-0.07	0.04	0.00	0.00	0.01
24	1	-0.16	-0.07	-0.06	-0.01	-0.07	-0.05	0.00	0.00	0.00
25	6	0.00	0.01	0.01	-0.07	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00
26	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.01	0.00	0.02	0.04	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
28	1	-0.02	-0.01	0.00	0.03	0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.02
29	1	0.01	-0.02	-0.01	-0.09	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.02	0.04	0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
31	1	0.03	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01
32	1	0.03	0.01	0.01	-0.35	-0.13	-0.09	0.00	0.00	0.00
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

79

80

81

Frequencies		3020.3512			3027.0669			3028.8543		
Red. masses		1.0713			1.0682			1.0664		
Frc consts		5.7582			5.7669			5.7638		
IR Inten		12.2691			17.8426			13.1959		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.07	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
5	1	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.41	0.85	0.00	0.00	-0.01
6	1	0.00	0.00	0.00	0.25	-0.18	-0.03	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.02
12	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
16	1	0.00	0.01	0.01	0.00	0.02	0.04	0.00	0.01	0.01
17	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.04	-0.09	0.00	0.00	0.00



2	6	-0.03	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.05	0.02
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.01
5	1	0.00	-0.05	-0.12	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.10	-0.24
6	1	0.34	-0.23	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.69	-0.47	-0.02
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.01
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.08	0.00	0.00	0.00
12	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.04	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	1	0.00	-0.59	0.62	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.26	-0.27
16	1	-0.02	0.14	0.21	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.06	-0.09
17	1	-0.06	-0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.18	0.14	0.05
18	1	-0.01	0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.05	-0.11
19	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.19	0.25	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.59	0.68	0.00	0.00	0.00
25	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.06	-0.03	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04	0.09	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.11	-0.03	0.00	0.00	0.00
31	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	0.08	0.00	0.00	0.00
32	1	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
33	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		88			89			90		
		A			A			A		
Frequencies	--	3125.1997			3130.2716			3169.1963		
Red. masses	--	1.0954			1.1035			1.0891		
Frc consts	--	6.3037			6.3708			6.4450		
IR Inten	--	38.0302			33.8847			3.6217		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00
5	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.10	0.00	0.00	0.00
6	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.04	0.00	0.01	-0.01
16	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.05	0.09	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.63	0.51	0.16	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.21	0.48	0.00	0.00	0.00
19	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
21	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	6	-0.05	-0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.02	0.06	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00





**Table S39.** Cartesian coordinates of optimized structure for (11/Ag<sup>+</sup>/10)

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	-2.450591	-1.904372	1.501580
2	6	0	-2.940518	-3.175750	1.093680
3	6	0	-3.962333	-3.298313	0.155149
4	6	0	-4.556609	-2.146489	-0.418148
5	6	0	-5.588446	-2.253719	-1.419649
6	6	0	-6.171892	-1.131487	-1.958396
7	6	0	-5.780096	0.190379	-1.530131
8	6	0	-6.379179	1.354052	-2.067040
9	6	0	-5.995510	2.631982	-1.623875
10	6	0	-5.009977	2.771224	-0.633800
11	6	0	-4.383467	1.630103	-0.077064
12	6	0	-3.404718	1.732340	0.973107
13	6	0	-2.787066	0.615321	1.496212
14	6	0	-3.087391	-0.715107	1.004573
15	6	0	-4.759601	0.322836	-0.529393
16	6	0	-4.129035	-0.844419	0.020614
17	6	0	-1.238911	-1.876143	2.340636
18	1	0	-2.484376	-4.077099	1.490338
19	1	0	-4.300655	-4.283119	-0.155166
20	1	0	-5.898016	-3.244959	-1.740051
21	1	0	-6.948259	-1.223864	-2.714068
22	1	0	-7.148250	1.252881	-2.828993
23	1	0	-6.469313	3.514053	-2.044501
24	1	0	-4.726489	3.760515	-0.282738
25	1	0	-3.176400	2.716371	1.376766
26	1	0	-2.136018	0.724890	2.357013
27	6	0	-0.899959	-3.041217	3.251131
28	1	0	-1.786084	-3.443490	3.751444
29	1	0	-0.437523	-3.854922	2.674622
30	1	0	-0.171640	-2.706533	3.993768
31	8	0	-0.403073	-0.906441	2.313505
32	47	0	0.100495	0.760980	0.939291
33	6	0	3.096512	2.426966	-0.204788
34	6	0	4.325252	2.988744	0.235936
35	6	0	5.481762	2.219040	0.343020
36	6	0	5.467789	0.844992	-0.001756
37	6	0	6.644678	0.023533	0.139341
38	6	0	6.628631	-1.303981	-0.216497
39	6	0	5.437057	-1.916527	-0.755228
40	6	0	5.409762	-3.277511	-1.139574
41	6	0	4.245183	-3.850512	-1.680338
42	6	0	3.087582	-3.074602	-1.849019
43	6	0	3.073926	-1.710929	-1.468129
44	6	0	1.920542	-0.873448	-1.667696
45	6	0	1.910852	0.450111	-1.276988
46	6	0	3.065609	1.058524	-0.642057
47	6	0	4.253826	-1.118834	-0.908874
48	6	0	4.256454	0.262712	-0.516573
49	6	0	1.881830	3.255159	-0.088732
50	1	0	4.359905	4.030321	0.539236

51	1	0	6.400993	2.667534	0.709493
52	1	0	7.549184	0.478670	0.533880
53	1	0	7.521343	-1.914563	-0.104666
54	1	0	6.305144	-3.882171	-1.017768
55	1	0	4.245144	-4.895569	-1.976083
56	1	0	2.194102	-3.516810	-2.283506
57	1	0	1.053043	-1.295140	-2.171231
58	1	0	1.064022	1.074073	-1.544474
59	8	0	0.725908	2.746424	0.125359
60	6	0	1.964111	4.766579	-0.166479
61	1	0	0.970683	5.164083	-0.388805
62	1	0	2.679667	5.101405	-0.923395
63	1	0	2.277495	5.180111	0.802747

---

**Table S40. Vibrational frequencies for (11/Ag<sup>+</sup>/10)**

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	-880.5885			-90.2370			7.9136		
Red. masses	--	1.1275			6.4936			6.6974		
Frc constns	--	0.5151			0.0312			0.0002		
IR Inten	--	2.2309			0.5327			0.0784		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.04	0.02	-0.07	-0.01	0.00
2	6	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.03	0.05	-0.10	0.01	-0.01
3	6	0.00	0.00	-0.01	-0.06	-0.02	0.07	-0.10	0.04	0.00
4	6	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	0.07	-0.08	0.05	0.01
5	6	0.00	0.00	-0.01	-0.07	0.01	0.10	-0.09	0.08	0.02
6	6	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.02	0.10	-0.07	0.10	0.03
7	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01	0.04	-0.04	0.09	0.04
8	6	0.00	0.00	0.00	0.08	0.02	0.02	-0.02	0.11	0.05
9	6	0.00	0.00	0.00	0.19	0.02	-0.07	0.01	0.09	0.06
10	6	0.00	0.00	0.00	0.30	0.01	-0.17	0.02	0.06	0.05
11	6	0.00	0.00	0.00	0.26	0.00	-0.14	0.00	0.05	0.04
12	6	0.00	0.00	0.00	0.24	-0.01	-0.13	0.01	0.02	0.03
13	6	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.03	-0.04	-0.01	0.00	0.02
14	6	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.03	0.01	-0.04	0.01	0.01
15	6	0.00	0.00	0.00	0.10	0.00	-0.01	-0.03	0.06	0.03
16	6	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.05	0.04	0.02
17	6	0.02	0.00	0.02	0.02	-0.06	0.01	-0.06	-0.04	-0.01
18	1	0.00	-0.01	-0.01	-0.05	-0.04	0.05	-0.11	-0.01	-0.02
19	1	0.00	0.00	-0.01	-0.09	-0.01	0.09	-0.13	0.05	-0.01
20	1	0.00	0.00	-0.01	-0.11	0.01	0.13	-0.12	0.09	0.01
21	1	0.00	0.00	-0.01	-0.08	0.03	0.13	-0.08	0.12	0.03
22	1	0.00	0.01	0.00	0.01	0.03	0.08	-0.03	0.13	0.06
23	1	0.00	0.00	0.00	0.20	0.03	-0.07	0.03	0.11	0.07
24	1	0.00	0.00	0.00	0.38	0.02	-0.25	0.04	0.06	0.06
25	1	0.00	0.00	0.00	0.30	0.00	-0.17	0.04	0.01	0.04
26	1	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.04	0.00	0.00	-0.02	0.02
27	6	-0.01	0.01	0.09	0.01	-0.06	0.01	-0.09	-0.05	-0.01
28	1	-0.14	-0.14	-0.24	0.01	-0.05	0.02	-0.10	-0.04	-0.02
29	1	0.24	0.10	0.15	-0.01	-0.07	0.00	-0.09	-0.05	-0.01
30	1	-0.46	-0.09	0.76	0.02	-0.07	0.00	-0.09	-0.06	0.00
31	8	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.07	0.00	-0.03	-0.06	-0.02
32	47	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.02	0.00	-0.02	-0.07	-0.02
33	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.02	0.02	-0.03	-0.02	-0.04
34	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.02	0.02	-0.05	0.03	-0.05
35	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.02	0.02	-0.02	0.07	-0.04
36	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.03	0.01	0.03	0.07	-0.01
37	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.00	0.06	0.11	0.00
38	6	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.03	-0.01	0.11	0.11	0.02
39	6	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.03	-0.01	0.13	0.06	0.03
40	6	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.03	-0.02	0.18	0.05	0.05
41	6	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.03	-0.03	0.20	0.00	0.05
42	6	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.03	-0.02	0.18	-0.05	0.04
43	6	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.03	-0.01	0.12	-0.04	0.02
44	6	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.02	0.00	0.09	-0.09	0.01
45	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.02	0.01	0.04	-0.08	-0.01
46	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.02	0.01	0.02	-0.03	-0.02
47	6	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.03	-0.01	0.10	0.01	0.02
48	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.02	0.00	0.05	0.02	-0.01
49	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.01	0.02	-0.05	-0.06	-0.07
50	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.02	0.03	-0.09	0.04	-0.07

51	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.02	0.02	-0.04	0.11	-0.04
52	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.03	0.01	0.04	0.15	0.00
53	1	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.03	-0.01	0.13	0.14	0.03
54	1	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.04	-0.03	0.20	0.08	0.06
55	1	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.03	-0.03	0.24	-0.01	0.07
56	1	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.03	-0.02	0.19	-0.09	0.05
57	1	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.02	-0.01	0.11	-0.13	0.02
58	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.02	0.01	0.02	-0.12	-0.02
59	8	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.01	0.02	-0.04	-0.09	-0.07
60	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.01	0.03	-0.10	-0.06	-0.09
61	1	0.00	0.00	0.01	-0.06	0.01	0.04	-0.11	-0.09	-0.11
62	1	0.00	0.00	0.01	-0.06	0.02	0.04	-0.11	-0.05	-0.09
63	1	0.00	0.00	0.01	-0.06	0.01	0.04	-0.12	-0.03	-0.10
			4			5			6	
			A			A			A	
Frequencies	--		17.3186			25.0722			27.0174	
Red. masses	--		8.3484			6.2815			8.3311	
Frc consts	--		0.0015			0.0023			0.0036	
IR Inten	--		0.1928			0.3584			1.2829	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	0.00	-0.01	0.07	-0.03	-0.06	0.06	0.01	0.03
2	6	0.04	0.00	0.00	0.09	-0.02	-0.12	0.09	0.01	-0.02
3	6	0.01	0.00	0.03	0.10	0.01	-0.13	0.11	0.01	-0.04
4	6	-0.01	0.00	0.05	0.08	0.02	-0.08	0.11	0.02	-0.02
5	6	-0.05	0.00	0.09	0.08	0.05	-0.08	0.14	0.03	-0.06
6	6	-0.07	0.00	0.11	0.06	0.06	-0.04	0.14	0.03	-0.05
7	6	-0.06	0.00	0.10	0.05	0.05	0.02	0.11	0.03	-0.01
8	6	-0.08	0.00	0.12	0.04	0.06	0.06	0.11	0.03	-0.01
9	6	-0.07	0.00	0.11	0.03	0.05	0.10	0.09	0.03	0.03
10	6	-0.03	0.00	0.07	0.03	0.03	0.11	0.05	0.02	0.07
11	6	-0.01	0.00	0.05	0.04	0.01	0.07	0.04	0.01	0.07
12	6	0.03	0.00	0.01	0.04	-0.02	0.07	-0.01	0.00	0.11
13	6	0.05	0.00	-0.01	0.05	-0.03	0.03	-0.01	0.00	0.11
14	6	0.03	0.00	0.00	0.06	-0.02	-0.02	0.04	0.01	0.06
15	6	-0.02	0.00	0.06	0.05	0.02	0.02	0.07	0.02	0.03
16	6	0.00	0.00	0.04	0.06	0.01	-0.02	0.07	0.02	0.02
17	6	0.07	0.01	-0.05	0.06	-0.05	-0.04	0.05	0.02	0.03
18	1	0.05	0.01	-0.01	0.10	-0.03	-0.15	0.11	0.01	-0.03
19	1	0.00	0.00	0.05	0.11	0.01	-0.17	0.14	0.02	-0.08
20	1	-0.06	0.00	0.10	0.10	0.06	-0.13	0.17	0.03	-0.09
21	1	-0.10	-0.01	0.14	0.07	0.08	-0.04	0.17	0.04	-0.08
22	1	-0.11	-0.01	0.15	0.04	0.09	0.06	0.14	0.04	-0.04
23	1	-0.09	-0.01	0.13	0.02	0.06	0.14	0.09	0.03	0.03
24	1	-0.02	0.00	0.06	0.02	0.02	0.14	0.03	0.01	0.09
25	1	0.05	0.00	0.00	0.03	-0.03	0.10	-0.04	0.00	0.15
26	1	0.08	0.01	-0.04	0.05	-0.06	0.03	-0.05	-0.01	0.14
27	6	0.08	0.03	-0.02	0.04	-0.07	-0.06	0.09	0.00	0.00
28	1	0.07	0.01	-0.05	0.02	-0.12	-0.13	0.10	-0.04	0.00
29	1	0.13	0.04	0.00	0.11	-0.03	-0.05	0.10	0.02	-0.03
30	1	0.04	0.06	0.00	-0.02	-0.06	0.00	0.09	-0.01	0.00
31	8	0.08	0.00	-0.10	0.06	-0.05	-0.02	0.02	0.04	0.06
32	47	0.00	-0.01	-0.16	0.03	-0.03	-0.02	-0.13	0.08	0.04
33	6	0.01	0.01	0.03	-0.06	0.03	-0.06	-0.06	-0.07	-0.02
34	6	-0.02	-0.02	0.13	-0.05	0.05	-0.10	-0.08	-0.06	0.03
35	6	-0.04	-0.04	0.19	-0.05	0.05	-0.10	-0.08	-0.05	0.08
36	6	-0.04	-0.04	0.16	-0.06	0.04	-0.04	-0.06	-0.05	0.06
37	6	-0.06	-0.06	0.23	-0.06	0.03	-0.02	-0.05	-0.04	0.08
38	6	-0.06	-0.05	0.20	-0.07	0.02	0.04	-0.01	-0.03	0.05
39	6	-0.03	-0.02	0.10	-0.08	0.00	0.09	0.02	-0.03	-0.02
40	6	-0.03	-0.01	0.07	-0.10	-0.02	0.15	0.06	-0.02	-0.06
41	6	0.00	0.02	-0.02	-0.10	-0.03	0.19	0.09	-0.02	-0.12
42	6	0.02	0.04	-0.08	-0.10	-0.03	0.16	0.07	-0.04	-0.13
43	6	0.02	0.03	-0.05	-0.09	-0.02	0.10	0.04	-0.05	-0.09

44	6	0.05	0.06	-0.11	-0.08	-0.02	0.07	0.02	-0.07	-0.09
45	6	0.04	0.05	-0.08	-0.07	0.00	0.01	-0.01	-0.08	-0.05
46	6	0.01	0.02	0.00	-0.06	0.02	-0.02	-0.04	-0.07	-0.02
47	6	-0.01	0.00	0.04	-0.08	0.00	0.06	0.01	-0.05	-0.03
48	6	-0.01	-0.01	0.07	-0.06	0.02	0.00	-0.03	-0.06	0.00
49	6	0.01	0.02	-0.03	-0.06	0.02	-0.06	-0.06	-0.06	-0.10
50	1	-0.02	-0.03	0.15	-0.04	0.06	-0.14	-0.10	-0.06	0.03
51	1	-0.05	-0.07	0.26	-0.04	0.06	-0.13	-0.10	-0.05	0.12
52	1	-0.08	-0.08	0.30	-0.05	0.05	-0.05	-0.07	-0.03	0.13
53	1	-0.08	-0.07	0.25	-0.07	0.02	0.06	-0.01	-0.01	0.06
54	1	-0.04	-0.03	0.12	-0.10	-0.02	0.17	0.06	-0.01	-0.05
55	1	0.00	0.03	-0.04	-0.12	-0.05	0.24	0.12	-0.01	-0.16
56	1	0.05	0.07	-0.15	-0.11	-0.05	0.19	0.10	-0.04	-0.17
57	1	0.07	0.08	-0.18	-0.09	-0.03	0.08	0.04	-0.08	-0.10
58	1	0.07	0.07	-0.13	-0.06	0.00	-0.02	-0.03	-0.10	-0.03
59	8	-0.01	0.03	-0.10	-0.05	0.01	-0.01	-0.08	-0.04	-0.13
60	6	0.03	0.02	-0.01	-0.08	0.02	-0.09	-0.05	-0.06	-0.16
61	1	0.05	0.04	-0.07	-0.09	0.01	-0.07	-0.03	-0.07	-0.24
62	1	0.08	0.02	0.04	-0.10	0.01	-0.12	0.00	-0.10	-0.13
63	1	-0.03	0.01	0.02	-0.05	0.05	-0.11	-0.11	-0.02	-0.16

		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies	--	44.5870			50.0855			71.6702		
Red. masses	--	9.1559			6.0747			5.5279		
Frc consts	--	0.0107			0.0090			0.0167		
IR Inten	--	1.0457			0.8288			0.2324		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.04	0.02	0.03	-0.04	-0.11	-0.08	-0.07	0.06
2	6	-0.02	0.03	0.03	0.02	-0.04	-0.12	-0.12	-0.06	0.07
3	6	-0.01	0.02	0.02	-0.02	-0.03	-0.08	-0.13	-0.04	0.08
4	6	0.00	0.02	0.00	-0.06	-0.02	-0.02	-0.08	-0.03	0.05
5	6	0.01	0.01	-0.01	-0.13	-0.01	0.05	-0.03	0.00	0.00
6	6	0.01	0.00	-0.02	-0.16	-0.01	0.09	0.04	0.01	-0.05
7	6	0.00	0.00	-0.03	-0.11	-0.01	0.06	0.06	0.00	-0.04
8	6	0.00	0.00	-0.04	-0.13	-0.01	0.09	0.14	0.02	-0.10
9	6	-0.02	0.00	-0.05	-0.07	-0.01	0.04	0.13	0.01	-0.06
10	6	-0.02	0.01	-0.04	0.01	-0.02	-0.03	0.04	-0.02	0.03
11	6	-0.02	0.02	-0.03	0.02	-0.02	-0.05	-0.03	-0.03	0.08
12	6	-0.01	0.03	-0.04	0.05	-0.03	-0.08	-0.07	-0.06	0.12
13	6	-0.01	0.04	-0.03	0.03	-0.04	-0.09	-0.08	-0.07	0.11
14	6	-0.01	0.03	-0.01	0.01	-0.04	-0.08	-0.08	-0.06	0.08
15	6	-0.01	0.01	-0.03	-0.04	-0.02	-0.01	-0.02	-0.02	0.04
16	6	0.00	0.02	-0.01	-0.03	-0.03	-0.04	-0.07	-0.04	0.06
17	6	-0.03	0.03	0.04	0.03	-0.05	-0.11	-0.02	-0.07	-0.03
18	1	-0.04	0.04	0.05	0.05	-0.04	-0.16	-0.13	-0.07	0.07
19	1	-0.01	0.02	0.04	-0.03	-0.03	-0.07	-0.15	-0.03	0.09
20	1	0.01	0.00	0.00	-0.16	-0.01	0.07	-0.05	0.00	-0.01
21	1	0.02	-0.01	-0.03	-0.22	0.00	0.15	0.09	0.03	-0.11
22	1	0.00	-0.01	-0.05	-0.19	0.00	0.15	0.20	0.04	-0.16
23	1	-0.02	0.00	-0.06	-0.08	0.00	0.07	0.20	0.02	-0.10
24	1	-0.03	0.02	-0.04	0.05	-0.02	-0.06	0.03	-0.03	0.06
25	1	-0.01	0.04	-0.05	0.08	-0.03	-0.09	-0.08	-0.07	0.15
26	1	0.02	0.05	-0.05	0.03	-0.05	-0.08	-0.08	-0.09	0.11
27	6	-0.06	0.03	0.05	0.04	-0.08	-0.15	0.05	-0.08	-0.07
28	1	-0.07	0.11	0.11	0.02	-0.27	-0.33	0.07	-0.23	-0.16
29	1	-0.16	-0.02	0.05	0.28	0.05	-0.14	0.21	0.02	-0.09
30	1	0.00	0.00	0.00	-0.14	-0.04	0.01	-0.05	-0.04	0.01
31	8	-0.02	0.02	0.06	0.01	-0.04	-0.06	-0.02	-0.07	-0.09
32	47	0.17	-0.06	0.09	0.01	0.10	0.09	0.00	0.02	0.01
33	6	-0.08	0.00	-0.03	0.03	-0.01	-0.02	0.05	0.05	-0.08
34	6	-0.10	0.00	0.03	0.03	-0.01	-0.03	0.06	0.04	-0.08
35	6	-0.11	-0.01	0.09	0.02	-0.01	0.00	0.04	0.03	-0.06
36	6	-0.10	0.00	0.08	0.02	-0.02	0.02	0.02	0.02	-0.02

37	6	-0.11	-0.01	0.13	0.01	-0.02	0.04	-0.01	-0.01	0.06
38	6	-0.08	0.00	0.10	0.01	-0.02	0.05	-0.04	-0.03	0.11
39	6	-0.05	0.02	0.01	0.01	-0.02	0.03	-0.03	-0.01	0.06
40	6	-0.02	0.03	-0.05	0.02	-0.02	0.03	-0.06	-0.02	0.10
41	6	0.01	0.05	-0.14	0.02	-0.02	0.02	-0.04	0.01	0.04
42	6	0.01	0.04	-0.16	0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.05	-0.05
43	6	-0.02	0.03	-0.11	0.02	-0.02	0.01	0.01	0.05	-0.07
44	6	-0.02	0.02	-0.11	0.02	-0.02	0.01	0.04	0.08	-0.12
45	6	-0.05	0.01	-0.07	0.02	-0.02	0.01	0.05	0.07	-0.11
46	6	-0.07	0.00	-0.03	0.02	-0.02	0.00	0.04	0.05	-0.08
47	6	-0.05	0.01	-0.03	0.02	-0.02	0.02	0.00	0.03	-0.02
48	6	-0.07	0.00	0.01	0.02	-0.02	0.02	0.03	0.03	-0.05
49	6	-0.09	-0.01	-0.08	0.04	0.01	-0.06	0.04	0.03	-0.03
50	1	-0.12	0.00	0.03	0.03	0.00	-0.05	0.07	0.05	-0.10
51	1	-0.13	-0.01	0.14	0.02	-0.01	0.01	0.05	0.02	-0.06
52	1	-0.13	-0.02	0.20	0.01	-0.02	0.05	-0.01	-0.03	0.08
53	1	-0.09	0.00	0.13	0.01	-0.03	0.06	-0.06	-0.05	0.17
54	1	-0.02	0.03	-0.03	0.01	-0.02	0.04	-0.09	-0.05	0.17
55	1	0.04	0.06	-0.19	0.02	-0.02	0.02	-0.06	0.00	0.07
56	1	0.04	0.05	-0.22	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.07	-0.09
57	1	0.00	0.03	-0.15	0.02	-0.02	0.02	0.05	0.09	-0.15
58	1	-0.05	0.00	-0.07	0.01	-0.02	0.02	0.06	0.09	-0.10
59	8	-0.07	-0.03	-0.01	0.03	0.03	-0.01	0.06	0.01	0.02
60	6	-0.12	-0.02	-0.23	0.05	0.00	-0.17	0.02	0.03	-0.04
61	1	-0.13	-0.06	-0.28	0.05	-0.01	-0.20	0.00	0.02	0.00
62	1	-0.12	-0.08	-0.25	0.05	-0.06	-0.19	-0.02	0.04	-0.07
63	1	-0.15	0.08	-0.26	0.05	0.07	-0.20	0.05	0.04	-0.05

		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies	--	78.9951			87.4777			105.7492		
Red. masses	--	4.4932			2.8722			3.3861		
Frc consts	--	0.0165			0.0129			0.0223		
IR Inten	--	4.5191			4.0957			9.5328		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.02	-0.02	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	-0.04	-0.02
2	6	0.05	0.02	-0.04	0.00	-0.03	-0.02	-0.04	-0.04	0.01
3	6	0.05	0.01	-0.04	0.01	-0.02	-0.04	-0.05	-0.03	0.01
4	6	0.03	0.01	-0.02	0.02	-0.01	-0.04	-0.03	-0.02	0.00
5	6	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.04	-0.02	0.00	-0.02
6	6	-0.03	0.00	0.03	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.02
7	6	-0.03	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.01
8	6	-0.06	-0.01	0.04	-0.03	0.00	0.05	0.03	0.01	-0.01
9	6	-0.05	0.00	0.02	-0.03	0.00	0.07	0.03	0.00	0.02
10	6	-0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.04	0.01	-0.01	0.04
11	6	0.02	0.01	-0.03	0.03	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.03
12	6	0.03	0.02	-0.05	0.04	-0.02	-0.01	0.00	-0.04	0.03
13	6	0.03	0.02	-0.04	0.03	-0.03	-0.02	0.01	-0.05	0.00
14	6	0.03	0.02	-0.03	0.02	-0.03	-0.02	0.00	-0.04	-0.01
15	6	0.01	0.01	-0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.01
16	6	0.03	0.01	-0.03	0.02	-0.02	-0.03	-0.01	-0.03	0.00
17	6	0.00	0.02	0.02	-0.04	-0.03	0.04	0.00	-0.03	-0.03
18	1	0.05	0.02	-0.04	-0.02	-0.03	0.00	-0.05	-0.04	0.02
19	1	0.06	0.01	-0.04	0.02	-0.02	-0.05	-0.07	-0.02	0.02
20	1	0.01	0.00	0.01	0.03	0.00	-0.06	-0.03	0.00	-0.02
21	1	-0.05	-0.01	0.05	0.00	0.01	-0.01	0.02	0.02	-0.04
22	1	-0.09	-0.02	0.07	-0.05	0.01	0.07	0.05	0.03	-0.02
23	1	-0.07	-0.01	0.04	-0.05	0.00	0.10	0.04	0.01	0.03
24	1	0.00	0.01	-0.04	0.01	-0.01	0.04	0.01	-0.02	0.06
25	1	0.03	0.02	-0.06	0.05	-0.03	-0.01	0.00	-0.05	0.05
26	1	0.02	0.03	-0.03	0.02	-0.04	-0.01	0.02	-0.06	0.00
27	6	-0.04	0.03	0.03	-0.16	0.04	0.17	-0.10	0.06	0.11
28	1	-0.05	0.10	0.08	-0.19	0.35	0.37	-0.13	0.29	0.25
29	1	-0.12	-0.02	0.04	-0.49	-0.19	0.23	-0.30	-0.12	0.20

30	1	0.01	0.00	0.00	0.04	-0.03	-0.01	0.02	0.05	0.00
31	8	0.00	0.02	0.05	0.00	-0.06	0.00	0.06	-0.09	-0.15
32	47	-0.01	0.00	0.05	-0.04	-0.01	0.00	0.04	0.06	0.00
33	6	0.00	0.00	-0.08	0.04	0.02	-0.02	-0.03	-0.02	0.01
34	6	0.00	0.01	-0.09	0.05	0.02	-0.03	-0.05	-0.03	0.06
35	6	0.00	0.02	-0.09	0.04	0.01	-0.02	-0.04	-0.02	0.06
36	6	0.00	0.01	-0.06	0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
37	6	-0.02	0.00	0.03	0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.02	-0.04
38	6	-0.03	-0.02	0.10	-0.01	-0.02	0.03	0.01	0.02	-0.06
39	6	-0.01	-0.02	0.06	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.03
40	6	-0.02	-0.04	0.13	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01
41	6	0.00	-0.03	0.07	-0.02	0.02	-0.02	0.00	-0.02	0.04
42	6	0.03	-0.01	-0.05	-0.01	0.04	-0.03	-0.01	-0.04	0.05
43	6	0.04	0.00	-0.10	0.01	0.03	-0.02	-0.01	-0.03	0.02
44	6	0.05	0.01	-0.16	0.01	0.05	-0.02	-0.01	-0.03	0.01
45	6	0.04	0.01	-0.15	0.02	0.04	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02
46	6	0.02	0.01	-0.11	0.03	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01
47	6	0.01	0.00	-0.05	0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.01
48	6	0.01	0.01	-0.08	0.02	0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.01
49	6	-0.01	-0.04	0.02	0.04	0.02	-0.01	-0.02	0.00	-0.02
50	1	-0.01	0.01	-0.09	0.06	0.03	-0.05	-0.06	-0.03	0.09
51	1	0.00	0.03	-0.09	0.05	0.00	-0.03	-0.05	-0.02	0.08
52	1	-0.03	0.00	0.05	0.01	-0.03	0.03	-0.01	0.03	-0.04
53	1	-0.05	-0.04	0.18	-0.02	-0.03	0.05	0.03	0.04	-0.09
54	1	-0.05	-0.06	0.22	-0.03	-0.01	0.02	0.02	0.01	-0.02
55	1	-0.01	-0.05	0.12	-0.03	0.02	-0.03	0.00	-0.03	0.06
56	1	0.05	-0.01	-0.09	0.00	0.05	-0.05	-0.01	-0.05	0.08
57	1	0.07	0.02	-0.19	0.01	0.06	-0.03	-0.01	-0.04	0.02
58	1	0.03	0.01	-0.13	0.03	0.05	0.00	-0.01	-0.03	-0.03
59	8	-0.01	-0.09	-0.05	0.06	0.02	0.07	-0.05	0.02	-0.11
60	6	-0.06	-0.02	0.28	0.03	0.02	-0.14	0.00	0.00	0.09
61	1	-0.06	-0.02	0.28	0.01	0.00	-0.06	0.08	0.01	-0.23
62	1	-0.02	0.14	0.38	-0.05	-0.05	-0.25	0.26	0.07	0.36
63	1	-0.14	-0.18	0.37	0.15	0.10	-0.21	-0.36	-0.06	0.23

		13			14			15		
		A			A			A		
Frequencies	--	115.7093			117.7708			122.2143		
Red. masses	--	4.1840			4.4810			1.2165		
Frc consts	--	0.0330			0.0366			0.0107		
IR Inten	--	4.4120			5.3921			0.7815		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.01	0.00	-0.04	0.01	0.07	0.00	0.00	-0.01
2	6	0.02	0.01	-0.02	-0.15	0.02	0.19	0.00	0.00	0.00
3	6	0.03	0.00	-0.02	-0.12	0.02	0.15	-0.01	0.00	0.01
4	6	0.01	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.01	0.11	0.01	-0.09	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.02	0.00	0.02	0.13	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.01	0.00	0.01	0.05	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.01	0.00	0.00	-0.07	-0.01	0.05	0.01	0.00	-0.01
9	6	0.00	0.00	-0.01	-0.16	-0.01	0.13	0.00	0.00	0.00
10	6	0.01	0.00	-0.02	-0.09	0.01	0.06	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.02	-0.05	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.01	0.01	0.00	0.09	0.03	-0.11	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.01	0.01	0.01	0.10	0.04	-0.10	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.01	0.01	0.05	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.02	-0.05	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.01	0.01	0.02	0.01	-0.03	0.00	0.01	0.00	-0.01
18	1	0.04	0.01	-0.03	-0.26	0.02	0.29	0.00	0.00	0.00
19	1	0.04	0.00	-0.03	-0.19	0.02	0.22	-0.01	0.00	0.01
20	1	0.00	0.00	0.01	0.14	0.00	-0.11	-0.01	0.00	0.01
21	1	-0.03	0.00	0.03	0.17	-0.01	-0.17	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.01	-0.01	0.01	-0.09	-0.02	0.08	0.01	0.00	-0.01

23	1	0.01	0.00	-0.02	-0.28	-0.02	0.24	0.01	0.00	-0.01
24	1	0.01	0.00	-0.03	-0.14	0.01	0.10	-0.01	0.00	0.01
25	1	-0.01	0.01	0.00	0.11	0.04	-0.13	0.00	0.00	0.01
26	1	-0.02	0.01	0.02	0.10	0.05	-0.11	0.01	0.00	0.00
27	6	0.01	-0.01	-0.02	0.06	-0.07	-0.06	-0.01	0.01	0.01
28	1	0.02	-0.05	-0.04	0.08	-0.21	-0.14	-0.01	0.04	0.02
29	1	0.03	0.02	-0.04	0.19	0.03	-0.10	-0.02	-0.01	0.03
30	1	0.00	-0.02	0.00	-0.02	-0.05	0.01	0.00	0.02	0.00
31	8	-0.03	0.03	0.06	0.05	-0.07	-0.05	0.03	-0.02	-0.04
32	47	-0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00
33	6	0.02	-0.01	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.03
34	6	-0.02	-0.04	0.21	-0.01	-0.01	0.02	-0.02	-0.02	0.04
35	6	-0.01	-0.03	0.16	-0.01	0.00	0.01	-0.02	-0.01	0.03
36	6	0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	6	0.05	0.02	-0.11	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.02
38	6	0.04	0.02	-0.14	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.02
39	6	0.01	0.02	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
40	6	-0.05	-0.02	0.07	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.01
41	6	-0.09	-0.03	0.18	-0.01	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.03
42	6	-0.05	0.01	0.09	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.01
43	6	0.01	0.05	-0.05	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
44	6	0.04	0.08	-0.12	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.02
45	6	0.06	0.07	-0.11	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02
46	6	0.05	0.03	-0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00
47	6	0.03	0.04	-0.08	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
48	6	0.05	0.03	-0.06	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
49	6	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.01
50	1	-0.05	-0.07	0.33	-0.01	-0.01	0.03	-0.02	-0.02	0.06
51	1	-0.03	-0.06	0.25	-0.01	0.00	0.02	-0.02	-0.01	0.04
52	1	0.07	0.01	-0.13	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.03
53	1	0.05	0.03	-0.19	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.03
54	1	-0.07	-0.05	0.11	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.02
55	1	-0.15	-0.07	0.30	-0.01	-0.01	0.04	-0.01	-0.02	0.05
56	1	-0.08	0.01	0.14	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.02
57	1	0.05	0.09	-0.14	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.03
58	1	0.07	0.09	-0.11	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.02
59	8	0.01	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.01	-0.03
60	6	-0.02	-0.03	-0.13	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.02
61	1	0.01	-0.07	-0.37	0.00	-0.01	-0.06	-0.11	0.04	0.56
62	1	0.13	-0.08	0.00	0.02	-0.01	0.01	-0.39	-0.05	-0.37
63	1	-0.25	0.06	-0.09	-0.06	0.01	0.00	0.57	-0.03	-0.16

		A			A			A		
Frequencies	--	145.5984			164.3799			183.3756		
Red. masses	--	7.8946			7.4972			5.4257		
Frc consts	--	0.0986			0.1194			0.1075		
IR Inten	--	3.6568			10.8764			1.2211		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.09	0.08	-0.06	-0.09	-0.04	0.05	0.10	-0.04	-0.12
2	6	0.08	0.07	-0.02	-0.05	-0.05	0.01	0.01	-0.03	-0.04
3	6	0.03	0.05	0.05	0.01	-0.04	-0.05	-0.11	-0.02	0.08
4	6	0.00	0.04	0.06	0.01	-0.03	-0.06	-0.07	-0.02	0.04
5	6	-0.04	0.00	0.11	0.06	0.00	-0.11	-0.16	0.00	0.13
6	6	-0.02	-0.01	0.04	0.01	0.01	-0.03	-0.01	0.02	0.00
7	6	0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.00	0.04	0.10	0.01	-0.09
8	6	0.05	-0.02	-0.11	-0.07	0.02	0.11	0.14	0.03	-0.11
9	6	0.01	-0.01	-0.12	0.00	0.01	0.08	0.02	0.02	0.05
10	6	-0.09	0.02	-0.02	0.11	-0.01	-0.02	-0.10	-0.02	0.16
11	6	-0.09	0.04	0.02	0.08	-0.03	-0.03	-0.02	-0.03	0.05
12	6	-0.07	0.06	0.01	0.05	-0.04	-0.01	0.00	-0.05	0.02
13	6	0.02	0.09	-0.04	-0.05	-0.06	0.06	0.12	-0.05	-0.11
14	6	0.06	0.07	-0.03	-0.08	-0.05	0.05	0.12	-0.04	-0.14
15	6	-0.02	0.03	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.07	-0.01	-0.06



16	6	0.01	0.05	0.01	-0.03	-0.04	0.01	0.07	-0.02	-0.08
17	6	0.13	0.00	-0.10	-0.08	0.05	0.03	0.01	0.01	0.01
18	1	0.10	0.08	-0.03	-0.05	-0.05	0.02	-0.02	-0.04	-0.02
19	1	0.01	0.05	0.08	0.05	-0.03	-0.10	-0.22	-0.02	0.19
20	1	-0.07	-0.01	0.18	0.11	0.01	-0.19	-0.30	0.00	0.26
21	1	-0.02	-0.04	0.05	0.02	0.03	-0.04	-0.03	0.03	0.02
22	1	0.11	-0.05	-0.17	-0.13	0.04	0.17	0.21	0.05	-0.18
23	1	0.05	-0.02	-0.18	-0.01	0.02	0.12	0.00	0.02	0.09
24	1	-0.14	0.03	-0.01	0.18	-0.02	-0.06	-0.21	-0.03	0.31
25	1	-0.11	0.07	0.02	0.08	-0.04	-0.03	-0.05	-0.07	0.10
26	1	0.05	0.11	-0.06	-0.08	-0.08	0.08	0.13	-0.06	-0.12
27	6	0.01	0.05	0.01	0.07	0.08	0.02	-0.03	-0.01	0.00
28	1	-0.04	0.16	0.01	0.12	-0.01	0.04	-0.05	0.04	0.01
29	1	-0.02	-0.03	0.10	0.13	0.14	-0.01	-0.09	-0.04	0.00
30	1	0.00	0.06	0.01	0.06	0.16	-0.01	-0.01	-0.06	0.00
31	8	0.27	-0.13	-0.22	-0.17	0.13	0.01	-0.09	0.10	0.20
32	47	-0.03	-0.01	0.01	0.04	0.05	-0.05	0.00	0.01	-0.01
33	6	-0.05	-0.04	0.04	-0.08	-0.06	0.04	-0.03	-0.01	0.03
34	6	-0.04	-0.02	0.00	-0.08	-0.05	0.02	-0.03	-0.01	0.02
35	6	-0.02	0.00	-0.05	-0.06	-0.02	-0.02	-0.02	0.00	-0.01
36	6	-0.01	0.00	-0.04	-0.04	0.00	-0.05	-0.01	0.01	-0.03
37	6	0.00	0.02	-0.04	-0.02	0.04	-0.07	0.00	0.02	-0.05
38	6	0.00	0.00	0.01	0.01	0.03	0.00	0.00	0.01	0.00
39	6	0.00	-0.01	0.02	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.03
40	6	0.01	-0.02	0.07	0.03	-0.04	0.12	-0.01	-0.01	0.07
41	6	0.03	-0.03	0.03	0.07	-0.06	0.07	0.02	-0.01	0.02
42	6	0.04	-0.02	-0.05	0.09	-0.06	-0.07	0.03	0.00	-0.06
43	6	0.02	-0.02	-0.06	0.04	-0.05	-0.10	0.01	0.00	-0.04
44	6	0.01	-0.02	-0.06	0.02	-0.07	-0.10	0.00	-0.01	-0.03
45	6	-0.02	-0.04	-0.01	-0.04	-0.09	-0.02	-0.03	-0.03	0.02
46	6	-0.03	-0.04	0.02	-0.07	-0.05	0.00	-0.03	-0.01	0.02
47	6	0.00	-0.01	-0.02	0.01	-0.03	-0.05	-0.01	0.00	-0.01
48	6	-0.01	-0.02	-0.02	-0.04	-0.03	-0.04	-0.02	0.00	0.00
49	6	-0.04	-0.04	0.13	-0.03	0.02	0.12	-0.01	0.03	0.01
50	1	-0.06	-0.02	0.00	-0.10	-0.06	0.05	-0.03	-0.02	0.03
51	1	-0.02	0.02	-0.07	-0.07	0.00	-0.03	-0.02	0.01	-0.03
52	1	0.00	0.04	-0.06	-0.02	0.08	-0.10	0.00	0.04	-0.09
53	1	0.00	0.01	0.04	0.01	0.04	0.02	0.00	0.02	0.00
54	1	0.00	-0.03	0.12	0.03	-0.03	0.22	-0.02	-0.02	0.12
55	1	0.03	-0.04	0.06	0.09	-0.08	0.13	0.02	-0.01	0.03
56	1	0.06	-0.02	-0.08	0.13	-0.09	-0.12	0.06	0.00	-0.10
57	1	0.03	-0.02	-0.08	0.04	-0.08	-0.13	0.01	-0.01	-0.05
58	1	-0.04	-0.04	0.02	-0.07	-0.11	-0.01	-0.04	-0.03	0.03
59	8	0.00	0.00	0.37	-0.03	0.13	0.32	-0.03	0.07	0.01
60	6	-0.06	-0.05	-0.06	0.07	0.01	-0.01	0.07	0.02	0.00
61	1	-0.04	-0.11	-0.28	0.10	0.05	-0.07	0.09	0.07	-0.02
62	1	0.05	-0.12	0.01	0.11	-0.10	-0.02	0.09	-0.02	0.01
63	1	-0.25	0.09	-0.06	0.06	0.07	-0.03	0.07	0.02	0.00

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies	--	186.8856			199.4205			235.5616		
Red. masses	--	4.9267			4.3747			4.5581		
Frc consts	--	0.1014			0.1025			0.1490		
IR Inten	--	3.2622			1.4830			23.2454		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.03	-0.05	-0.01	0.00	0.02
2	6	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.02	0.00	-0.02
3	6	-0.01	0.00	0.01	-0.06	-0.03	0.03	0.02	0.00	-0.02
4	6	-0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.03	-0.02	-0.02	0.00	0.04
5	6	-0.02	0.00	0.02	-0.05	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.02	0.04	-0.01	-0.02
7	6	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.02	-0.03	-0.01	-0.01	0.03
8	6	0.02	0.00	-0.02	0.01	0.04	0.02	0.04	-0.02	-0.03

9	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.07	0.01	-0.02	-0.02
10	6	-0.02	0.00	0.02	0.03	-0.01	0.05	-0.03	-0.01	0.03
11	6	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.02	-0.01	-0.04	0.00	0.05
12	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.05	0.02	0.07	0.02	-0.05
13	6	0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.06	0.00	0.08	0.02	-0.06
14	6	0.02	0.00	-0.02	0.01	-0.04	-0.06	-0.01	0.01	0.04
15	6	0.01	0.00	-0.01	0.04	-0.01	-0.05	-0.06	-0.01	0.08
16	6	0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.03	-0.06	-0.06	0.00	0.09
17	6	0.00	0.00	0.01	0.01	0.08	-0.06	-0.03	-0.03	0.04
18	1	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.03	0.02	0.05	0.00	-0.06
19	1	-0.02	0.00	0.02	-0.10	-0.03	0.08	0.07	0.00	-0.07
20	1	-0.04	0.00	0.04	-0.10	0.01	0.01	0.08	-0.01	-0.04
21	1	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.03	-0.01	0.10	-0.01	-0.07
22	1	0.03	0.00	-0.03	-0.01	0.06	0.04	0.10	-0.03	-0.09
23	1	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.04	0.12	0.04	-0.02	-0.05
24	1	-0.03	0.00	0.04	0.02	-0.02	0.09	-0.03	0.00	0.01
25	1	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	-0.06	0.06	0.15	0.03	-0.13
26	1	0.02	0.00	-0.02	-0.04	-0.08	0.02	0.16	0.05	-0.12
27	6	0.00	-0.01	0.00	0.13	0.20	0.05	-0.12	-0.14	-0.05
28	1	0.00	-0.01	0.00	0.18	0.17	0.10	-0.17	-0.11	-0.10
29	1	-0.01	-0.01	-0.01	0.19	0.19	0.12	-0.19	-0.13	-0.11
30	1	0.00	-0.01	0.00	0.11	0.35	0.00	-0.11	-0.28	0.00
31	8	-0.02	0.02	0.04	-0.06	0.14	-0.10	-0.03	-0.03	0.12
32	47	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.07	-0.04
33	6	0.02	0.03	-0.18	0.03	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01
34	6	-0.02	0.00	-0.05	0.03	0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.03
35	6	-0.06	-0.04	0.12	0.04	0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.02
36	6	-0.05	-0.02	0.07	0.03	-0.01	0.02	0.00	-0.03	0.06
37	6	-0.08	-0.03	0.19	0.02	-0.03	0.03	0.02	-0.01	-0.02
38	6	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.02	-0.01	-0.06
39	6	0.05	0.05	-0.14	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.03	0.02
40	6	0.08	0.05	-0.16	-0.01	0.00	-0.07	0.02	-0.01	-0.06
41	6	0.02	-0.02	0.05	-0.04	0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.02
42	6	-0.04	-0.09	0.19	-0.05	0.02	0.04	-0.02	-0.02	0.04
43	6	-0.02	-0.04	0.04	-0.01	0.01	0.05	-0.01	-0.02	0.06
44	6	-0.03	-0.06	0.04	0.01	0.03	0.02	0.05	0.03	-0.08
45	6	0.00	-0.01	-0.12	0.05	0.04	-0.01	0.06	0.03	-0.11
46	6	0.02	0.03	-0.18	0.04	0.01	0.02	0.01	-0.01	0.03
47	6	0.02	0.02	-0.11	0.00	-0.01	0.04	-0.03	-0.05	0.12
48	6	0.00	0.02	-0.11	0.03	-0.01	0.03	-0.02	-0.04	0.11
49	6	0.03	0.03	-0.02	-0.03	-0.08	0.03	-0.02	-0.03	0.03
50	1	-0.03	0.00	-0.04	0.03	0.03	-0.03	0.02	0.02	-0.08
51	1	-0.11	-0.08	0.28	0.04	0.02	-0.05	0.02	0.02	-0.09
52	1	-0.15	-0.07	0.39	0.03	-0.05	0.03	0.04	0.00	-0.10
53	1	-0.01	0.02	0.03	0.00	-0.04	-0.01	0.05	0.02	-0.15
54	1	0.12	0.09	-0.25	-0.01	-0.01	-0.13	0.04	0.01	-0.17
55	1	0.02	-0.04	0.11	-0.05	0.02	-0.07	0.00	0.00	-0.07
56	1	-0.09	-0.16	0.38	-0.07	0.03	0.07	-0.02	0.00	0.03
57	1	-0.07	-0.11	0.14	0.01	0.05	0.01	0.10	0.06	-0.20
58	1	-0.01	-0.02	-0.13	0.07	0.06	-0.04	0.12	0.07	-0.21
59	8	0.07	0.03	0.16	0.02	-0.17	0.06	0.01	-0.07	0.10
60	6	0.03	0.04	0.04	-0.22	-0.08	-0.02	-0.18	-0.03	0.01
61	1	0.02	0.05	0.13	-0.28	-0.23	-0.02	-0.24	-0.16	0.03
62	1	-0.02	0.07	0.00	-0.27	0.00	-0.03	-0.24	0.05	-0.01
63	1	0.10	-0.01	0.04	-0.28	-0.01	-0.03	-0.21	0.02	-0.01

		22			23			24		
		A			A			A		
Frequencies	--	243.2283			248.1164			272.7830		
Red. masses	--	4.2704			4.4858			4.4216		
Frc consts	--	0.1488			0.1627			0.1939		
IR Inten	--	1.5437			2.5328			1.9686		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	-0.01	0.01	0.02	-0.02	0.01	0.04	-0.10	0.00	0.09

2	6	-0.03	0.01	0.04	-0.03	0.02	0.05	0.09	-0.01	-0.10
3	6	0.00	0.01	-0.01	0.02	0.02	0.01	0.08	0.00	-0.09
4	6	0.06	0.01	-0.05	0.08	0.02	-0.05	-0.05	0.01	0.08
5	6	-0.03	0.00	0.04	-0.02	-0.01	0.06	-0.10	0.00	0.13
6	6	-0.05	0.00	0.06	-0.05	-0.02	0.08	0.04	-0.01	-0.01
7	6	0.03	0.00	-0.04	0.05	-0.01	-0.03	0.14	0.00	-0.12
8	6	-0.04	-0.01	0.03	-0.03	-0.03	0.03	0.08	-0.02	-0.08
9	6	-0.02	0.00	0.01	-0.02	-0.02	0.00	-0.13	-0.02	0.11
10	6	0.02	0.00	-0.03	0.01	0.00	-0.03	-0.07	0.00	0.06
11	6	0.05	0.01	-0.05	0.05	0.01	-0.05	0.10	0.02	-0.09
12	6	-0.10	-0.01	0.08	-0.09	0.00	0.09	0.10	0.03	-0.09
13	6	-0.10	-0.01	0.10	-0.09	0.01	0.11	-0.05	0.02	0.07
14	6	0.03	0.01	-0.02	0.03	0.02	-0.01	-0.11	0.01	0.14
15	6	0.11	0.01	-0.11	0.12	0.01	-0.11	0.08	0.01	-0.07
16	6	0.11	0.01	-0.11	0.13	0.02	-0.10	-0.04	0.01	0.07
17	6	0.00	-0.01	0.01	-0.03	-0.03	0.04	-0.05	-0.01	0.02
18	1	-0.07	0.01	0.09	-0.08	0.02	0.10	0.23	0.00	-0.25
19	1	-0.05	0.01	0.06	-0.03	0.02	0.05	0.19	0.00	-0.22
20	1	-0.10	0.00	0.12	-0.09	-0.01	0.16	-0.20	-0.01	0.24
21	1	-0.16	-0.01	0.16	-0.17	-0.03	0.20	0.03	-0.01	0.00
22	1	-0.12	-0.01	0.11	-0.11	-0.04	0.11	0.10	-0.03	-0.10
23	1	-0.07	-0.01	0.05	-0.08	-0.03	0.04	-0.30	-0.04	0.27
24	1	-0.01	0.01	-0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.15
25	1	-0.22	-0.02	0.19	-0.22	-0.01	0.20	0.16	0.05	-0.17
26	1	-0.20	-0.03	0.18	-0.18	-0.01	0.18	-0.07	0.04	0.08
27	6	0.00	-0.02	0.00	-0.10	-0.13	-0.04	0.01	0.01	0.01
28	1	0.01	-0.03	0.00	-0.14	-0.12	-0.09	0.04	-0.04	0.02
29	1	0.01	-0.01	-0.01	-0.14	-0.10	-0.11	0.04	0.03	-0.01
30	1	0.00	-0.02	0.00	-0.10	-0.25	0.00	0.01	0.03	-0.01
31	8	0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.05	0.05	-0.04	-0.03	-0.09
32	47	0.00	-0.01	0.01	0.03	0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00
33	6	-0.01	0.01	-0.05	0.00	0.00	0.05	0.02	0.02	-0.06
34	6	-0.01	0.01	-0.06	0.01	0.00	0.04	0.00	0.00	0.02
35	6	-0.02	-0.01	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	0.06
36	6	-0.05	-0.02	0.09	0.04	0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00
37	6	0.00	0.03	-0.06	0.01	-0.03	0.04	0.01	0.01	-0.04
38	6	0.03	0.04	-0.10	-0.01	-0.04	0.06	0.00	0.01	-0.02
39	6	-0.02	-0.01	0.05	0.02	-0.01	-0.04	-0.01	-0.01	0.04
40	6	0.03	0.02	-0.04	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.05
41	6	0.02	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.03
42	6	0.00	-0.02	0.03	-0.01	0.01	-0.01	0.02	0.01	-0.04
43	6	-0.03	-0.03	0.07	0.02	0.01	-0.04	-0.01	-0.01	0.02
44	6	0.04	0.03	-0.13	-0.02	-0.02	0.08	-0.02	-0.02	0.04
45	6	0.04	0.04	-0.16	-0.01	-0.02	0.09	0.00	-0.01	0.00
46	6	-0.03	-0.01	0.02	0.03	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.04
47	6	-0.06	-0.05	0.17	0.05	0.02	-0.10	-0.01	-0.01	0.02
48	6	-0.07	-0.05	0.16	0.05	0.03	-0.09	0.00	0.00	-0.01
49	6	0.02	0.03	-0.03	-0.03	-0.03	0.04	0.02	0.01	-0.03
50	1	0.01	0.03	-0.13	0.00	-0.01	0.08	-0.01	-0.01	0.05
51	1	-0.01	0.01	-0.06	0.02	0.00	0.01	-0.03	-0.04	0.12
52	1	0.03	0.07	-0.19	-0.01	-0.07	0.12	0.02	0.02	-0.09
53	1	0.08	0.09	-0.27	-0.05	-0.08	0.17	0.01	0.01	-0.05
54	1	0.07	0.06	-0.15	-0.04	-0.05	0.07	-0.02	-0.02	0.07
55	1	0.05	0.02	-0.07	-0.04	-0.02	0.04	0.03	0.02	-0.07
56	1	0.02	-0.02	-0.02	-0.03	0.01	0.03	0.03	0.02	-0.09
57	1	0.11	0.07	-0.29	-0.06	-0.03	0.17	-0.03	-0.03	0.08
58	1	0.11	0.08	-0.28	-0.04	-0.04	0.15	-0.01	-0.02	0.00
59	8	0.02	0.04	0.02	-0.02	-0.05	0.02	0.04	-0.01	0.01
60	6	0.08	0.03	0.01	-0.14	-0.03	-0.01	-0.02	0.02	0.01
61	1	0.10	0.08	0.02	-0.19	-0.13	-0.01	-0.03	0.00	0.04
62	1	0.09	0.02	0.02	-0.18	0.01	-0.03	-0.04	0.06	0.00
63	1	0.09	-0.01	0.02	-0.17	0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.01

		A			A			A		
Frequencies		273.1970			274.7202			281.0684		
Red. masses		4.1237			4.1547			4.4060		
Frc consts		0.1813			0.1847			0.2051		
IR Inten		3.6750			0.7777			0.6538		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.01	0.01	-0.11	-0.03	0.15	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.05	0.00	0.06	-0.08	-0.02	0.09	-0.01	0.00	0.01
3	6	0.01	0.00	-0.01	0.12	0.00	-0.14	0.00	0.00	0.00
4	6	0.05	0.00	-0.05	0.11	0.00	-0.12	0.01	0.00	-0.01
5	6	0.03	0.00	-0.04	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.05	0.00	0.04	-0.13	0.01	0.13	0.00	0.00	0.01
7	6	-0.05	0.00	0.04	-0.03	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.01	0.00	0.08	0.02	-0.09	0.00	0.00	0.00
9	6	0.05	0.01	-0.05	0.05	0.02	-0.06	0.01	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.01	0.09	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.05	0.00	0.04	-0.07	0.00	0.04	0.00	0.00	0.01
12	6	-0.02	-0.01	0.01	0.04	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00
13	6	0.04	0.00	-0.05	0.09	0.01	-0.10	0.01	0.00	-0.01
14	6	0.04	0.00	-0.04	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	-0.03	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.03	0.00	-0.03	0.05	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	-0.01	0.02	-0.07	-0.04	0.09	-0.01	0.00	0.00
18	1	-0.12	-0.01	0.13	-0.17	-0.03	0.19	-0.01	0.00	0.01
19	1	-0.01	0.00	0.01	0.18	0.00	-0.22	0.00	0.00	0.00
20	1	0.04	0.01	-0.06	-0.08	0.02	0.06	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.08	0.00	0.08	-0.27	0.01	0.27	-0.01	0.00	0.01
22	1	0.01	0.01	-0.01	0.17	0.03	-0.17	0.01	0.00	-0.01
23	1	0.12	0.02	-0.12	0.11	0.03	-0.12	0.01	0.00	-0.01
24	1	0.01	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.17	0.00	0.00	0.01
25	1	-0.03	-0.01	0.03	0.10	0.01	-0.10	0.00	0.00	0.00
26	1	0.06	0.00	-0.06	0.13	0.03	-0.14	0.01	0.00	-0.01
27	6	0.03	0.00	0.02	0.12	-0.01	0.07	-0.01	-0.01	0.00
28	1	0.05	-0.02	0.04	0.23	-0.12	0.17	-0.01	-0.01	-0.01
29	1	0.03	0.00	0.01	0.18	0.06	0.03	-0.01	0.00	-0.01
30	1	0.04	0.01	0.00	0.16	0.10	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
31	8	0.00	-0.01	0.01	-0.06	-0.05	-0.06	-0.01	0.00	0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.05	0.07	-0.17	-0.02	-0.02	0.05	-0.01	-0.04	0.05
34	6	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.05	-0.05	0.18
35	6	-0.04	-0.05	0.17	0.01	0.01	-0.04	0.02	0.03	-0.07
36	6	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	0.06	-0.19
37	6	0.03	0.02	-0.12	-0.01	-0.01	0.03	0.02	0.04	-0.08
38	6	0.01	0.01	-0.06	0.00	0.00	0.01	-0.06	-0.02	0.17
39	6	-0.04	-0.03	0.10	0.01	0.01	-0.03	-0.05	-0.01	0.13
40	6	-0.04	-0.04	0.13	0.01	0.01	-0.04	0.03	0.04	-0.05
41	6	0.04	0.01	-0.08	-0.01	0.00	0.02	0.06	0.06	-0.14
42	6	0.05	0.01	-0.13	-0.01	0.00	0.03	-0.03	-0.02	0.09
43	6	-0.02	-0.03	0.04	0.01	0.01	-0.02	-0.06	-0.03	0.15
44	6	-0.05	-0.06	0.13	0.01	0.02	-0.04	-0.03	-0.01	0.04
45	6	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.04	-0.16
46	6	0.03	0.04	-0.12	-0.01	-0.01	0.04	0.03	0.03	-0.13
47	6	-0.03	-0.02	0.06	0.01	0.01	-0.02	-0.04	-0.01	0.08
48	6	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	-0.11
49	6	0.04	0.04	-0.07	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.05	0.04
50	1	-0.02	-0.02	0.12	0.01	0.01	-0.04	-0.13	-0.12	0.41
51	1	-0.08	-0.10	0.34	0.02	0.03	-0.09	0.01	0.02	-0.05
52	1	0.07	0.06	-0.25	-0.02	-0.02	0.07	0.02	0.05	-0.10
53	1	0.04	0.04	-0.16	-0.01	-0.01	0.03	-0.11	-0.06	0.32
54	1	-0.06	-0.06	0.21	0.01	0.01	-0.06	0.06	0.07	-0.16
55	1	0.08	0.03	-0.18	-0.03	-0.01	0.06	0.13	0.12	-0.35
56	1	0.10	0.05	-0.27	-0.03	-0.01	0.07	-0.03	-0.03	0.12
57	1	-0.10	-0.09	0.24	0.03	0.03	-0.07	-0.03	-0.04	0.06

58	1	-0.04	-0.05	0.02	0.01	0.01	0.00	0.06	0.06	-0.22
59	8	0.10	-0.03	0.05	-0.03	0.01	-0.02	-0.03	-0.01	0.01
60	6	-0.10	0.06	0.03	0.01	-0.01	0.00	0.09	-0.07	-0.02
61	1	-0.16	-0.03	0.13	0.03	0.00	-0.03	0.13	0.01	-0.07
62	1	-0.18	0.20	0.01	0.03	-0.04	0.00	0.14	-0.17	-0.02
63	1	-0.09	0.01	0.04	0.01	0.00	-0.01	0.10	-0.03	-0.04
			28			29			30	
			A			A			A	
Frequencies	--		309.2693			318.4931			347.4529	
Red. masses	--		5.0890			6.1146			5.5691	
Frc consts	--		0.2868			0.3654			0.3961	
IR Inten	--		0.8428			6.9367			1.1241	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.07	-0.06	0.06	0.04	-0.03	0.04	-0.02	0.14	0.09
2	6	0.03	-0.03	-0.04	0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.12	0.11
3	6	-0.04	0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.09	0.00	0.03
4	6	-0.09	0.01	0.00	-0.04	0.01	0.00	-0.02	-0.09	-0.08
5	6	-0.08	0.06	-0.04	-0.04	0.03	-0.02	-0.07	-0.05	-0.07
6	6	-0.03	0.06	-0.10	-0.02	0.03	-0.04	-0.11	-0.03	-0.04
7	6	-0.04	0.06	-0.07	-0.02	0.03	-0.03	-0.07	0.00	-0.08
8	6	-0.08	0.07	-0.03	-0.04	0.03	-0.01	0.05	0.11	-0.02
9	6	-0.07	0.07	-0.03	-0.03	0.03	-0.02	0.09	0.06	0.12
10	6	-0.01	0.03	-0.07	-0.01	0.01	-0.04	0.07	-0.06	0.13
11	6	-0.03	0.00	-0.07	-0.02	0.00	-0.03	0.02	-0.13	-0.03
12	6	-0.06	-0.04	-0.04	-0.03	-0.02	-0.02	0.03	-0.07	-0.07
13	6	-0.07	-0.04	0.00	-0.03	-0.02	0.00	-0.06	-0.05	0.00
14	6	-0.02	-0.06	0.04	0.00	-0.03	0.02	-0.11	0.00	-0.01
15	6	-0.04	0.01	-0.05	-0.02	0.00	-0.03	-0.06	-0.09	-0.07
16	6	-0.04	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.08	-0.08	-0.06
17	6	0.12	-0.09	0.12	0.06	-0.05	0.07	0.04	0.16	0.05
18	1	0.03	-0.07	-0.12	0.00	-0.04	-0.05	0.02	0.14	0.15
19	1	-0.03	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.22	-0.06	0.08
20	1	-0.09	0.06	-0.06	-0.04	0.03	-0.03	-0.10	-0.04	-0.08
21	1	0.01	0.06	-0.14	0.00	0.03	-0.06	-0.16	-0.05	0.01
22	1	-0.11	0.07	0.01	-0.06	0.03	0.00	0.06	0.25	-0.06
23	1	-0.08	0.08	0.01	-0.04	0.04	0.00	0.12	0.12	0.19
24	1	0.03	0.02	-0.08	0.01	0.01	-0.04	0.12	-0.11	0.25
25	1	-0.05	-0.04	-0.03	-0.03	-0.02	-0.01	0.04	-0.04	-0.15
26	1	-0.07	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.06	-0.09	0.00
27	6	0.23	-0.07	0.17	0.10	-0.07	0.08	-0.08	0.03	-0.09
28	1	0.30	0.02	0.37	0.12	-0.01	0.17	-0.13	-0.01	-0.21
29	1	0.07	-0.15	0.16	-0.01	-0.11	0.05	-0.08	0.11	-0.20
30	1	0.38	-0.04	0.02	0.18	-0.09	0.02	-0.10	-0.14	-0.01
31	8	0.11	-0.08	0.15	0.05	-0.04	0.09	0.22	0.02	0.08
32	47	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00
33	6	-0.02	0.04	0.02	0.05	-0.11	-0.04	-0.03	-0.01	-0.04
34	6	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.01	-0.06	-0.04	0.00	-0.03
35	6	0.01	-0.01	-0.02	-0.02	0.03	0.04	-0.03	0.01	0.01
36	6	0.03	-0.02	-0.03	-0.05	0.04	0.06	0.03	0.00	0.02
37	6	0.02	-0.04	-0.01	-0.04	0.10	0.03	0.03	-0.01	0.01
38	6	0.01	-0.06	0.02	-0.02	0.12	-0.04	0.04	-0.01	-0.01
39	6	0.01	-0.05	0.00	-0.03	0.10	0.00	0.03	-0.02	0.00
40	6	0.02	-0.04	-0.03	-0.04	0.09	0.07	-0.03	-0.03	0.00
41	6	0.01	-0.04	-0.02	-0.02	0.09	0.04	-0.04	0.01	-0.02
42	6	0.01	-0.04	0.02	-0.02	0.08	-0.04	-0.02	0.04	-0.01
43	6	0.02	-0.03	0.01	-0.05	0.05	-0.01	0.02	0.03	0.02
44	6	0.04	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.02	0.01	0.01	0.03
45	6	0.03	0.00	-0.01	-0.07	-0.01	0.02	0.02	0.01	-0.01
46	6	0.01	0.03	0.00	-0.02	-0.07	-0.01	0.03	-0.01	-0.02
47	6	0.02	-0.02	0.00	-0.04	0.04	-0.01	0.04	0.00	0.01
48	6	0.02	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.02	0.04	0.00	0.00
49	6	-0.04	0.08	0.01	0.08	-0.21	0.00	-0.04	-0.02	-0.02
50	1	0.02	-0.01	0.06	-0.06	0.01	-0.12	-0.04	0.00	-0.04

51	1	0.01	-0.01	-0.03	-0.02	0.02	0.05	-0.05	0.05	0.03
52	1	0.02	-0.05	-0.01	-0.04	0.11	0.03	0.04	-0.02	0.00
53	1	0.00	-0.06	0.06	0.00	0.13	-0.10	0.05	0.00	-0.03
54	1	0.02	-0.04	-0.05	-0.05	0.08	0.11	-0.05	-0.07	0.00
55	1	0.00	-0.04	-0.03	-0.01	0.09	0.07	-0.07	0.02	-0.04
56	1	-0.01	-0.03	0.05	0.01	0.06	-0.08	-0.03	0.09	-0.02
57	1	0.04	0.00	-0.01	-0.09	-0.02	0.04	0.01	-0.02	0.05
58	1	0.03	-0.01	-0.03	-0.05	0.02	0.04	0.03	0.02	0.00
59	8	-0.05	0.09	0.00	0.11	-0.23	0.03	-0.06	0.03	0.03
60	6	-0.10	0.10	0.00	0.17	-0.25	0.00	0.02	-0.03	0.01
61	1	-0.13	0.03	0.01	0.21	-0.16	-0.02	0.05	0.04	0.01
62	1	-0.13	0.14	-0.01	0.21	-0.33	0.01	0.04	-0.05	0.02
63	1	-0.12	0.12	0.00	0.19	-0.27	0.00	0.04	-0.07	0.02
			31			32			33	
			A			A			A	
Frequencies	--		349.4437			411.2602			415.6416	
Red. masses	--		5.5250			4.3652			4.5300	
Frc consts	--		0.3975			0.4350			0.4611	
IR Inten	--		1.6142			0.5961			0.3927	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.05	-0.03	-0.06	0.01	0.07	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.01	-0.04	-0.03	0.09	-0.04	0.06	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.03	0.00	-0.01	0.15	-0.08	0.01	0.00	0.00	0.00
4	6	0.01	0.03	0.02	0.00	-0.08	0.12	0.00	0.00	0.00
5	6	0.02	0.02	0.02	-0.04	-0.02	0.16	0.00	0.00	0.00
6	6	0.03	0.01	0.01	0.15	-0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00
7	6	0.02	0.00	0.03	0.03	0.05	-0.09	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.01	-0.03	0.01	-0.09	0.11	0.10	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.03	-0.02	-0.04	0.03	0.13	0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.02	0.02	-0.04	0.10	0.06	-0.06	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.01	0.04	0.01	-0.11	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.01	0.02	0.02	-0.15	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00
13	6	0.02	0.01	0.00	0.06	0.01	-0.16	0.00	0.00	0.00
14	6	0.04	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.00
15	6	0.02	0.03	0.02	-0.02	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
16	6	0.03	0.02	0.02	0.00	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.01	-0.05	-0.01	-0.09	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.01	-0.05	-0.05	0.15	0.01	0.08	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.07	0.02	-0.03	0.27	-0.09	-0.09	0.01	0.00	0.00
20	1	0.03	0.01	0.02	-0.15	-0.01	0.21	0.00	0.00	0.01
21	1	0.05	0.02	0.00	0.25	-0.09	-0.17	0.01	0.00	0.00
22	1	-0.02	-0.08	0.02	-0.22	0.16	0.23	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.04	-0.04	-0.06	0.06	0.14	0.01	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.04	0.04	-0.08	0.29	0.03	-0.13	0.01	0.00	0.00
25	1	-0.01	0.01	0.05	-0.23	-0.04	0.11	0.00	0.00	0.00
26	1	0.02	0.03	0.00	0.12	0.04	-0.21	0.00	0.00	-0.01
27	6	0.03	-0.01	0.03	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
28	1	0.04	0.00	0.07	0.03	-0.14	-0.01	0.00	0.00	0.00
29	1	0.02	-0.04	0.06	0.05	0.06	-0.07	0.00	0.00	0.00
30	1	0.03	0.04	0.00	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
31	8	-0.07	0.00	-0.02	-0.06	-0.04	-0.07	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	-0.10	-0.05	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.08
34	6	-0.13	-0.01	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.10	-0.01
35	6	-0.08	0.04	0.03	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.12	-0.13
36	6	0.09	0.01	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.05
37	6	0.10	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.11	0.13
38	6	0.11	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.01	-0.14
39	6	0.08	-0.07	0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	0.09	-0.06
40	6	-0.09	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.06	0.15
41	6	-0.14	0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.09	0.08	0.05
42	6	-0.06	0.14	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.09	0.06	-0.07
43	6	0.07	0.08	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.02	0.08

44	6	0.05	0.02	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.01	0.12
45	6	0.07	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.15
46	6	0.08	-0.04	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.10
47	6	0.12	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.02	-0.01
48	6	0.12	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	-0.02
49	6	-0.14	-0.07	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.08
50	1	-0.15	-0.01	-0.13	-0.01	0.00	0.00	0.14	-0.11	0.01
51	1	-0.16	0.16	0.09	0.00	0.00	0.01	0.13	-0.10	-0.27
52	1	0.12	-0.05	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.10	0.24
53	1	0.14	-0.01	-0.08	0.00	0.00	0.01	0.07	-0.05	-0.30
54	1	-0.17	-0.20	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.06	0.31
55	1	-0.22	0.06	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.12	0.09	0.04
56	1	-0.11	0.27	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.18	0.02	-0.22
57	1	0.05	-0.05	0.15	0.00	0.00	-0.01	-0.17	-0.04	0.24
58	1	0.09	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.03	0.12	-0.21
59	8	-0.20	0.09	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.05	-0.02
60	6	0.08	-0.09	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	-0.01
61	1	0.15	0.11	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.08
62	1	0.14	-0.16	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.09	-0.03
63	1	0.13	-0.22	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.08	-0.05
			34			35			36	
			A			A			A	
Frequencies	--		422.1264			422.4096			466.5465	
Red. masses	--		5.6753			5.6652			4.5496	
Frc consts	--		0.5958			0.5956			0.5835	
IR Inten	--		0.2282			0.9960			8.4678	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	-0.04	-0.02	0.06	-0.08	-0.04	-0.02	-0.02	0.04
2	6	0.05	-0.07	0.04	0.09	-0.14	0.07	-0.08	-0.05	0.09
3	6	0.02	-0.07	0.07	0.04	-0.13	0.14	0.06	-0.07	-0.09
4	6	0.06	-0.04	0.03	0.12	-0.09	0.05	-0.05	-0.09	-0.08
5	6	0.08	0.01	0.01	0.16	0.02	0.01	-0.11	-0.01	-0.02
6	6	0.01	0.02	0.08	0.02	0.03	0.15	0.08	0.11	0.04
7	6	-0.03	0.05	0.02	-0.06	0.10	0.03	0.16	0.05	0.07
8	6	0.01	0.07	-0.04	0.02	0.13	-0.08	0.02	-0.08	0.01
9	6	-0.03	0.08	-0.03	-0.06	0.16	-0.05	-0.12	-0.04	-0.06
10	6	-0.05	0.05	0.00	-0.10	0.11	0.01	-0.04	0.07	-0.11
11	6	-0.01	0.03	-0.05	-0.02	0.07	-0.10	0.02	0.14	0.05
12	6	0.01	-0.01	-0.06	0.01	-0.02	-0.13	0.03	0.01	0.08
13	6	-0.07	-0.03	0.00	-0.14	-0.06	0.01	-0.03	-0.11	-0.08
14	6	-0.03	-0.04	0.02	-0.06	-0.09	0.03	-0.05	-0.10	-0.07
15	6	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.03	-0.02	0.06	0.07	0.11
16	6	0.00	-0.02	0.00	-0.01	-0.03	0.01	-0.07	-0.07	0.00
17	6	0.03	-0.01	-0.03	0.05	-0.02	-0.07	0.03	0.10	0.01
18	1	0.06	-0.06	0.04	0.13	-0.12	0.09	-0.16	-0.06	0.17
19	1	-0.03	-0.06	0.10	-0.05	-0.12	0.19	0.17	-0.09	-0.14
20	1	0.08	0.03	-0.05	0.17	0.05	-0.10	-0.28	0.05	-0.05
21	1	-0.02	-0.03	0.11	-0.04	-0.06	0.22	0.06	0.28	0.04
22	1	0.05	0.05	-0.08	0.10	0.11	-0.16	0.02	-0.25	0.04
23	1	-0.03	0.08	-0.02	-0.07	0.16	-0.05	-0.22	-0.10	-0.08
24	1	-0.07	0.04	0.06	-0.14	0.08	0.12	-0.08	0.13	-0.25
25	1	0.06	-0.02	-0.07	0.12	-0.04	-0.14	0.12	-0.07	0.24
26	1	-0.09	-0.01	0.02	-0.18	-0.02	0.03	-0.01	-0.21	-0.08
27	6	-0.03	-0.01	-0.02	-0.06	-0.02	-0.04	-0.04	0.07	-0.06
28	1	-0.07	0.05	-0.04	-0.14	0.11	-0.08	-0.06	0.04	-0.13
29	1	-0.07	-0.05	0.01	-0.13	-0.10	0.02	-0.04	0.11	-0.12
30	1	-0.04	-0.05	0.01	-0.08	-0.09	0.02	-0.05	-0.02	-0.01
31	8	-0.01	0.02	-0.01	-0.02	0.05	-0.02	0.14	0.03	0.07
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.02	0.06	0.10	-0.01	-0.03	-0.05	0.00	0.01	0.00
34	6	-0.01	0.18	0.06	0.00	-0.09	-0.03	0.01	0.01	-0.01
35	6	0.00	0.19	-0.03	0.00	-0.09	0.02	0.00	0.00	0.02
36	6	-0.05	0.13	0.07	0.03	-0.06	-0.03	0.01	0.00	0.01

37	6	-0.14	0.04	0.08	0.07	-0.02	-0.04	0.01	-0.01	-0.01
38	6	-0.08	0.07	-0.12	0.04	-0.03	0.06	-0.02	-0.01	0.00
39	6	-0.03	-0.07	-0.09	0.01	0.03	0.05	-0.02	0.01	0.00
40	6	-0.06	-0.14	0.03	0.03	0.07	-0.01	0.00	0.01	0.00
41	6	-0.02	-0.17	-0.06	0.01	0.08	0.03	0.02	0.00	0.00
42	6	0.02	-0.11	-0.11	-0.01	0.05	0.05	0.00	-0.02	0.00
43	6	0.01	-0.12	0.04	0.00	0.06	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01
44	6	0.05	-0.05	0.11	-0.02	0.03	-0.05	-0.01	0.01	-0.01
45	6	0.14	0.01	-0.07	-0.07	-0.01	0.04	0.01	0.00	0.01
46	6	0.08	0.07	-0.02	-0.04	-0.03	0.01	0.01	0.00	0.01
47	6	-0.01	-0.04	-0.01	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.01
48	6	0.02	0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
49	6	0.00	-0.01	0.08	0.00	0.01	-0.04	-0.01	-0.01	0.00
50	1	-0.05	0.18	0.05	0.03	-0.09	-0.03	0.01	0.01	-0.03
51	1	0.05	0.18	-0.14	-0.02	-0.09	0.07	0.00	0.00	0.03
52	1	-0.12	-0.06	0.17	0.06	0.03	-0.09	0.02	-0.02	-0.02
53	1	-0.01	0.16	-0.17	0.01	-0.08	0.09	-0.03	-0.02	-0.01
54	1	-0.08	-0.15	0.15	0.04	0.07	-0.07	0.02	0.03	0.01
55	1	-0.01	-0.17	-0.07	0.01	0.08	0.03	0.03	0.00	-0.01
56	1	0.03	-0.04	-0.21	-0.02	0.02	0.11	0.01	-0.03	0.01
57	1	-0.02	-0.02	0.19	0.01	0.01	-0.09	-0.02	0.03	-0.01
58	1	0.14	-0.01	-0.13	-0.07	0.00	0.07	0.02	0.01	0.02
59	8	-0.01	-0.04	-0.02	0.01	0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00
60	6	0.06	-0.02	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
61	1	0.10	0.03	-0.08	-0.05	-0.01	0.04	0.01	0.00	0.00
62	1	0.10	-0.16	-0.04	-0.05	0.08	0.02	0.01	-0.02	0.00
63	1	0.08	0.07	-0.06	-0.04	-0.03	0.03	0.01	-0.02	0.00

		37			38			39		
		A			A			A		
Frequencies	--	467.5856			483.9782			485.0166		
Red. masses	--	4.4743			5.5386			5.7291		
Frc consts	--	0.5764			0.7644			0.7941		
IR Inten	--	11.0093			0.2765			2.1273		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.06	-0.05	-0.02	0.04	-0.03
2	6	-0.01	-0.01	0.01	0.05	0.05	-0.09	0.04	0.04	-0.06
3	6	0.01	-0.01	-0.01	-0.07	-0.11	0.05	-0.05	-0.08	0.03
4	6	-0.01	-0.01	-0.01	-0.06	-0.15	-0.03	-0.05	-0.10	-0.02
5	6	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.13	-0.10	-0.02	-0.09	-0.07
6	6	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.04	0.04	0.01	-0.03	0.03
7	6	0.02	0.01	0.01	0.05	-0.05	0.10	0.03	-0.03	0.07
8	6	0.00	-0.01	0.00	0.11	-0.01	0.12	0.07	-0.01	0.08
9	6	-0.01	0.00	-0.01	0.08	0.04	0.02	0.05	0.02	0.01
10	6	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.10	0.06	0.00	0.07	0.04
11	6	0.00	0.02	0.00	0.00	0.08	-0.01	0.00	0.05	-0.01
12	6	0.00	0.00	0.01	-0.04	0.17	-0.04	-0.03	0.12	-0.03
13	6	0.00	-0.01	-0.01	-0.10	0.12	-0.06	-0.07	0.09	-0.04
14	6	-0.01	-0.01	-0.01	-0.06	0.07	-0.05	-0.04	0.05	-0.03
15	6	0.01	0.01	0.01	0.07	0.00	0.01	0.05	0.00	0.00
16	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.08	-0.07	0.00	-0.06	-0.05
17	6	0.00	0.01	0.00	-0.07	-0.04	0.03	-0.04	-0.03	0.02
18	1	-0.02	-0.01	0.02	0.18	0.11	-0.10	0.12	0.07	-0.07
19	1	0.02	-0.01	-0.02	-0.06	-0.16	0.19	-0.04	-0.11	0.13
20	1	-0.03	0.01	-0.01	-0.02	-0.10	-0.21	-0.02	-0.07	-0.14
21	1	0.01	0.03	0.01	0.01	0.07	0.03	0.00	0.05	0.02
22	1	0.00	-0.03	0.00	0.11	-0.02	0.12	0.07	-0.01	0.09
23	1	-0.03	-0.01	-0.01	0.05	-0.02	-0.08	0.04	-0.02	-0.06
24	1	-0.01	0.02	-0.03	-0.04	0.09	0.13	-0.03	0.06	0.09
25	1	0.01	-0.01	0.03	-0.03	0.17	-0.05	-0.02	0.12	-0.04
26	1	-0.01	-0.03	-0.01	-0.09	0.09	-0.06	-0.06	0.07	-0.05
27	6	0.00	0.01	-0.01	0.05	0.00	0.06	0.03	-0.01	0.04
28	1	-0.01	0.01	-0.02	0.15	-0.14	0.13	0.10	-0.09	0.09
29	1	0.00	0.01	-0.01	0.18	0.06	0.07	0.11	0.03	0.04



30	1	-0.01	0.00	0.00	0.05	0.18	-0.03	0.04	0.09	-0.02
31	8	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.10	0.04	-0.01	-0.06	0.02
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
33	6	-0.01	-0.04	0.03	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.08	0.01
34	6	-0.05	-0.06	0.10	-0.02	-0.05	0.04	0.04	0.08	-0.07
35	6	-0.02	-0.01	-0.12	0.06	0.06	-0.02	-0.10	-0.09	0.03
36	6	-0.11	0.00	-0.06	0.10	0.05	0.03	-0.16	-0.07	-0.04
37	6	-0.10	0.05	0.05	0.09	0.02	0.07	-0.14	-0.03	-0.10
38	6	0.13	0.04	0.02	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.05	0.01
39	6	0.17	-0.05	-0.03	-0.03	0.08	-0.02	0.05	-0.12	0.03
40	6	-0.03	-0.08	-0.03	-0.08	0.08	-0.01	0.12	-0.12	0.02
41	6	-0.13	0.03	0.01	-0.06	0.01	0.01	0.08	-0.01	-0.02
42	6	-0.03	0.13	-0.03	-0.05	-0.03	-0.06	0.08	0.04	0.08
43	6	0.11	0.06	0.07	-0.03	-0.04	-0.02	0.04	0.07	0.02
44	6	0.06	-0.05	0.04	-0.04	-0.11	-0.04	0.05	0.17	0.06
45	6	-0.11	-0.03	-0.08	0.02	-0.11	-0.04	-0.03	0.17	0.06
46	6	-0.11	-0.03	-0.05	0.02	-0.07	-0.02	-0.02	0.09	0.03
47	6	0.12	-0.03	0.07	-0.04	0.02	0.02	0.06	-0.04	-0.04
48	6	-0.09	-0.03	0.02	0.05	0.01	0.05	-0.08	-0.02	-0.08
49	6	0.09	0.05	0.02	0.04	0.01	-0.02	-0.05	-0.03	0.04
50	1	-0.10	-0.09	0.21	-0.11	-0.06	0.08	0.16	0.09	-0.13
51	1	0.03	-0.02	-0.24	0.04	0.15	-0.06	-0.06	-0.22	0.10
52	1	-0.20	0.15	0.16	0.11	-0.04	0.10	-0.17	0.07	-0.16
53	1	0.21	0.17	0.10	-0.04	-0.03	-0.03	0.06	0.05	0.04
54	1	-0.12	-0.22	-0.06	-0.08	0.08	-0.01	0.11	-0.13	0.01
55	1	-0.24	0.03	0.04	0.01	-0.01	0.06	-0.01	0.01	-0.10
56	1	-0.07	0.27	-0.10	-0.05	0.00	-0.09	0.07	0.00	0.14
57	1	0.13	-0.22	0.06	-0.04	-0.11	-0.03	0.06	0.18	0.05
58	1	-0.15	-0.10	-0.12	0.03	-0.09	-0.03	-0.04	0.14	0.04
59	8	0.15	-0.05	-0.03	0.03	0.05	0.00	-0.04	-0.07	0.00
60	6	-0.02	0.09	0.00	-0.03	0.03	0.01	0.05	-0.06	-0.01
61	1	-0.07	-0.03	0.00	-0.08	-0.05	0.04	0.11	0.05	-0.06
62	1	-0.06	0.14	-0.02	-0.08	0.13	0.00	0.11	-0.20	-0.01
63	1	-0.05	0.16	-0.02	-0.06	0.03	0.02	0.08	-0.05	-0.03

40

41

42

A

A

A

Frequencies	--	506.9009			509.9373			510.4981		
Red. masses	--	3.8010			3.7708			4.1868		
Frc consts	--	0.5754			0.5777			0.6429		
IR Inten	--	2.8648			3.8899			0.0158		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.07	0.00	-0.09	-0.01	0.00	-0.03	0.02	-0.01	0.08
2	6	-0.13	0.01	0.10	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02
3	6	0.06	-0.04	-0.10	0.01	0.02	0.00	-0.04	-0.07	-0.01
4	6	0.03	-0.03	-0.04	0.01	0.02	0.01	-0.03	-0.06	-0.02
5	6	-0.01	-0.04	0.00	0.02	-0.03	0.03	-0.05	0.11	-0.07
6	6	-0.05	-0.05	0.02	0.01	-0.05	0.00	-0.03	0.15	0.01
7	6	0.04	-0.03	-0.04	-0.03	-0.01	-0.01	0.10	0.04	0.03
8	6	0.13	0.03	-0.05	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.08
9	6	-0.08	0.03	0.16	-0.01	0.00	0.02	0.02	0.01	-0.06
10	6	0.11	0.03	-0.05	0.01	0.04	0.01	-0.03	-0.12	-0.02
11	6	0.04	-0.01	-0.09	0.02	0.04	0.00	-0.07	-0.11	-0.01
12	6	-0.11	0.07	0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.09	0.04	-0.06
13	6	-0.02	0.11	-0.02	-0.01	-0.04	0.01	0.04	0.12	-0.04
14	6	0.06	0.06	-0.03	-0.01	-0.01	-0.05	0.02	0.02	0.14
15	6	-0.09	-0.04	0.08	-0.04	0.04	0.01	0.13	-0.12	-0.02
16	6	-0.09	-0.02	0.12	-0.02	0.03	-0.03	0.06	-0.10	0.08
17	6	0.08	-0.08	-0.11	-0.03	0.00	0.01	0.10	0.01	-0.02
18	1	-0.29	0.02	0.32	-0.01	0.00	0.03	0.04	0.00	-0.08
19	1	0.12	-0.04	-0.14	-0.01	0.03	0.00	0.02	-0.09	0.01
20	1	-0.03	-0.05	0.04	0.04	-0.05	0.05	-0.13	0.16	-0.13
21	1	-0.11	-0.05	0.08	0.04	-0.08	-0.02	-0.10	0.25	0.07
22	1	0.21	0.07	-0.14	0.03	0.04	-0.06	-0.10	-0.11	0.19

23	1	-0.27	0.01	0.32	-0.02	-0.01	0.02	0.07	0.03	-0.08
24	1	0.20	0.01	-0.07	0.00	0.05	-0.02	0.01	-0.16	0.06
25	1	-0.27	0.08	0.07	0.05	-0.03	0.05	-0.13	0.10	-0.17
26	1	-0.05	0.14	0.01	-0.04	-0.08	0.04	0.12	0.26	-0.11
27	6	0.03	-0.04	0.02	0.00	0.02	0.01	-0.01	-0.04	-0.03
28	1	-0.04	0.14	0.05	0.05	-0.06	0.02	-0.14	0.19	-0.07
29	1	-0.03	-0.20	0.20	0.08	0.06	0.01	-0.24	-0.18	-0.02
30	1	-0.01	0.01	0.05	-0.01	0.10	-0.03	0.01	-0.27	0.07
31	8	-0.05	0.03	0.02	0.01	-0.04	0.02	-0.02	0.11	-0.07
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
33	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.11	-0.01	-0.01	0.04
34	6	0.00	0.00	0.00	0.07	0.02	-0.14	0.02	0.00	-0.05
35	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.11	0.01	0.00	0.04
36	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.08	0.00	0.00	0.03
37	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	-0.01	0.01	0.00	0.00
38	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03	-0.02	0.01	0.00	-0.01
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.01	0.00	0.03
40	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.01	0.09	-0.04	0.00	0.03
41	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.05	-0.17	0.00	0.01	-0.05
42	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.02	0.10	-0.02	0.00	0.04
43	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.06	0.02	0.00	0.03
44	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.08	-0.06	0.02	-0.04	-0.02
45	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.07	-0.06	-0.02	-0.04	-0.02
46	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.03	0.01	-0.03	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.05	-0.10	0.02	0.03	-0.02
48	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.06	-0.11	0.01	0.03	-0.04
49	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	0.15	0.01	0.01	0.06
50	1	0.00	0.00	0.00	0.11	0.09	-0.39	0.04	0.03	-0.13
51	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	0.14	0.01	0.00	0.05
52	1	0.00	0.00	0.00	0.03	0.07	-0.10	0.02	0.00	-0.03
53	1	0.00	0.00	0.00	0.08	0.06	-0.12	0.02	0.01	-0.06
54	1	0.00	0.00	0.00	-0.14	-0.06	0.17	-0.05	-0.01	0.05
55	1	0.00	0.00	0.00	0.08	0.11	-0.37	0.02	0.03	-0.12
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.01	0.21	-0.04	0.02	0.08
57	1	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.13	-0.12	0.05	-0.07	-0.05
58	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.10	-0.10	-0.04	-0.06	-0.03
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.05	0.00	0.00	-0.02
60	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.02	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.08	-0.11	0.00	-0.01	-0.05
62	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.08	-0.08	0.00	-0.04	-0.03
63	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.26	-0.09	-0.01	0.10	-0.04

		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies	--	515.5351			526.3565			528.5802		
Red. masses	--	4.8520			3.6007			4.0009		
Frc consts	--	0.7598			0.5878			0.6586		
IR Inten	--	1.3706			2.0936			1.6635		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.02	-0.11	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.01	-0.01	-0.13	-0.01	0.11	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.02	0.00	0.10	0.01	-0.11	0.00	0.00	0.00
7	6	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	-0.01	0.00	-0.10	-0.01	0.09	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.01	0.00	0.00	0.11	0.05	-0.13	0.00	0.00	0.00
13	6	0.01	0.01	0.00	-0.14	0.02	0.12	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.01	-0.01	0.00	-0.12	-0.02	0.13	0.00	0.00	0.00

16	6	0.00	-0.01	0.01	0.14	-0.01	-0.13	0.00	0.00	0.00
17	6	0.01	0.00	0.00	0.04	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	-0.01	-0.11	0.01	0.13	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	-0.01	0.00	-0.10	-0.01	0.14	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.01	0.02	-0.01	-0.34	-0.01	0.31	-0.01	0.00	0.01
21	1	-0.01	0.02	0.01	0.18	0.03	-0.20	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.01	-0.01	0.01	0.06	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
23	1	0.01	0.00	0.00	0.08	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	-0.02	0.01	0.18	0.01	-0.15	0.01	0.00	0.00
25	1	-0.02	0.01	-0.01	0.34	0.09	-0.36	0.01	0.00	-0.01
26	1	0.01	0.02	-0.01	-0.17	0.03	0.14	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00
28	1	-0.01	0.01	-0.01	-0.04	0.07	0.01	0.00	0.00	0.00
29	1	-0.01	0.00	0.00	-0.09	-0.12	0.03	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.12	0.04	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.01	0.00	-0.03	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.03	-0.05	0.04	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.02
34	6	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.01
35	6	-0.08	-0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	-0.01
36	6	-0.06	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.13
37	6	0.06	0.18	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.17
38	6	0.09	0.14	0.14	0.00	0.00	0.01	0.10	0.10	-0.11
39	6	0.12	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.06
40	6	0.01	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03
41	6	-0.02	0.05	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00
42	6	-0.14	-0.10	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.05	-0.03
43	6	-0.13	-0.08	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.07	0.08
44	6	-0.09	0.07	0.08	0.00	0.00	0.00	0.05	0.09	-0.14
45	6	0.13	0.11	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.19
46	6	0.09	-0.07	0.09	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00	-0.02
47	6	0.02	-0.12	-0.17	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.11	0.15
48	6	0.00	-0.17	0.03	0.00	0.00	0.01	0.06	-0.01	-0.21
49	6	0.04	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
50	1	0.03	0.03	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03	0.12
51	1	-0.04	-0.09	-0.08	0.00	0.00	-0.01	-0.05	-0.12	0.17
52	1	0.02	0.32	-0.08	0.00	0.01	-0.01	-0.14	0.03	0.41
53	1	0.10	0.18	0.26	0.00	0.00	0.01	0.16	0.17	-0.24
54	1	-0.10	-0.14	0.13	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.11
55	1	0.05	0.05	-0.04	0.00	0.00	0.01	0.06	0.05	-0.11
56	1	-0.12	-0.22	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	-0.20
57	1	-0.19	0.19	0.15	-0.01	-0.01	0.01	0.12	0.23	-0.39
58	1	0.24	0.24	-0.09	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.25
59	8	0.01	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04	-0.01
60	6	-0.04	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00
61	1	-0.09	-0.09	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.06	0.01
62	1	-0.09	0.15	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00
63	1	-0.07	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.00

		46			47			48		
		A			A			A		
Frequencies	--	537.1262			547.9137			550.3797		
Red. masses	--	4.1104			3.7540			3.9284		
Frc consts	--	0.6987			0.6640			0.7011		
IR Inten	--	4.0388			14.1042			2.5054		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.05	-0.09	-0.04	-0.04	-0.08	0.00	0.00	-0.01
2	6	0.02	0.00	-0.01	-0.09	-0.09	-0.03	-0.01	-0.01	0.00
3	6	0.01	-0.11	0.01	-0.06	-0.06	-0.05	0.00	-0.01	0.00
4	6	0.04	-0.07	0.02	0.11	0.02	-0.04	0.01	0.00	0.00
5	6	0.02	0.14	0.03	0.06	0.00	0.07	0.01	0.00	0.00
6	6	0.04	0.16	0.04	0.02	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.03	0.10	0.05	0.10	-0.01	-0.13	0.01	0.00	-0.01
8	6	-0.02	0.04	-0.12	-0.05	0.01	0.06	0.00	0.00	0.00

9	6	-0.09	-0.02	0.00	0.04	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	-0.19	-0.05	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.06	-0.12	-0.03	-0.12	-0.02	0.09	-0.01	0.00	0.00
12	6	0.01	0.02	0.01	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
13	6	0.01	0.06	0.08	0.03	0.04	0.01	0.00	0.00	0.00
14	6	0.07	0.06	-0.06	-0.12	0.01	0.14	-0.01	0.00	0.01
15	6	-0.05	-0.08	0.08	0.03	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00
16	6	0.04	-0.06	0.00	-0.01	0.03	0.04	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.15	0.01	0.03	0.00	-0.02	-0.13	0.00	0.00	-0.01
18	1	0.04	0.07	0.11	-0.11	-0.08	0.02	-0.01	0.00	0.00
19	1	-0.02	-0.13	0.09	-0.18	-0.01	-0.08	-0.01	0.00	0.00
20	1	-0.05	0.19	-0.08	-0.05	-0.02	0.25	0.00	0.00	0.01
21	1	0.10	0.15	-0.02	-0.14	-0.12	0.21	-0.01	-0.01	0.02
22	1	0.09	-0.04	-0.22	-0.21	0.04	0.22	-0.01	0.00	0.01
23	1	-0.05	0.06	0.13	0.07	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
24	1	0.04	-0.20	-0.05	0.12	0.00	-0.05	0.01	0.00	0.00
25	1	-0.11	0.06	-0.02	0.16	0.06	-0.22	0.01	0.00	-0.01
26	1	-0.08	0.03	0.15	0.19	0.10	-0.12	0.01	0.01	-0.01
27	6	-0.03	0.08	0.01	-0.03	0.12	-0.03	0.00	0.01	0.00
28	1	0.15	-0.26	0.04	0.00	0.07	-0.04	0.01	-0.01	0.00
29	1	0.31	0.29	-0.02	0.21	0.10	0.19	0.02	0.01	0.01
30	1	-0.06	0.38	-0.13	-0.14	0.43	-0.08	-0.01	0.04	-0.01
31	8	0.02	-0.14	0.06	0.09	-0.06	0.16	0.01	-0.01	0.01
32	47	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.03	0.09	-0.01
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.09	0.03	-0.01
35	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.03	-0.07	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.05	-0.07	0.06
37	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.04	0.06	-0.02
38	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.07	0.04	0.08
39	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.03	0.14
40	6	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.04	0.11	-0.13
41	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.10	-0.03	0.08
42	6	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.07	-0.06	-0.09
43	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.07	-0.03	-0.16
44	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.06	-0.06	0.05
45	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.04	0.01
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.04	0.11	-0.16
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.07
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.01	0.01
49	6	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.05	0.00	0.15
50	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.18	0.01	0.04
51	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.08	-0.15	-0.03
52	1	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.05	0.20	-0.22
53	1	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.12	0.08	-0.05
54	1	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.13	-0.37
55	1	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.04	-0.07	0.25
56	1	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.10	-0.04	-0.05
57	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.05	-0.12	0.29
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.12	-0.16	0.16
59	8	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.09	-0.03	-0.03
60	6	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.02	0.00
61	1	-0.01	-0.02	0.01	-0.02	-0.03	0.01	0.07	0.02	-0.14
62	1	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.01	0.07	-0.28	-0.07
63	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.04	0.18	-0.10

		49			50			51		
		A			A			A		
Frequencies	--	564.0323			571.4643			578.3764		
Red. masses	--	5.0480			5.0868			4.8781		
Frc consts	--	0.9462			0.9787			0.9614		
IR Inten	--	5.5442			5.3678			14.5683		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	0.00	0.00	0.01	0.01	0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00

2	6	0.00	0.00	0.00	0.09	0.04	0.05	0.00	0.00	0.01
3	6	0.00	0.01	0.00	0.04	-0.10	0.10	0.01	0.00	0.00
4	6	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.14	-0.07	-0.01	0.00	0.00
5	6	-0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.08	-0.09	-0.01	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.07	-0.16	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.04	-0.14	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	-0.01	0.05	0.06	0.17	0.01	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.17	0.12	0.19	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.15	0.04	0.08	0.00	0.00	0.00
14	6	0.01	0.00	0.00	-0.07	0.06	0.03	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.07	-0.05	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00
17	6	0.01	0.00	0.00	0.05	-0.07	-0.06	0.01	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.17	0.11	0.10	0.00	0.00	0.01
19	1	0.01	0.00	0.00	0.09	-0.17	0.25	0.02	0.00	0.00
20	1	0.00	0.00	-0.01	-0.18	-0.04	-0.08	0.00	0.00	-0.01
21	1	0.01	0.01	-0.02	-0.20	-0.02	0.12	0.00	0.00	-0.01
22	1	0.01	0.00	0.00	-0.25	0.08	-0.06	-0.01	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.05	0.05	0.01	0.00	-0.01
24	1	-0.01	0.00	0.01	-0.03	0.03	-0.17	-0.01	0.00	0.01
25	1	-0.01	-0.01	0.01	0.24	0.12	0.16	0.00	0.00	0.01
26	1	-0.01	0.00	0.01	0.24	-0.12	0.03	0.00	-0.01	0.00
27	6	0.00	-0.01	0.00	0.04	-0.08	0.03	0.00	-0.01	0.00
28	1	-0.01	0.01	0.00	-0.03	0.09	0.07	-0.01	0.02	0.00
29	1	-0.02	-0.02	-0.01	-0.05	-0.22	0.17	-0.02	-0.02	0.01
30	1	0.01	-0.03	0.01	0.01	-0.06	0.06	0.00	-0.02	0.01
31	8	-0.01	0.01	-0.01	-0.09	0.03	-0.03	-0.01	0.01	-0.01
32	47	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
33	6	0.07	-0.11	0.03	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.05	0.01
34	6	0.04	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.03	0.03
35	6	0.11	0.13	0.04	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.07	0.02
36	6	0.00	0.08	0.12	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.01	-0.05
37	6	-0.03	0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.05	-0.06
38	6	-0.03	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.06	0.00
39	6	0.00	-0.15	0.10	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.06	-0.03
40	6	0.14	-0.15	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.07	0.01
41	6	0.03	-0.02	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.01
42	6	0.05	0.06	0.05	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.01
43	6	-0.05	0.10	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.11	0.00	0.06
44	6	-0.20	0.03	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.16	-0.05	0.04
45	6	-0.16	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.05	-0.01
46	6	0.02	-0.06	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.02
47	6	0.01	-0.06	0.03	0.00	0.00	0.00	0.03	0.05	0.00
48	6	0.05	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00
49	6	0.10	-0.06	0.06	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.09	-0.15
50	1	-0.10	0.05	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.17	-0.02	0.00
51	1	0.13	0.17	-0.06	0.00	0.01	0.00	0.18	-0.23	0.01
52	1	0.06	0.02	-0.16	0.01	0.00	0.00	-0.22	0.08	-0.03
53	1	0.08	0.16	-0.17	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.10	0.08
54	1	0.17	-0.13	-0.23	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.08	0.06
55	1	-0.13	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00
56	1	0.06	-0.03	0.11	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.14	0.00
57	1	-0.24	-0.06	0.10	-0.01	0.00	0.00	0.19	-0.10	0.03
58	1	-0.17	0.09	0.16	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.11	-0.08
59	8	-0.03	0.17	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.22	0.03
60	6	-0.05	-0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.17	0.00
61	1	-0.17	-0.35	0.02	0.00	0.01	-0.01	-0.15	-0.29	0.17
62	1	-0.17	0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.16	0.08
63	1	-0.14	0.07	-0.03	0.00	0.01	0.00	-0.12	-0.39	0.12

		A			A			A		
Frequencies		--	584.6837		585.2195		606.9108			
Red. masses		--	3.2722		3.1774		4.3469			
Frc consts		--	0.6591		0.6412		0.9434			
IR Inten		--	6.8871		4.8316		3.2536			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.11	-0.06
2	6	0.10	0.04	-0.07	0.01	0.00	-0.01	0.03	0.18	0.09
3	6	-0.07	0.08	0.12	-0.01	0.00	0.01	0.11	0.15	0.05
4	6	0.08	0.04	-0.09	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.04	0.01
5	6	0.05	0.02	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.02	0.06	0.02
6	6	-0.05	0.02	0.07	0.00	0.00	0.00	0.07	0.10	0.07
7	6	0.12	0.00	-0.06	0.01	0.00	0.00	0.09	0.04	0.03
8	6	0.09	-0.02	-0.03	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.06
9	6	-0.09	-0.02	0.10	-0.01	0.00	0.01	0.06	-0.06	-0.03
10	6	0.10	0.01	-0.11	0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.08	0.03
11	6	-0.11	-0.01	0.07	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.00
12	6	-0.05	-0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.09	-0.06
13	6	0.00	-0.05	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.12	-0.08
14	6	-0.05	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.01	-0.07
15	6	-0.05	-0.01	0.07	0.00	0.00	0.00	0.05	0.01	-0.03
16	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00
17	6	-0.06	0.03	0.09	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.14	-0.15
18	1	0.14	0.03	-0.16	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.21	0.17
19	1	-0.23	0.07	0.30	-0.02	0.00	0.02	0.21	0.11	0.07
20	1	-0.05	0.02	0.05	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.09	-0.01
21	1	-0.26	0.05	0.29	-0.02	0.00	0.02	0.05	0.15	0.09
22	1	0.12	-0.05	-0.05	0.01	0.00	0.00	-0.10	-0.11	0.16
23	1	-0.22	-0.04	0.19	-0.01	0.00	0.01	0.09	-0.05	-0.04
24	1	0.32	0.02	-0.30	0.02	0.00	-0.02	-0.07	-0.09	0.09
25	1	0.08	-0.06	-0.07	0.00	0.00	-0.01	0.09	-0.11	-0.07
26	1	0.13	-0.01	-0.19	0.01	0.00	-0.01	-0.05	-0.19	-0.13
27	6	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.06	0.04
28	1	0.06	-0.13	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.07	0.12
29	1	-0.02	0.09	-0.15	0.00	0.01	-0.01	0.17	-0.23	0.41
30	1	0.06	-0.10	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.29	-0.01
31	8	-0.02	-0.02	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.04	0.03
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00
34	6	0.01	0.00	-0.01	-0.06	-0.04	0.11	0.00	0.00	0.01
35	6	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.15	0.01	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	-0.01	-0.05	-0.05	0.12	0.00	0.00	0.00
37	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.06	0.01	0.00	0.00
38	6	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.08	0.01	0.00	0.00
39	6	0.00	0.00	-0.01	-0.06	-0.01	0.13	0.01	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.07	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.01	0.04	0.04	-0.11	0.00	0.00	-0.01
42	6	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.04	0.12	0.00	0.00	0.00
43	6	0.00	0.00	0.01	0.06	0.03	-0.13	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
45	6	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.01	0.08	-0.01	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.05	0.04	-0.06	-0.01	0.01	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	-0.07	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
49	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.11	-0.01	0.00	-0.01
50	1	0.01	0.00	-0.01	-0.06	-0.07	0.21	0.01	0.00	0.01
51	1	0.00	-0.01	0.02	0.06	0.07	-0.40	0.01	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01	-0.10	0.00	0.00	0.00
53	1	-0.01	0.00	0.03	0.09	0.08	-0.39	0.01	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.08	0.00	-0.01	0.01
55	1	-0.01	0.00	0.01	0.11	0.07	-0.23	0.00	0.00	-0.01
56	1	0.01	0.01	-0.02	-0.14	-0.11	0.38	0.00	-0.01	0.00
57	1	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.13	0.00	0.00	-0.01

58	1	0.00	0.00	-0.02	-0.06	-0.07	0.24	-0.01	0.00	-0.01
59	8	0.00	0.01	0.00	0.04	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
61	1	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.09	0.08	0.01	0.01	0.00
62	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.11	0.06	0.01	0.00	0.01
63	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.17	0.07	0.01	-0.02	0.00
			55			56			57	
			A			A			A	
Frequencies	--		607.9687			660.8850			661.9466	
Red. masses	--		4.5699			3.5646			3.4593	
Frc consts	--		0.9952			0.9173			0.8931	
IR Inten	--		3.8078			13.3145			17.9127	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.01	0.00	-0.19	0.01	0.19	-0.02	0.00	0.01
2	6	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.01
3	6	-0.01	-0.01	-0.01	-0.05	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.04	0.01	0.00	0.01
6	6	0.00	-0.01	0.00	0.05	0.01	0.03	0.01	0.00	0.01
7	6	-0.01	0.00	0.00	-0.10	0.01	0.10	-0.01	0.00	0.01
8	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.01
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.02	0.07	0.00	0.00	0.01
10	6	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.02	-0.04	0.01	-0.01	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.01	0.00	-0.05	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.01	0.00	0.05	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.01
14	6	0.01	0.00	0.00	-0.07	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.11	0.01	-0.16	0.00	0.00	-0.01
17	6	0.00	0.01	0.01	0.10	-0.06	-0.16	0.01	0.00	-0.01
18	1	-0.01	-0.01	0.00	0.26	0.01	-0.32	0.01	0.00	-0.02
19	1	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.06	-0.01	0.00	-0.01
20	1	0.00	0.00	0.00	0.05	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00
21	1	0.00	-0.01	-0.01	0.16	-0.01	-0.09	0.02	-0.01	0.00
22	1	0.00	0.01	-0.01	0.25	0.02	-0.28	0.01	0.00	-0.02
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.08	0.00	0.00	0.01
24	1	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.02	-0.13	0.01	-0.01	-0.01
25	1	0.00	0.01	0.00	-0.14	-0.01	0.14	-0.01	0.00	0.01
26	1	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.04	-0.06	0.00	-0.01	-0.01
27	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.04	0.01	0.00	0.00
28	1	0.00	-0.01	-0.01	-0.13	0.31	-0.06	-0.01	0.02	0.00
29	1	-0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.25	0.34	-0.01	-0.02	0.02
30	1	0.00	-0.01	0.00	-0.11	0.17	0.03	0.00	-0.01	0.01
31	8	0.01	0.00	0.00	0.02	0.03	0.08	0.00	0.00	0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.05	0.13	-0.02	0.00	0.00	-0.02	-0.06	-0.06	0.25
34	6	0.15	0.08	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.04
35	6	0.17	0.05	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.04
36	6	0.03	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
37	6	0.08	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.02
38	6	0.15	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.01
39	6	0.11	-0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.03	0.14
40	6	-0.02	-0.07	0.03	0.00	0.00	0.01	0.02	0.02	-0.07
41	6	0.00	-0.05	-0.08	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.03	0.08
42	6	-0.05	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.06
43	6	-0.05	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02
44	6	-0.08	-0.02	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.06
45	6	-0.19	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.01	0.02	0.02	-0.09
46	6	-0.14	0.08	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.05
47	6	0.02	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02
48	6	-0.08	0.04	0.06	0.00	0.00	0.01	0.04	0.06	-0.17
49	6	-0.12	-0.01	-0.16	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.02	-0.20
50	1	0.19	0.07	0.17	-0.01	-0.01	0.03	0.10	0.11	-0.37

51	1	0.22	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04
52	1	0.03	0.07	0.08	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.05
53	1	0.16	0.01	0.13	0.00	0.00	0.01	0.07	0.03	-0.17
54	1	-0.09	-0.16	0.14	-0.01	-0.01	0.03	0.10	0.10	-0.35
55	1	0.03	-0.04	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.08
56	1	-0.06	-0.11	0.04	0.00	0.00	0.01	0.05	0.04	-0.17
57	1	-0.02	-0.05	-0.16	0.01	0.01	-0.01	-0.07	-0.06	0.17
58	1	-0.20	-0.04	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.06
59	8	-0.08	-0.04	0.07	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.04	0.05
60	6	0.01	-0.07	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.04	-0.03
61	1	0.11	0.25	0.10	0.00	-0.02	-0.01	0.03	0.21	0.16
62	1	0.13	-0.03	0.12	0.00	-0.02	-0.01	0.05	0.29	0.13
63	1	0.10	-0.43	0.12	0.00	0.03	-0.01	0.03	-0.39	0.15
			58			59			60	
			A			A			A	
Frequencies	--	662.8915			686.1259			705.6611		
Red. masses	--	4.1421			4.9225			7.0503		
Frc consts	--	1.0724			1.3653			2.0685		
IR Inten	--	7.3286			10.3573			0.4198		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	0.02	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.13	0.00
2	6	-0.11	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.29	-0.14
3	6	-0.09	-0.06	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.01	-0.10
4	6	0.02	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.06	-0.03
5	6	0.13	0.00	0.11	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.21	0.03
6	6	0.14	0.00	0.16	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.11	0.13
7	6	0.01	0.06	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.05	0.03	0.04
8	6	-0.07	0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.13	0.01
9	6	0.05	-0.07	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.28	-0.13
10	6	0.04	-0.13	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.03	-0.09
11	6	0.03	-0.04	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.06	-0.03
12	6	0.01	0.09	0.01	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.20	0.01
13	6	-0.10	0.02	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.10	0.13
14	6	-0.09	0.03	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.06	0.03	0.05
15	6	-0.02	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.08	0.04
16	6	-0.09	0.02	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.08	0.05
17	6	0.03	0.08	0.09	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
18	1	-0.15	0.00	-0.04	-0.01	0.00	0.00	-0.15	0.31	-0.12
19	1	-0.15	-0.02	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.01
20	1	0.11	0.02	0.08	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.21	0.04
21	1	0.13	-0.11	0.19	0.00	0.00	0.01	0.13	-0.12	0.14
22	1	-0.11	0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.01
23	1	0.13	0.01	0.13	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.29	-0.14
24	1	0.03	-0.13	0.05	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	0.00
25	1	0.02	0.09	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.20	0.03
26	1	-0.07	-0.09	-0.09	-0.01	0.00	0.00	0.08	-0.08	0.17
27	6	0.10	-0.09	0.06	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.02
28	1	0.05	0.04	0.08	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.03
29	1	-0.27	-0.11	-0.21	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	0.02
30	1	0.22	-0.50	0.17	0.01	-0.02	0.01	0.03	-0.02	0.03
31	8	0.06	0.07	-0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.01
34	6	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.06	-0.01	0.00	-0.05	-0.01
35	6	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.05	-0.02	0.02	-0.01	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.01
37	6	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.10	-0.01	0.01	0.03	0.01
38	6	-0.01	0.00	0.00	0.15	-0.13	0.03	-0.01	0.03	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.07	0.01	-0.01	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.01	-0.08	0.08	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01
41	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.12	-0.02	0.00	-0.04	-0.01
42	6	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.14	-0.05	0.01	-0.01	0.00
43	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.07	0.02	0.01	0.00	0.01



44	6	0.00	0.00	0.00	0.08	0.10	0.06	0.01	0.02	0.01
45	6	0.00	0.00	0.01	-0.11	0.14	0.00	-0.01	0.02	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.09	-0.02	-0.01	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.01	0.00	0.01	0.00
48	6	0.00	-0.01	0.01	-0.07	0.08	-0.01	0.00	0.01	0.00
49	6	0.00	0.00	0.01	0.16	-0.05	0.02	-0.01	0.00	0.00
50	1	0.00	-0.01	0.02	-0.17	0.07	-0.06	0.00	-0.05	-0.02
51	1	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.16	-0.06	0.01	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.06	-0.03	0.01	0.03	0.00
53	1	-0.01	0.00	0.01	0.09	-0.21	0.00	-0.01	0.03	0.01
54	1	0.00	-0.01	0.02	-0.05	0.14	0.02	0.00	0.00	0.00
55	1	0.00	0.00	0.00	0.18	-0.14	0.03	-0.01	-0.04	-0.01
56	1	0.00	0.00	0.02	-0.02	-0.11	-0.08	0.00	0.01	0.00
57	1	0.00	0.00	-0.01	0.09	0.10	0.04	0.01	0.02	0.00
58	1	0.00	0.00	0.01	-0.15	0.06	-0.06	-0.01	0.02	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.10	0.14	-0.04	0.00	-0.01	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.20	0.01	0.00	0.01	0.00
61	1	0.00	0.00	-0.01	-0.14	-0.53	0.06	0.00	0.01	0.00
62	1	0.00	-0.01	-0.01	-0.15	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
63	1	0.00	0.02	-0.01	-0.13	-0.08	0.00	0.00	0.01	0.00

		61			62			63		
		A			A			A		
Frequencies	--	706.0023			718.0524			723.5013		
Red. masses	--	6.9894			3.4614			3.5778		
Frc consts	--	2.0526			1.0515			1.1034		
IR Inten	--	1.3655			12.1948			10.0891		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.02	0.04	-0.02	-0.04	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.17	0.00	0.18	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	-0.03	0.00	0.06	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00
6	6	0.02	-0.01	0.02	-0.09	-0.01	0.07	0.00	0.00	0.00
7	6	0.01	0.00	0.01	0.07	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.02	0.00	0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	0.04	-0.02	-0.04	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.01	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	-0.01	0.00	-0.15	-0.01	0.14	0.00	0.00	0.00
12	6	0.01	-0.03	0.00	0.08	0.02	-0.06	0.00	0.00	0.00
13	6	0.02	-0.01	0.02	-0.09	-0.01	0.09	0.00	0.00	0.00
14	6	0.01	0.00	0.01	0.14	0.02	-0.13	0.00	0.00	0.00
15	6	0.01	-0.01	0.00	0.05	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00
16	6	0.01	-0.01	0.01	0.05	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.02	0.04	-0.02	0.11	-0.01	-0.14	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	-0.01	0.00	0.33	-0.01	-0.36	0.00	0.00	0.00
20	1	0.01	-0.03	0.00	0.29	0.00	-0.29	0.00	0.00	0.00
21	1	0.02	-0.02	0.02	-0.12	-0.01	0.10	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.02	0.04	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.01	0.00	0.00	0.28	0.02	-0.27	0.00	0.00	0.00
25	1	0.01	-0.03	0.00	0.24	0.05	-0.21	0.00	0.00	0.00
26	1	0.01	-0.01	0.02	-0.16	-0.04	0.15	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.03	0.06	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.07	0.09	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.06
34	6	-0.02	0.35	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.04
35	6	-0.12	0.11	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02
36	6	-0.07	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.06	0.22

37	6	-0.07	-0.20	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	-0.10
38	6	0.11	-0.21	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.02	0.10
39	6	0.07	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03	-0.13
40	6	0.07	0.10	0.05	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.02
41	6	0.01	0.32	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.04
42	6	-0.08	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02
43	6	-0.06	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.06	0.20
44	6	-0.07	-0.16	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03	-0.09
45	6	0.08	-0.17	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.04	0.12
46	6	0.06	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.07	0.05	-0.18
47	6	0.00	-0.09	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.04
48	6	-0.01	-0.10	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.07
49	6	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.04
50	1	-0.01	0.35	0.11	0.00	0.00	0.00	0.05	0.06	-0.19
51	1	-0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.11	0.10	-0.45
52	1	-0.08	-0.20	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.11	0.08	-0.35
53	1	0.09	-0.23	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.05	0.18
54	1	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.08
55	1	0.04	0.32	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00
56	1	-0.01	-0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.11	0.09	-0.33
57	1	-0.08	-0.17	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.13	0.09	-0.29
58	1	0.06	-0.17	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.07	0.18
59	8	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.01
60	6	0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01
61	1	-0.01	-0.10	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.08	0.02
62	1	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.06	0.02
63	1	-0.01	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.06	0.03

		64			65			66		
		A			A			A		
Frequencies	--	767.2847			771.8729			774.5846		
Red. masses	--	2.8335			2.7375			5.2328		
Frc consts	--	0.9828			0.9609			1.8498		
IR Inten	--	25.7949			28.5913			0.9450		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.09	0.01	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.13	0.03
2	6	-0.03	0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.11	0.05
3	6	0.06	-0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.04	0.27	0.03
4	6	-0.04	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.08	-0.07
5	6	-0.04	0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.23	-0.06
6	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.07	0.08
7	6	-0.11	0.00	0.11	0.00	0.00	0.00	0.02	0.07	0.05
8	6	0.04	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.11	-0.05
9	6	-0.06	-0.02	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.12	-0.02
10	6	0.04	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.21	-0.03
11	6	-0.06	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.07	0.04
12	6	-0.03	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.18	0.04
13	6	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.07	-0.07
14	6	-0.12	0.00	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.03
15	6	0.14	0.02	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.01	0.04
16	6	0.03	0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02
17	6	-0.02	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01
18	1	-0.20	0.02	0.27	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.28	-0.13
19	1	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	-0.06
20	1	0.19	0.02	-0.22	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.25	-0.08
21	1	0.26	0.03	-0.27	0.00	0.00	0.00	0.12	0.05	0.02
22	1	0.29	0.00	-0.29	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.06	-0.07
23	1	0.06	-0.02	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.09	0.27	0.14
24	1	0.22	0.03	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.26	0.06
25	1	0.17	0.00	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.01	0.20	-0.03
26	1	0.29	0.06	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.02	0.06	-0.13
27	6	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.06	-0.03
28	1	0.05	-0.09	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.05	-0.07
29	1	-0.01	0.05	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.07	0.14	-0.05

30	1	0.04	-0.07	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.14	-0.10
31	8	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	-0.15	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.06	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.07	0.00	0.00	0.00
37	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
38	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.12	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.09	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
43	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.09	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00
45	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.04	0.14	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.05	-0.18	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	-0.07	0.00	0.00	0.00
49	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.08	0.29	0.00	0.00	0.00
51	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.08	0.08	-0.30	0.00	0.00	0.00
53	1	0.00	0.00	0.00	0.12	0.09	-0.32	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.11	0.09	-0.35	0.00	0.00	0.00
55	1	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	-0.09	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.11	0.09	-0.32	0.00	0.00	0.00
57	1	0.00	0.00	0.00	0.10	0.08	-0.26	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.18	0.09	-0.32	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00
62	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.10	-0.03	0.00	0.00	0.00
63	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.04	0.00	0.00	0.00

		67			68			69		
		A			A			A		
Frequencies	--	776.8258			811.0168			812.0916		
Red. masses	--	5.4913			1.2658			1.2540		
Frc consts	--	1.9524			0.4905			0.4872		
IR Inten	--	1.4468			8.7820			8.6321		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.01	-0.07	0.00	0.00	0.01
19	1	0.00	0.00	0.00	0.07	0.01	-0.08	0.00	0.00	0.01
20	1	0.00	0.00	0.00	-0.22	-0.01	0.22	0.02	0.00	-0.02
21	1	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.21	0.02	0.00	-0.02
22	1	0.00	0.00	0.00	0.32	0.02	-0.33	-0.03	0.00	0.03

23	1	0.00	0.00	0.00	0.37	0.02	-0.37	-0.03	0.00	0.03
24	1	0.00	0.00	0.00	0.31	0.01	-0.30	-0.03	0.00	0.03
25	1	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.02	0.15	0.02	0.00	-0.01
26	1	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.02	0.13	0.01	0.00	-0.01
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	-0.02	-0.14	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	-0.01	-0.15	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	0.21	0.17	0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02
36	6	-0.03	0.13	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.02
37	6	-0.21	-0.11	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.03
38	6	0.04	-0.11	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.04
39	6	0.08	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
40	6	0.02	0.12	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.05
41	6	0.03	0.14	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.05
42	6	-0.14	-0.13	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.05
43	6	0.01	-0.09	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
44	6	0.11	0.11	0.08	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.03
45	6	-0.03	0.11	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
46	6	-0.03	-0.07	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
47	6	0.05	-0.06	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.05
48	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.05
49	6	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	-0.27	-0.11	-0.16	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.02	-0.09
51	1	0.18	0.27	0.08	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.03	-0.10
52	1	-0.20	-0.15	-0.09	-0.01	-0.01	0.02	-0.09	-0.07	0.28
53	1	0.10	0.00	0.02	-0.01	-0.01	0.02	-0.08	-0.07	0.26
54	1	-0.02	0.06	0.02	0.01	0.01	-0.04	0.14	0.12	-0.42
55	1	0.26	0.11	0.14	0.01	0.01	-0.04	0.16	0.14	-0.49
56	1	-0.08	-0.27	-0.07	0.01	0.01	-0.04	0.14	0.11	-0.41
57	1	0.09	0.16	0.08	-0.01	-0.01	0.02	-0.09	-0.06	0.21
58	1	-0.02	0.10	-0.02	-0.01	0.00	0.02	-0.08	-0.04	0.17
59	8	-0.04	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	6	0.00	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	1	0.02	0.16	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01
62	1	0.01	0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
63	1	0.02	0.16	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00

		A			A			A		
Frequencies	--	833.3476			833.7170			848.8379		
Red. masses	--	4.7537			4.7571			1.5070		
Frc consts	--	1.9451			1.9482			0.6398		
IR Inten	--	6.1132			3.3269			7.4641		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	0.00	-0.05
2	6	-0.02	0.07	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.07	0.04	0.06
3	6	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.03
4	6	0.07	0.03	0.05	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.02
5	6	0.08	0.16	0.10	-0.01	-0.02	-0.01	0.04	0.01	-0.03
6	6	-0.16	-0.08	-0.17	0.02	0.01	0.02	0.03	0.00	-0.03
7	6	-0.03	-0.08	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.04	0.00	0.02
8	6	0.06	0.04	0.06	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	-0.02
9	6	-0.08	0.13	-0.06	0.01	-0.02	0.01	0.02	-0.02	0.00
10	6	-0.05	-0.06	-0.05	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02	-0.01
11	6	0.06	0.00	0.06	-0.01	0.00	-0.01	0.03	0.01	-0.02
12	6	0.09	0.18	0.13	-0.01	-0.02	-0.01	-0.04	0.00	0.03
13	6	-0.13	-0.08	-0.14	0.02	0.01	0.02	-0.02	-0.01	-0.01
14	6	-0.05	-0.06	-0.04	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.05
15	6	0.10	-0.13	0.04	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.03

16	6	0.04	-0.11	0.07	-0.01	0.01	-0.01	0.06	-0.01	-0.04
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
18	1	-0.04	0.09	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.25	0.03	-0.32
19	1	-0.07	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.44	-0.03	-0.43
20	1	0.26	0.05	0.27	-0.03	-0.01	-0.03	-0.26	0.00	0.27
21	1	-0.14	-0.31	-0.16	0.02	0.04	0.02	-0.19	-0.03	0.20
22	1	0.12	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.05
23	1	-0.04	0.14	-0.11	0.01	-0.02	0.01	-0.06	-0.01	0.09
24	1	0.02	-0.08	-0.04	0.00	0.01	0.00	-0.15	0.02	0.13
25	1	0.27	0.10	0.24	-0.03	-0.01	-0.03	0.16	0.01	-0.13
26	1	0.00	-0.34	-0.21	0.00	0.04	0.02	0.20	0.04	-0.19
27	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.02
28	1	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.09	0.01
29	1	0.01	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.03	0.07	-0.04
30	1	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.04
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.01	0.00	0.01	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
36	6	0.01	0.00	0.00	0.09	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
37	6	0.02	0.00	0.01	0.18	0.04	0.08	0.00	0.00	0.00
38	6	-0.03	0.01	-0.01	-0.23	0.08	-0.05	0.00	0.00	0.00
39	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.07	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00
40	6	0.01	0.00	0.00	0.09	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.02	0.01	0.00	0.16	0.05	0.00	0.00	0.00
42	6	-0.01	0.00	0.00	-0.09	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
43	6	0.01	-0.01	0.00	0.07	-0.06	0.01	0.00	0.00	0.00
44	6	0.02	0.00	0.01	0.22	0.03	0.10	0.00	0.00	0.00
45	6	-0.02	0.01	0.00	-0.19	0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00
46	6	-0.01	0.00	0.00	-0.08	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	-0.02	-0.01	0.01	-0.14	-0.08	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	-0.02	0.00	-0.01	-0.14	-0.01	0.00	0.00	0.00
49	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.01	0.01	0.02	0.05	0.09	0.00	0.00	0.00
51	1	-0.01	0.00	0.01	-0.06	-0.01	0.11	0.00	0.00	0.00
52	1	0.04	-0.02	0.01	0.32	-0.19	0.03	0.00	0.00	0.00
53	1	-0.04	-0.01	-0.02	-0.32	-0.08	-0.18	0.00	0.00	0.00
54	1	0.01	0.00	-0.01	0.07	-0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00
55	1	0.00	0.02	0.00	0.00	0.16	0.04	0.00	0.00	0.00
56	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.06	-0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00
57	1	0.04	-0.02	0.00	0.33	-0.16	0.07	0.00	0.00	-0.01
58	1	-0.03	-0.01	-0.03	-0.28	-0.13	-0.23	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
62	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
63	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00

		73			74			75		
		A			A			A		
Frequencies	--	852.1357			852.2490			858.2365		
Red. masses	--	3.3508			1.6662			5.0826		
Frc consts	--	1.4336			0.7130			2.2057		
IR Inten	--	5.1066			1.3329			4.9993		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.08	0.01	-0.12	0.03	0.00	0.04	0.01	0.00	0.00
2	6	0.03	-0.13	0.08	-0.01	0.04	-0.03	0.00	0.01	0.00
3	6	0.03	0.02	0.05	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.01	0.04	0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.03	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
7	6	0.05	-0.03	0.03	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
8	6	0.12	0.00	0.12	-0.04	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00

9	6	-0.06	0.10	-0.07	0.02	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.04	-0.07	-0.05	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.01	-0.07	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
12	6	0.03	-0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
13	6	0.10	0.03	0.07	-0.04	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.13	0.07	-0.05	0.04	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.01
15	6	-0.06	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.03	0.07	-0.11	0.01	-0.02	0.04	0.01	0.00	0.00
17	6	-0.03	0.05	-0.03	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
18	1	0.18	-0.09	-0.02	-0.06	0.03	0.01	0.01	0.00	-0.01
19	1	0.12	0.08	-0.23	-0.04	-0.03	0.08	0.02	0.00	-0.02
20	1	-0.04	-0.02	0.07	0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.01
21	1	-0.09	0.06	0.04	0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
22	1	0.09	-0.14	0.17	-0.03	0.05	-0.06	-0.01	0.00	0.00
23	1	-0.16	0.05	-0.06	0.05	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.01
24	1	0.00	-0.12	0.07	0.00	0.04	-0.02	-0.01	0.00	0.00
25	1	-0.11	0.03	0.01	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	0.01	-0.09	0.15	-0.01	0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00
27	6	0.06	-0.05	0.03	-0.02	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
28	1	0.04	0.03	0.08	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.00
29	1	-0.10	-0.10	-0.03	0.04	0.03	0.01	0.00	0.01	0.00
30	1	0.07	-0.19	0.12	-0.02	0.07	-0.04	0.00	0.00	0.00
31	8	0.03	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	-0.01	-0.02	0.05	-0.01	-0.03	0.07	-0.13	0.12	0.00
34	6	0.01	0.01	-0.06	0.02	0.02	-0.08	-0.04	-0.19	-0.06
35	6	0.01	0.01	-0.04	0.01	0.02	-0.05	0.05	-0.02	0.00
36	6	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.03	0.04	0.03	0.05
37	6	-0.02	-0.01	0.03	-0.02	-0.02	0.04	-0.01	0.01	0.00
38	6	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.02	0.05	-0.04	0.02	0.02
39	6	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.03	0.05	-0.07	-0.06
40	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.18	-0.15	0.01
41	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.17	0.03
42	6	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.02	-0.13	-0.02	-0.03
43	6	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.03	-0.07	-0.05	-0.04
44	6	0.01	0.01	-0.03	0.01	0.02	-0.04	0.05	-0.04	-0.04
45	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.17	-0.06	-0.02
46	6	0.01	0.00	-0.03	0.02	0.00	-0.04	-0.10	0.17	0.08
47	6	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.03	-0.07	0.02	0.04
48	6	-0.01	-0.01	0.04	-0.02	-0.02	0.07	-0.04	0.18	-0.03
49	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.07	0.01
50	1	-0.07	-0.07	0.25	-0.10	-0.11	0.37	0.03	-0.21	0.00
51	1	-0.11	-0.09	0.38	-0.16	-0.13	0.57	-0.05	0.15	0.03
52	1	0.06	0.06	-0.24	0.09	0.10	-0.35	0.06	0.01	-0.14
53	1	0.06	0.05	-0.17	0.09	0.07	-0.25	0.03	0.10	-0.01
54	1	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.02	0.06	-0.33	0.05
55	1	0.03	0.01	-0.08	0.05	0.02	-0.12	-0.14	0.18	0.00
56	1	0.05	0.04	-0.13	0.07	0.06	-0.19	-0.02	-0.14	-0.12
57	1	-0.05	-0.03	0.11	-0.07	-0.04	0.15	-0.16	0.02	0.27
58	1	-0.06	-0.03	0.14	-0.09	-0.03	0.20	-0.06	-0.26	0.26
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08	0.04	-0.02
60	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.01	-0.16	0.00
61	1	0.00	0.02	0.02	0.00	0.03	0.03	-0.02	-0.19	0.03
62	1	0.00	0.05	0.01	0.01	0.08	0.02	0.00	-0.13	0.03
63	1	0.00	-0.04	0.01	0.00	-0.06	0.02	-0.02	-0.20	0.01

76

77

78

	A			A			A			
Frequencies	--	877.2606		879.9590		896.9117				
Red. masses	--	3.2128		3.1209		1.6665				
Frc consts	--	1.4568		1.4238		0.7899				
IR Inten	--	1.0442		1.7637		3.6035				
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	0.08	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.03

2	6	-0.03	0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01	-0.04
3	6	0.03	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01	-0.04
4	6	-0.08	-0.01	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.08
5	6	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.04
6	6	-0.05	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
7	6	0.10	0.01	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.03
8	6	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.05
9	6	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00
10	6	-0.05	0.01	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01
11	6	0.06	0.02	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.07	0.00	-0.06
12	6	0.02	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.02	0.06
13	6	0.04	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.04
14	6	-0.12	-0.04	0.15	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.02
15	6	-0.11	-0.02	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.05
16	6	0.16	-0.02	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.04
17	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.12	0.03	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.25	-0.01	0.31
19	1	0.07	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.21
20	1	0.29	0.01	-0.27	0.01	0.00	0.00	-0.06	-0.01	0.05
21	1	0.03	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.23	0.01	0.24
22	1	-0.10	0.03	0.04	0.00	0.00	0.00	0.19	-0.01	-0.18
23	1	0.22	0.01	-0.17	0.01	0.00	-0.01	0.17	0.02	-0.19
24	1	0.19	0.04	-0.20	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.01	0.05
25	1	-0.40	-0.06	0.40	0.00	0.00	0.00	0.31	0.04	-0.30
26	1	-0.28	0.00	0.16	0.00	0.00	0.00	0.38	0.05	-0.29
27	6	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.02
28	1	0.02	-0.07	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.07	-0.02
29	1	0.03	0.06	-0.03	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.03
30	1	0.00	0.03	-0.04	0.00	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.03
31	8	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01	-0.10	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.06	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.09	0.00	0.00	0.00
37	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.06	0.00	0.00	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.05	-0.12	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.07	0.00	0.00	0.00
43	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00
45	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.05	-0.09	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.10	0.17	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.07	0.15	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	-0.19	0.00	0.00	0.00
49	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	0.09	0.00	0.00	0.01
51	1	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.01	-0.13	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.01	0.12	0.08	-0.31	0.00	0.00	0.00
53	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.06	0.00	0.00	0.01
54	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.03	0.14	0.00	0.00	0.00
55	1	0.00	0.00	0.00	0.09	0.02	-0.17	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.08	0.09	-0.19	0.00	0.00	0.00
57	1	0.01	0.00	-0.01	-0.20	-0.21	0.56	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	-0.01	-0.19	-0.02	0.32	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
62	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.01	0.00
63	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.02	0.00	0.00	0.00

		A			A			A		
Frequencies		901.1090			915.8643			918.8042		
Red. masses		1.7853			1.6684			1.6886		
Frc consts		0.8541			0.8245			0.8399		
IR Inten		2.1308			152.4594			153.0777		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.08	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.04	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.28	-0.01	-0.31	0.01	0.00	-0.01
19	1	0.00	0.00	0.00	0.11	0.00	-0.14	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	0.30	0.01	-0.31	0.01	0.00	-0.01
21	1	0.00	0.00	0.00	0.29	0.02	-0.31	0.01	0.00	-0.01
22	1	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.24	0.02	-0.26	0.01	0.00	-0.01
24	1	0.00	0.00	0.00	0.13	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	0.19	0.03	-0.19	0.01	0.00	-0.01
26	1	0.00	0.00	0.00	0.28	0.03	-0.20	0.01	0.00	-0.01
27	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.02	0.00	0.01	0.00
28	1	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.06	0.03	0.00	0.02	-0.01
29	1	-0.01	0.00	-0.01	0.04	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.01
30	1	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.02	-0.03	0.00	-0.02	0.01
31	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	-0.01	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	0.01	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.04
35	6	0.01	0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.05
36	6	-0.03	-0.02	0.12	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.09
37	6	0.01	0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.07
38	6	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.07
39	6	0.02	0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.09
40	6	-0.01	-0.02	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.03
41	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.03
42	6	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.05
43	6	0.04	0.02	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.09
44	6	-0.03	-0.03	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.06
45	6	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.03
46	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.03
47	6	-0.02	-0.02	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.05
48	6	0.02	0.03	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02
49	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	-0.10	-0.13	0.41	0.00	0.00	0.01	0.09	0.10	-0.38
51	1	-0.09	-0.07	0.30	0.00	0.00	0.00	0.04	0.05	-0.18
52	1	-0.03	-0.03	0.07	0.00	0.00	0.01	0.12	0.11	-0.40
53	1	-0.11	-0.08	0.34	0.00	0.00	0.01	0.11	0.11	-0.38
54	1	0.08	0.05	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.06
55	1	0.08	0.08	-0.23	0.00	0.00	0.01	0.11	0.10	-0.34
56	1	-0.03	-0.03	0.07	0.00	0.00	0.00	0.05	0.05	-0.16
57	1	0.14	0.11	-0.33	0.00	0.00	0.01	0.10	0.08	-0.24



58	1	0.19	0.09	-0.39	0.00	0.00	0.01	0.15	0.06	-0.32
59	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
61	1	0.00	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01
62	1	0.01	0.04	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.01
63	1	0.00	-0.06	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
			82			83			84	
			A			A			A	
Frequencies	--	929.4593			972.3769			973.2543		
Red. masses	--	2.0990			1.4477			1.4689		
Frc consts	--	1.0684			0.8065			0.8198		
IR Inten	--	18.0289			0.0776			0.8271		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.04	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
3	6	0.01	0.02	0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.01	0.01	0.01	0.02	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.01	0.00	-0.01	0.08	0.01	-0.09	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.01	0.01	-0.08	-0.02	0.08	0.00	0.00	0.00
11	6	0.01	0.00	-0.01	0.04	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.03	-0.05	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.04	0.04	-0.04	-0.05	0.01	0.10	0.00	0.00	0.00
19	1	0.13	0.00	-0.02	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
20	1	0.02	0.01	-0.04	-0.17	-0.02	0.19	-0.01	0.00	0.01
21	1	0.04	-0.01	-0.05	0.01	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.01	0.00	0.00	-0.45	-0.03	0.46	-0.02	0.00	0.02
23	1	0.02	-0.01	-0.03	0.00	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00
24	1	0.01	0.02	-0.02	0.45	0.02	-0.45	0.02	0.00	-0.02
25	1	0.02	0.00	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
26	1	0.02	0.01	-0.02	0.17	0.04	-0.15	0.01	0.00	-0.01
27	6	0.13	0.18	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	-0.10	0.46	-0.25	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	-0.44	0.01	-0.31	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
30	1	0.07	-0.44	0.32	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
31	8	-0.07	-0.13	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02
35	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02
37	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.04
38	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01
39	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.05
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.04	-0.11
41	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.04	0.10
43	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	-0.05
44	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.01
45	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.02
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.01
49	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
50	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	0.10

51	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.03
52	1	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.01	-0.08	-0.09	0.22
53	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01
54	1	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.02	-0.20	-0.16	0.59
55	1	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.05
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.19	0.16	-0.59
57	1	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02
58	1	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	0.10	0.08	-0.20
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.03	0.01
62	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.01
63	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.05	0.01
			85			86			87	
			A			A			A	
Frequencies	--		981.8558			987.0209			1008.9460	
Red. masses	--		3.7135			4.4541			3.2075	
Frc consts	--		2.1093			2.5566			1.9238	
IR Inten	--		19.6263			3.6554			40.9986	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.06	0.07	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.08	0.12	0.06	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.10	0.06	0.09	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00
8	6	0.01	0.00	0.00	0.08	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.15	0.04	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.05	-0.07	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.11	0.09	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.10	0.06	0.10	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.06	-0.06	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.16	-0.11	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.17	-0.12	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.05	0.04	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.01	0.00	0.00	-0.23	-0.17	-0.18	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.13	0.09	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.01	0.00	0.01	-0.11	0.22	-0.02	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.18	0.13	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.02	0.00	0.02	-0.08	0.00	0.18	-0.01	0.00	0.01
23	1	0.00	0.00	-0.01	-0.18	-0.23	-0.25	0.01	0.00	0.00
24	1	0.02	0.00	-0.02	0.13	0.16	-0.09	0.00	0.00	-0.01
25	1	0.01	0.01	-0.01	0.02	0.23	-0.15	0.01	0.00	-0.01
26	1	0.01	0.00	-0.01	0.14	-0.14	0.11	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.09	-0.06	0.00	0.00	0.00
29	1	0.01	0.00	0.00	0.06	0.14	-0.06	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.09	-0.11	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	-0.03	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.01
34	6	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	-0.01
35	6	-0.07	-0.08	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.10	0.10	0.03
36	6	0.07	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.02	0.00
37	6	-0.13	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.01
38	6	-0.11	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.01	0.01
39	6	0.07	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00
40	6	-0.06	0.07	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.06	-0.03
41	6	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01
42	6	-0.04	-0.07	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.13	0.08	0.07
43	6	0.05	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.02

44	6	-0.10	-0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.03
45	6	-0.12	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.01	0.01
46	6	0.07	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.02
47	6	0.17	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.13	-0.06
48	6	0.18	-0.01	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.14	-0.06
49	6	-0.03	0.11	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.14	0.04
50	1	0.25	-0.05	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.11	0.00	-0.14
51	1	-0.11	-0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.04	0.12	0.17
52	1	-0.03	-0.16	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.02
53	1	-0.02	0.19	0.04	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.09	0.02
54	1	0.00	0.12	-0.21	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.07	0.05
55	1	0.29	-0.03	0.11	-0.01	0.00	0.00	-0.10	0.00	-0.06
56	1	-0.14	-0.12	0.15	0.00	0.00	0.00	0.14	0.10	0.04
57	1	-0.07	-0.21	0.03	0.00	0.01	-0.01	0.04	0.09	-0.05
58	1	-0.06	0.18	0.07	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.05	0.03
59	8	0.08	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.10	0.05	-0.03
60	6	-0.08	-0.10	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.11	0.00
61	1	0.06	0.23	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.11	0.42	-0.04
62	1	0.12	-0.35	0.08	0.00	0.00	0.00	0.17	-0.52	0.11
63	1	0.11	-0.27	0.01	0.00	0.01	0.00	0.17	-0.33	0.00
			88			89			90	
			A			A			A	
Frequencies	--	1014.7037			1017.0524			1025.8928		
Red. masses	--	1.3991			1.3923			5.1291		
Frc consts	--	0.8488			0.8486			3.1805		
IR Inten	--	1.2631			1.2645			22.9582		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.03	-0.14
2	6	0.08	-0.01	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.05
3	6	-0.08	0.01	0.09	0.00	0.00	0.00	0.05	0.17	0.01
4	6	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00
5	6	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
6	6	-0.04	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01
7	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02
8	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.14	-0.02	-0.17
9	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.02
10	6	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.06	0.20	0.07
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
12	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.01
13	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.01
14	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01
15	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.18	0.09
16	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.18	0.09
17	6	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.15	-0.08
18	1	-0.42	-0.01	0.48	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.07	-0.12
19	1	0.42	0.01	-0.46	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.24	0.06
20	1	-0.12	0.00	0.12	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00
21	1	0.22	0.00	-0.22	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.02	0.05
22	1	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.24	-0.04	-0.09
23	1	0.08	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.08	0.01	-0.06
24	1	-0.08	0.01	0.08	0.00	0.00	0.00	0.07	0.21	0.08
25	1	0.03	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.15	0.02	-0.17
26	1	-0.05	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.00	0.12
27	6	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.12	0.00
28	1	-0.01	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	0.06	0.13	0.18
29	1	0.02	-0.06	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.35	0.24
30	1	-0.04	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.05	0.18
31	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.02	0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.11	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.11	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00

37	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
38	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
43	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
45	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
49	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.17	0.59	0.00	0.00	0.00
51	1	0.00	0.00	0.00	0.16	0.16	-0.57	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.04	0.17	0.00	0.00	0.00
53	1	0.00	0.00	0.00	0.09	0.08	-0.30	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01
55	1	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	-0.12	0.00	0.00	-0.01
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.11	0.00	0.00	0.00
57	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.05	0.00	0.00	-0.01
58	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.07	0.00	0.00	0.01
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.04	0.00	0.00	0.00
62	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	0.03	0.00	0.00	0.00
63	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.10	0.02	0.00	0.00	0.00

91				92			93		
A				A			A		
Frequencies	--	1033.4822		1034.1898		1041.7505			
Red. masses	--	1.3697		1.3452		1.3701			
Frc consts	--	0.8620		0.8477		0.8761			
IR Inten	--	2.7412		1.6416		0.1169			
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
2	6	-0.02	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01
3	6	0.03	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01
4	6	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
5	6	0.04	0.00	-0.05	-0.01	0.00	0.01	0.05	0.00
6	6	-0.04	-0.01	0.03	0.01	0.00	0.00	-0.05	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
8	6	0.04	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
9	6	-0.06	0.00	0.07	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
10	6	0.03	-0.02	-0.04	0.00	0.00	0.01	0.03	0.02
11	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01
12	6	-0.05	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.07	0.00
13	6	0.04	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00
14	6	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
15	6	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02
16	6	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
17	6	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
18	1	0.10	0.02	-0.11	-0.02	0.00	0.02	0.07	-0.01
19	1	-0.13	-0.02	0.15	0.02	0.00	-0.02	-0.12	0.02
20	1	-0.23	-0.01	0.25	0.03	0.00	-0.03	-0.28	0.00
21	1	0.19	0.01	-0.21	-0.03	0.00	0.03	0.29	0.01
22	1	-0.18	0.00	0.20	0.02	0.00	-0.03	0.04	-0.01
23	1	0.37	0.03	-0.34	-0.05	0.00	0.05	0.04	-0.01
24	1	-0.19	-0.03	0.17	0.03	0.00	-0.02	-0.10	0.00
25	1	0.25	0.04	-0.24	-0.03	0.00	0.02	-0.35	-0.06
26	1	-0.33	-0.05	0.25	0.04	0.01	-0.03	0.40	0.06
27	6	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
28	1	0.01	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
29	1	-0.01	0.05	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02

30	1	0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
31	8	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.01
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.01
37	6	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.05	0.01	0.00	-0.02
38	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.02
39	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.02	-0.05	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.02	0.08	0.00	0.00	0.01
42	6	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.04	0.01	0.00	-0.01
43	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.01	0.05	0.01	0.00	-0.02
45	6	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.02	-0.06	-0.01	0.00	0.02
46	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
50	1	0.01	0.01	-0.02	0.05	0.05	-0.15	0.00	0.01	-0.03
51	1	-0.01	-0.01	0.02	-0.05	-0.06	0.18	-0.01	-0.01	0.04
52	1	-0.01	-0.01	0.03	-0.08	-0.09	0.26	-0.03	-0.02	0.09
53	1	0.01	0.01	-0.02	0.06	0.07	-0.21	0.03	0.02	-0.09
54	1	-0.01	-0.01	0.03	-0.09	-0.07	0.27	0.00	0.00	0.01
55	1	0.02	0.01	-0.05	0.18	0.12	-0.44	0.01	0.02	-0.05
56	1	-0.01	-0.01	0.02	-0.08	-0.06	0.21	-0.02	-0.02	0.05
57	1	0.02	0.02	-0.05	0.14	0.12	-0.34	-0.04	-0.04	0.11
58	1	-0.03	-0.02	0.06	-0.21	-0.10	0.40	0.05	0.03	-0.11
59	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
61	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.00	0.01	0.00
62	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00
63	1	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00

94

95

96

		A			A			A		
Frequencies --		1042.1639			1048.3237			1049.2878		
Red. masses --		1.3613			1.4226			1.4286		
Frc consts --		0.8711			0.9212			0.9267		
IR Inten --		0.1988			0.6324			0.4580		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.01	0.00	0.01	0.05	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00
6	6	0.01	0.00	-0.02	-0.06	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.07	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.01	0.00	0.00	-0.05	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.02	0.00	0.01	-0.04	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
13	6	0.01	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.01	0.00	0.02	0.05	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00
19	1	0.03	0.00	-0.03	-0.07	0.00	0.08	0.00	0.00	0.00
20	1	0.07	0.00	-0.07	-0.23	-0.01	0.24	0.01	0.00	-0.01
21	1	-0.07	0.00	0.07	0.27	0.01	-0.28	-0.01	0.00	0.01
22	1	-0.01	0.00	0.02	0.26	0.02	-0.27	-0.01	0.00	0.01

23	1	0.00	0.00	0.01	-0.36	-0.01	0.39	0.01	0.00	-0.01
24	1	0.02	0.00	-0.03	0.23	0.02	-0.24	-0.01	0.00	0.01
25	1	0.09	0.02	-0.09	0.19	0.03	-0.20	-0.01	0.00	0.01
26	1	-0.11	-0.02	0.08	-0.20	-0.03	0.16	0.01	0.00	-0.01
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02
35	6	0.01	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.03
36	6	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02
37	6	0.02	0.02	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.07
38	6	-0.01	-0.02	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.08
39	6	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.03
40	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.07
41	6	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.09
42	6	0.02	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.05
43	6	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
44	6	0.04	0.02	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.04
45	6	-0.03	-0.02	0.07	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.03
46	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	6	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
48	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
50	1	0.01	0.03	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.08
51	1	-0.04	-0.04	0.15	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.12
52	1	-0.11	-0.08	0.36	0.00	0.00	0.01	-0.11	-0.10	0.36
53	1	0.12	0.09	-0.36	0.00	0.00	-0.02	0.13	0.11	-0.42
54	1	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.12	0.10	-0.35
55	1	0.03	0.05	-0.18	0.00	0.00	0.01	-0.14	-0.13	0.46
56	1	-0.06	-0.06	0.19	0.00	0.00	-0.01	0.09	0.08	-0.27
57	1	-0.17	-0.16	0.43	0.00	0.00	0.00	0.08	0.07	-0.19
58	1	0.22	0.12	-0.44	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.05	0.17
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
61	1	0.01	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02
62	1	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01
63	1	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01

		A			A			A		
Frequencies	--	1062.8724			1065.9404			1066.9041		
Red. masses	--	1.8945			1.8614			2.2643		
Frc consts	--	1.2610			1.2461			1.5186		
IR Inten	--	8.8991			5.1388			17.1677		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.08	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00



9	6	0.06	-0.12	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.10	-0.07	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.02	0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.03	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.03	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.05	0.04	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.05	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	0.08	0.02	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.01	-0.10	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.04	0.63	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.07	-0.14	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.44	0.13	-0.43	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.04	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	0.04	0.07	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	6	0.01	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.06	-0.07	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	-0.04	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.03	-0.08	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	8	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.05	0.01	-0.02	-0.04	-0.01
34	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.04	0.01
35	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.03	0.02	0.05	0.00	0.01
36	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	-0.07	-0.01	-0.03
37	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.11	0.00	0.03
38	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.02	-0.03
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.02	0.08	-0.03	0.02
40	6	0.00	0.00	0.00	0.13	0.03	0.05	-0.04	0.01	-0.01
41	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.04	0.02	0.01	0.01
42	6	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.05	-0.03	-0.02	-0.02	-0.02
43	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.05	0.02	0.07	0.01	0.03
44	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	-0.10	0.02	-0.04
45	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.01	0.10	-0.02	0.05
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.09	-0.01	-0.05
47	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	-0.01	0.15	0.01	0.05
48	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.07	-0.02	-0.14	0.03	-0.04
49	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.06	0.00	0.01	0.00	0.01
50	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.01	-0.22	0.07	-0.04
51	1	0.00	0.00	0.00	0.08	0.00	0.02	0.19	-0.26	-0.01
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.24	-0.23	0.01
53	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.06	-0.03	-0.24	-0.17	-0.12
54	1	0.00	0.00	0.00	0.37	0.41	0.24	-0.16	-0.18	-0.10
55	1	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.15	-0.04	0.37	-0.02	0.11
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.39	0.50	0.01	-0.07	0.06	0.00
57	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.06	0.00	-0.26	0.27	0.02
58	1	0.00	0.00	0.00	0.07	0.04	-0.02	0.26	0.21	0.10
59	8	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.24	0.04	0.01	0.06	0.00
62	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.11	-0.03	0.02	-0.03	0.01
63	1	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.01	0.01	0.02	-0.03	0.00

	103			104			105		
	A			A			A		
Frequencies	--	1145.8143		1167.5493		1175.6781			
Red. masses	--	2.5615		2.3031		2.2552			
Frc consts	--	1.9814		1.8497		1.8366			
IR Inten	--	0.4470		32.4371		9.4056			
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1 6	-0.01	-0.04	0.00	-0.05	-0.10	-0.02	0.00	0.00	0.00



2	6	-0.02	0.02	-0.02	-0.05	0.08	-0.06	0.00	0.00	0.00
3	6	0.03	0.04	0.02	0.06	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.04	-0.06	-0.04	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
5	6	0.06	0.07	0.06	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.07	-0.06	-0.07	0.02	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
7	6	0.06	0.03	0.06	-0.03	-0.05	-0.03	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.03	-0.01	-0.03	0.02	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.02	0.01	-0.03	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	-0.03	-0.01	0.03	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.00
11	6	0.03	0.06	0.04	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.05	-0.06	-0.07	0.01	0.05	0.02	0.00	0.00	0.00
13	6	0.06	0.06	0.08	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.04	-0.06	-0.06	0.08	-0.12	0.06	0.00	0.00	0.00
15	6	0.09	0.10	0.09	-0.06	0.07	-0.05	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.09	-0.08	-0.09	0.01	0.07	0.02	0.00	0.00	0.00
17	6	0.01	0.00	0.02	-0.10	0.07	-0.10	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.15	-0.09	-0.14	-0.13	0.03	-0.11	0.00	0.00	0.00
19	1	0.20	-0.07	0.20	0.44	-0.23	0.41	0.00	0.00	0.00
20	1	0.25	-0.03	0.24	-0.16	0.13	-0.15	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.06	-0.32	-0.07	0.03	-0.11	0.03	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.01	-0.24	-0.02	0.03	-0.19	0.02	0.00	0.00	0.00
23	1	0.22	0.24	0.23	-0.09	-0.02	-0.09	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.10	0.02	-0.09	0.27	-0.18	0.25	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.27	0.05	-0.23	0.10	0.00	0.09	0.00	0.00	0.00
26	1	0.08	0.34	0.04	-0.05	0.26	-0.02	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
28	1	-0.01	0.01	-0.02	0.09	-0.06	0.14	0.00	0.00	0.00
29	1	0.02	-0.01	0.03	-0.06	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	-0.01	0.04	-0.02	-0.01	-0.07	0.10	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.04	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.14	0.02	0.02
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.11	-0.02
35	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.04	-0.01
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.01
37	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
38	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.01
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.02
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01
41	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	-0.01
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.05	0.01
43	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	-0.02
45	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.13	0.04
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.08	-0.01
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.02	-0.03
49	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.13	-0.02
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.13	-0.01
51	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.37	0.55	0.04
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.22	-0.02
53	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.02
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.09	0.03
55	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.05	0.03
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.33	0.04
57	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.13	0.01
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.22	-0.10
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.01
60	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.06	0.01
61	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.22	-0.07
62	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.07	0.02
63	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.09	0.06	-0.03

		A			A			A		
Frequencies		-- 1191.1419			1191.7239			1209.2008		
Red. masses		-- 1.5120			1.4966			1.3565		
Frc consts		-- 1.2640			1.2523			1.1686		
IR Inten		-- 0.9153			0.3047			4.5766		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.00
2	6	-0.04	0.05	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	-0.01
3	6	0.02	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01
4	6	0.04	0.03	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
5	6	0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.02
6	6	-0.04	0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.02
7	6	0.03	0.04	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.01
8	6	-0.02	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.01
9	6	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.04	-0.04
10	6	0.01	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.03
11	6	-0.04	-0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.03
12	6	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.06	0.01
13	6	0.03	-0.02	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.05	-0.02
14	6	-0.02	-0.07	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.01
15	6	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
16	6	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.04	-0.04
17	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01
18	1	-0.05	0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.11	-0.09
19	1	0.15	-0.11	0.15	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.03
20	1	0.31	-0.26	0.29	0.00	0.00	0.00	0.24	-0.16	0.23
21	1	-0.08	0.56	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.22	-0.03
22	1	-0.02	0.10	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.21	0.00
23	1	-0.05	-0.10	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.30	-0.30	-0.31
24	1	0.04	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.08	0.14
25	1	-0.25	0.22	-0.21	0.00	0.00	0.00	0.26	-0.21	0.21
26	1	0.11	-0.33	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.45	-0.01
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02
29	1	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
30	1	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02
31	8	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
37	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.05	0.02	0.00	0.00	0.00
38	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.01	0.01	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
43	6	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00
45	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.05	0.00	0.00	-0.01	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.07	0.03	0.03	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00
49	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.07	-0.01	0.02	0.00	0.01
51	1	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.19	0.02	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.47	0.07	-0.02	0.03	0.00
53	1	0.00	0.00	0.00	-0.24	-0.48	-0.20	-0.01	-0.02	-0.01
54	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.10	-0.04	-0.01	-0.01	-0.01
55	1	0.00	0.00	0.00	0.13	0.02	0.05	0.05	0.00	0.01
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.03	-0.01	-0.01	0.01	0.00
57	1	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.37	-0.08	-0.01	0.03	0.01

58	1	0.00	0.00	0.00	0.10	0.29	0.17	-0.01	-0.03	-0.02
59	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
62	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
		109			110			111		
		A			A			A		
Frequencies	--	1209.5167			1228.3727			1228.5042		
Red. masses	--	1.3797			1.3235			1.3341		
Frc consts	--	1.1892			1.1766			1.1863		
IR Inten	--	6.6644			1.2144			4.6736		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.01	-0.03	-0.02	-0.03
3	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.03	0.02	0.02
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.03	-0.02	0.03
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.04	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.02	0.02
10	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01
11	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.02
12	6	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01
13	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.02
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.07	0.01
15	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.02	-0.04	-0.05	-0.05
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.02
18	1	0.01	0.01	0.01	0.11	0.10	0.10	-0.23	-0.20	-0.20
19	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.02	-0.06	0.13	-0.04	0.12
20	1	-0.02	0.01	-0.02	-0.02	0.02	-0.02	0.04	-0.04	0.04
21	1	0.00	-0.02	0.00	0.01	-0.17	0.01	-0.03	0.33	-0.01
22	1	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.12	0.00	0.01	-0.23	0.01
23	1	0.03	0.03	0.03	-0.14	-0.15	-0.14	0.27	0.29	0.29
24	1	-0.01	0.01	-0.01	0.09	-0.05	0.08	-0.17	0.10	-0.16
25	1	-0.02	0.02	-0.02	-0.11	0.07	-0.11	0.23	-0.15	0.22
26	1	0.01	-0.04	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.04	0.05	-0.01
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.03
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.03	-0.02
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	-0.03	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	0.03	0.01	0.01	-0.04	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.00
35	6	-0.01	0.01	0.00	0.03	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00
36	6	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.04	0.00	0.01	-0.02	0.00
37	6	-0.01	0.04	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00
38	6	0.01	-0.04	0.00	0.01	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
39	6	-0.03	-0.02	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01
40	6	-0.03	-0.03	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00
41	6	0.07	-0.01	0.02	0.03	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
42	6	-0.03	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
43	6	-0.04	0.03	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.01	0.00
44	6	0.03	0.05	0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00
45	6	0.00	-0.06	-0.02	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00
46	6	-0.03	-0.02	-0.01	0.04	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01
47	6	0.00	0.01	0.00	-0.08	0.00	-0.02	-0.04	0.00	-0.01
48	6	0.07	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
49	6	-0.01	0.02	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00
50	1	0.15	0.00	0.04	-0.34	0.04	-0.07	-0.17	0.02	-0.03

51	1	-0.01	0.01	0.00	0.10	-0.12	0.00	0.05	-0.06	0.00
52	1	-0.18	0.34	0.04	0.04	-0.10	-0.01	0.02	-0.05	-0.01
53	1	-0.07	-0.18	-0.07	0.17	0.28	0.13	0.09	0.14	0.07
54	1	-0.12	-0.16	-0.08	-0.12	-0.18	-0.09	-0.06	-0.09	-0.04
55	1	0.52	-0.05	0.15	0.47	-0.04	0.14	0.24	-0.02	0.07
56	1	-0.11	0.18	0.02	-0.13	0.22	0.02	-0.06	0.11	0.01
57	1	-0.14	0.36	0.08	0.17	-0.31	-0.04	0.09	-0.16	-0.02
58	1	-0.16	-0.37	-0.21	0.00	0.05	0.04	0.00	0.03	0.02
59	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
61	1	-0.01	-0.03	0.01	0.01	0.05	0.00	0.01	0.02	0.00
62	1	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	1	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			112			113			114	
			A			A			A	
Frequencies	--	1240.9489			1242.2730			1266.0754		
Red. masses	--	1.5770			1.5961			2.0450		
Frc consts	--	1.4308			1.4512			1.9313		
IR Inten	--	26.2378			34.9620			5.8609		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.03	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.03	0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.04	-0.06	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.01	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.03	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.04	0.13	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.05	0.02	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.04	0.05	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.02	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.38	-0.33	-0.32	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	0.24	-0.09	0.22	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.20	0.10	-0.19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	-0.25	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.01	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
23	1	-0.18	-0.19	-0.19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.04	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.14	0.04	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	0.02	-0.38	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	-0.05	0.03	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	8	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.04	-0.03	-0.01
34	6	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.01	0.01	0.01	0.05	0.02
35	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	-0.01	0.02	0.02	0.01
36	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.07	0.02	0.08	-0.10	0.00
37	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.06	-0.03	-0.03
38	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.01	-0.03	0.03	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	-0.02	0.06	0.15	0.06
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.04	0.00
41	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.03	0.01	0.01
43	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.06	0.01	0.04	-0.12	-0.02

44	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01	0.02	0.00	-0.01	0.00
45	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.02	-0.03	0.03	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.12	-0.06	0.00	-0.03	-0.01
47	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.03	-0.01	-0.07	0.05	-0.01
48	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.00	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01
49	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.01	0.00	0.02	0.01
50	1	0.00	0.00	0.00	0.63	-0.06	0.13	0.11	0.05	0.04
51	1	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.26	0.01	-0.12	0.29	0.04
52	1	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.21	-0.01	-0.08	-0.02	-0.03
53	1	0.00	0.00	0.00	0.14	0.16	0.09	-0.09	-0.04	-0.04
54	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.06	-0.03	-0.26	-0.56	-0.24
55	1	0.00	0.00	0.00	0.29	-0.02	0.09	-0.19	0.01	-0.06
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.17	0.40	0.06
57	1	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.16	0.00	-0.09	0.14	0.01
58	1	0.00	0.00	0.00	0.22	0.29	0.16	0.09	0.23	0.11
59	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.09	0.00	-0.01	-0.01	0.01
62	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00
63	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00
		115			116			117		
		A			A			A		
Frequencies	--	1266.7207			1278.0180			1283.4241		
Red. masses	--	2.0795			2.4104			2.1837		
Frc consts	--	1.9660			2.3196			2.1192		
IR Inten	--	8.6319			262.0725			111.3988		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.05	0.01	-0.11	-0.07	-0.08	0.00	0.00	0.00
2	6	0.01	-0.05	0.01	-0.03	0.07	-0.03	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	-0.03	0.00	0.03	0.06	0.02	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.09	0.04	-0.09	0.12	-0.06	0.11	-0.01	0.00	-0.01
5	6	0.02	0.07	0.02	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
6	6	0.03	-0.01	0.03	-0.03	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
7	6	0.03	-0.18	0.03	0.02	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.04	0.00	-0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.01	-0.03	-0.02	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.07	0.07	-0.07	-0.07	0.06	-0.07	0.01	0.00	0.01
12	6	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
13	6	0.02	0.00	0.03	0.03	0.03	0.04	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.01	0.02	-0.01	-0.05	-0.06	-0.07	0.00	0.00	0.00
15	6	0.06	0.00	0.06	0.01	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.02	0.00	0.02	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
17	6	0.01	-0.01	0.00	0.09	-0.05	0.11	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.02	-0.09	-0.03	0.07	0.17	0.06	0.00	0.00	0.00
19	1	0.20	-0.17	0.18	-0.20	0.22	-0.19	0.02	-0.02	0.02
20	1	0.04	0.07	0.04	-0.32	0.16	-0.30	0.02	-0.01	0.02
21	1	0.04	0.12	0.04	-0.04	0.09	-0.04	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.11	0.66	-0.07	-0.03	0.18	-0.02	0.00	0.00	0.00
23	1	0.12	0.14	0.13	0.05	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00
24	1	0.26	-0.21	0.25	0.27	-0.21	0.26	-0.02	0.02	-0.02
25	1	0.11	-0.06	0.11	0.21	-0.11	0.19	-0.01	0.01	-0.01
26	1	0.07	-0.24	0.02	0.04	0.23	0.02	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	-0.01	0.00	-0.02	-0.14	0.06	-0.19	0.00	0.00	0.01
29	1	0.00	0.01	-0.01	0.11	0.03	0.06	0.00	0.00	0.00
30	1	0.01	0.00	-0.01	0.05	0.08	-0.15	0.00	0.00	0.00
31	8	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.05	-0.01	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.02
35	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.02	-0.02
36	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.09	0.18	0.02

37	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01
38	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.02	0.01
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	-0.01
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.01
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01	0.02
43	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.05	-0.13	-0.01
44	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
45	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.02	-0.02
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.02	0.03
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.04	-0.02
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	0.02
49	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.04	0.07	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.08	0.00
51	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.17	-0.48	-0.07
52	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.24	-0.37	-0.03
53	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.10	-0.02
54	1	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.04	-0.09	-0.04
55	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.05	-0.01
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.21	0.48	0.07
57	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.16	0.25	0.02
58	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.10	-0.02	-0.02
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.11	0.02
62	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.02
63	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.01	0.01

118				119			120			
A				A			A			
Frequencies	--	1288.8733		1292.0064		1300.0570				
Red. masses	--	1.9246		1.7997		1.8512				
Frc consts	--	1.8837		1.7700		1.8435				
IR Inten	--	9.3638		6.7340		149.8827				
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	0.05	0.04	0.00	0.00	0.00	0.10	0.07	0.08
2	6	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01
3	6	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
4	6	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.07	0.07
5	6	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.02
6	6	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.02
7	6	0.02	0.15	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00
8	6	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
9	6	0.03	-0.07	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01
10	6	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00
11	6	-0.11	0.05	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	0.03
12	6	0.01	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
13	6	0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01
14	6	0.01	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
15	6	-0.02	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.07	0.00
16	6	0.02	-0.06	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	-0.03
17	6	-0.03	0.02	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.05	-0.10
18	1	-0.11	-0.14	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.28	-0.23	-0.24
19	1	-0.06	0.03	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.37	0.25	-0.35
20	1	0.16	-0.12	0.15	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.12	-0.18
21	1	0.00	-0.38	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.05	0.33	-0.04
22	1	0.06	-0.36	0.04	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.18	-0.01
23	1	0.06	-0.05	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00
24	1	0.29	-0.23	0.28	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.08	0.08
25	1	0.27	-0.13	0.26	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.08	-0.15
26	1	0.08	-0.34	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.01
27	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00
28	1	0.06	-0.03	0.08	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.07	0.20
29	1	-0.05	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.04	-0.05

30	1	-0.03	-0.02	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.04	0.14
31	8	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00
37	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
38	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	0.10	0.11	0.06	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.02	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	6	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.11	-0.01	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
45	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00
49	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.04	-0.02	0.01	0.00	0.00
51	1	0.00	-0.01	0.00	0.04	-0.12	-0.02	0.01	-0.02	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.16	-0.34	-0.04	0.00	-0.01	0.00
53	1	0.00	0.00	0.00	-0.25	-0.35	-0.17	0.00	-0.01	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.37	-0.16	0.00	0.00	0.00
55	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.09	-0.02	0.00	0.00	0.00
56	1	-0.01	0.01	0.00	0.13	-0.28	-0.04	0.00	0.01	0.00
57	1	0.00	0.01	0.00	0.21	-0.31	-0.02	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.27	-0.14	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.00
62	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
63	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		121			122			123		
		A			A			A		
Frequencies	--	1313.2697			1366.2438			1366.3027		
Red. masses	--	2.6325			2.9116			2.9214		
Frc consts	--	2.6750			3.2021			3.2132		
IR Inten	--	268.7909			2.4475			7.8476		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.05	0.09	0.04	0.04	0.07	0.03
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.09	0.01	0.00	-0.06	0.01
4	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.14	0.04	0.03	0.10	0.03
5	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.02	-0.04	-0.03	-0.01	-0.03
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.00	-0.02	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.02	0.06	0.05	0.01	0.04
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04	-0.03	-0.02	0.03	-0.02
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.02	0.01	0.03	0.01
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.07	-0.05	-0.03	-0.05	-0.04
12	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.02	0.04	0.03	0.01	0.03
13	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.02	0.01	0.02	0.01
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.12	-0.08	-0.05	-0.08	-0.06
15	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.07	0.02	0.01	-0.05	0.01
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.06	0.00	0.00	0.04	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.03	0.00	0.02	-0.02
18	1	-0.01	-0.01	-0.01	-0.21	-0.20	-0.19	-0.15	-0.14	-0.13
19	1	-0.01	0.00	-0.01	0.09	-0.15	0.08	0.06	-0.11	0.06
20	1	0.00	0.00	0.00	-0.21	0.09	-0.20	-0.15	0.06	-0.14
21	1	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.28	0.00	0.01	-0.20	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.05	-0.03	-0.02	0.03	-0.02

23	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.01	0.01
24	1	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.14	-0.13	-0.09	0.10	-0.09
25	1	0.00	0.00	-0.01	0.06	0.01	0.06	0.04	0.01	0.04
26	1	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.39	0.01	-0.02	0.28	0.01
27	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.02	0.01	-0.01	0.02
28	1	0.01	0.00	0.01	-0.03	0.00	-0.05	-0.02	0.00	-0.03
29	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.04	-0.02	0.01	-0.02
30	1	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	-0.01	0.01	0.02	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.00	-0.02	-0.02	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.21	-0.01	0.04	-0.07	-0.02	-0.02	0.11	0.03	0.03
34	6	0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
35	6	-0.01	-0.01	0.00	0.03	0.05	0.02	-0.04	-0.08	-0.03
36	6	0.00	-0.06	-0.02	-0.09	-0.05	-0.04	0.13	0.07	0.05
37	6	0.02	-0.02	0.00	0.04	-0.01	0.01	-0.05	0.02	-0.01
38	6	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.01	-0.01
39	6	-0.03	-0.01	-0.01	-0.06	0.03	-0.01	0.08	-0.04	0.01
40	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.00	0.06	0.02
41	6	-0.01	0.02	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.02	-0.01
42	6	-0.01	-0.03	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	0.04	0.01	0.02
43	6	0.04	0.02	0.02	0.06	0.01	0.02	-0.09	-0.01	-0.04
44	6	-0.01	0.01	0.00	-0.04	0.02	-0.01	0.05	-0.02	0.01
45	6	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.01
46	6	0.03	-0.06	0.00	0.10	0.01	0.04	-0.14	-0.02	-0.06
47	6	0.02	0.08	0.03	0.01	0.05	0.02	-0.02	-0.07	-0.03
48	6	-0.06	-0.02	-0.03	-0.02	-0.04	-0.02	0.03	0.05	0.02
49	6	-0.10	0.22	-0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.01	0.04	-0.02
50	1	-0.54	0.02	-0.11	0.23	-0.02	0.05	-0.33	0.03	-0.08
51	1	-0.25	0.44	0.03	-0.01	0.13	0.03	0.01	-0.19	-0.05
52	1	-0.03	0.06	0.01	0.13	-0.18	-0.01	-0.18	0.25	0.01
53	1	0.10	0.19	0.08	0.11	0.16	0.08	-0.15	-0.22	-0.11
54	1	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.04	-0.01	-0.01	0.06	0.01
55	1	0.03	0.02	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.02	-0.01
56	1	0.04	-0.13	-0.02	0.05	-0.16	-0.03	-0.07	0.22	0.04
57	1	-0.14	0.25	0.03	-0.06	0.04	0.00	0.08	-0.06	0.01
58	1	-0.07	-0.13	-0.07	-0.14	-0.20	-0.11	0.20	0.28	0.16
59	8	-0.03	-0.04	0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.03	-0.02	0.01
60	6	0.06	-0.08	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00
61	1	-0.03	-0.23	0.09	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.01	0.01
62	1	-0.07	0.02	-0.06	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.01	-0.01
63	1	-0.16	0.02	0.03	0.02	-0.03	0.01	-0.03	0.04	-0.01

		124			125			126		
		A			A			A		
Frequencies	--	1375.7345			1388.3799			1394.5360		
Red. masses	--	1.8268			4.8271			2.9786		
Frc consts	--	2.0371			5.4822			3.4128		
IR Inten	--	16.2692			26.5662			16.2894		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.12	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.07	-0.04
2	6	0.02	0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.05	-0.07
3	6	-0.03	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.01	0.07
4	6	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.08	0.01
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.01
6	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.02
7	6	0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.04	0.08
8	6	-0.01	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.13	-0.01
9	6	0.03	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.07	-0.07
10	6	-0.03	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.05	0.08
11	6	-0.01	-0.08	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.13	0.01
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.02
13	6	0.01	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
14	6	-0.07	0.05	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.01	0.07
15	6	0.04	-0.03	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.06	-0.05



16	6	-0.01	0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.04	-0.05
17	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.08	0.06
18	1	0.08	0.10	0.06	0.00	0.00	0.00	0.13	0.12	0.07
19	1	0.04	-0.04	0.05	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.02
20	1	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.21	0.11	-0.20
21	1	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.18	-0.01
22	1	-0.03	0.16	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.16	0.01
23	1	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
24	1	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.06	-0.08
25	1	0.20	-0.13	0.20	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.05	-0.12
26	1	-0.01	0.10	0.02	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.29	-0.01
27	6	-0.04	0.04	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.06	-0.11
28	1	0.44	-0.14	0.63	0.00	0.00	0.00	0.38	-0.15	0.49
29	1	-0.09	-0.08	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.07	0.08
30	1	-0.26	-0.10	0.26	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.11	0.19
31	8	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.24	0.07	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.09	0.04	0.00	0.00	0.00
37	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
38	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.10	-0.02	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.10	0.11	0.06	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.02	-0.04	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.17	-0.02	0.00	0.00	0.00
43	6	0.00	0.00	0.00	0.12	0.14	0.08	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
45	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.16	-0.02	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00
49	6	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.13	-0.01	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
51	1	0.00	0.00	0.00	0.04	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.25	0.02	0.00	0.00	0.00
53	1	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.14	-0.07	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.27	-0.12	0.00	0.00	0.00
55	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00
57	1	0.00	0.00	0.00	-0.25	0.44	0.02	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.25	-0.17	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	0.05	0.12	-0.08	0.00	0.00	0.00
62	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00
63	1	0.00	0.00	0.00	0.07	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00

		127			128			129		
		A			A			A		
Frequencies	--	1415.7734			1419.6800			1432.3402		
Red. masses	--	3.3602			3.3093			1.6183		
Frc consts	--	3.9683			3.9297			1.9561		
IR Inten	--	121.5492			225.0953			66.3617		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.16	-0.06	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.06	0.03	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.02	-0.04	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.01	-0.09	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.05	0.03	0.00	0.00	0.00

9	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.05	0.07	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.07	-0.07	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.14	-0.03	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.16	-0.13	0.14	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.03	0.06	0.00	0.00	0.00
18	1	0.01	0.01	0.01	-0.14	-0.23	-0.14	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.10	0.13	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.08	0.13	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	-0.01	0.00	0.05	0.13	0.05	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.10	0.03	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.06	0.05	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	-0.25	0.16	-0.26	0.00	0.00	0.00
26	1	0.00	-0.01	0.00	-0.05	0.31	-0.03	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.04	-0.08	0.00	0.00	0.00
28	1	-0.01	0.00	-0.01	0.29	-0.11	0.39	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.03	0.09	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.01	0.00	-0.13	-0.10	0.12	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.01	0.18	0.06	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00
34	6	0.02	-0.08	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.00
35	6	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04	0.00
36	6	-0.01	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
37	6	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01
38	6	0.06	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01
39	6	-0.13	0.10	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.01
40	6	0.00	-0.09	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.01
41	6	0.05	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00
42	6	-0.05	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.05	-0.01
43	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01
44	6	0.05	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.01
45	6	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.04	0.02
46	6	-0.11	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.04	-0.01
47	6	0.06	0.12	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.07	0.01
48	6	0.10	-0.21	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.06	-0.09	-0.01
49	6	0.09	-0.06	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
50	1	-0.35	-0.05	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	-0.01
51	1	0.07	-0.16	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.05	-0.10	-0.01
52	1	0.13	-0.24	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01
53	1	0.14	0.06	0.06	0.00	0.00	0.00	0.04	0.05	0.03
54	1	0.00	-0.09	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.05	-0.02
55	1	0.06	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.02	-0.01
56	1	0.05	-0.15	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.10	0.01
57	1	-0.17	0.35	0.03	-0.01	0.01	0.00	-0.03	0.00	-0.01
58	1	0.17	0.32	0.15	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.03	-0.02
59	8	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
60	6	-0.02	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.12	0.01
61	1	0.10	0.24	-0.04	0.00	0.01	0.00	-0.19	-0.47	-0.14
62	1	0.00	0.18	0.10	0.00	0.01	0.00	0.04	-0.48	-0.22
63	1	0.09	0.19	-0.12	0.00	0.01	0.00	0.05	-0.53	0.25

130

131

132

A

A

A

Frequencies	--	1433.3824			1433.7910			1443.4214		
Red. masses	--	2.7946			4.9302			1.1329		
Frc consts	--	3.3830			5.9716			1.3906		
IR Inten	--	11.1817			1.3417			23.3647		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.13	0.06	0.01	-0.01	0.01

2	6	0.00	0.00	0.00	0.09	0.05	0.07	0.01	0.01	0.01
3	6	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.05	-0.11	-0.01	0.00	-0.01
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.07	-0.02	0.00	-0.01	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.06	0.01	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.01	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.07	0.09	0.01	0.00	0.01
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.16	-0.02	0.00	0.01	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.03	-0.07	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.10	0.13	0.01	0.00	0.01
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.09	-0.01	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.02	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.15	0.02	0.00	0.01	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.01	-0.13	-0.01	0.00	-0.01
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.04	-0.12	0.00	0.01	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.16	-0.03	0.15	0.01	0.00	0.01
17	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.06	-0.05	-0.02	0.02	-0.01
18	1	0.00	0.00	0.00	0.09	0.05	0.10	-0.03	-0.02	-0.01
19	1	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.10	0.12	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.10	-0.03	-0.01	0.01	-0.01
21	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.19	-0.01	0.00	0.02	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.20	0.00	0.00	-0.01	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.12	-0.16	-0.02	-0.02	-0.02
24	1	0.00	0.00	0.00	-0.29	0.17	-0.29	-0.03	0.02	-0.03
25	1	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.15	0.07	0.03	-0.02	0.03
26	1	0.00	0.01	0.00	0.07	-0.29	0.01	0.01	-0.03	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.05	0.03	-0.02	0.09	-0.01
28	1	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.17	-0.03	0.07	-0.43	-0.26
29	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.10	-0.17	0.07	-0.30	0.57
30	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.13	-0.01	0.30	-0.45	-0.11
31	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.01	0.11	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	-0.08	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	0.06	-0.09	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	6	0.05	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	6	-0.03	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	6	0.04	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
39	6	-0.04	0.09	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	-0.04	-0.09	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	6	0.06	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	-0.06	0.13	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	6	-0.03	-0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	0.04	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	6	-0.06	-0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	0.09	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	6	0.07	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	-0.10	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	6	0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	-0.11	0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
51	1	-0.04	0.11	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	-0.01	-0.07	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	1	-0.05	-0.09	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.07	0.09	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	1	0.16	-0.03	0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.15	-0.25	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
57	1	-0.01	0.12	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.08	0.17	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	6	0.01	0.11	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	1	-0.13	-0.35	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	1	-0.01	-0.38	-0.22	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
63	1	0.04	-0.44	0.22	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00

		A			A			A		
Frequencies		--	1455.4738		1455.5579		1460.7775			
Red. masses		--	2.4321		2.4160		2.5898			
Frc consts		--	3.0355		3.0158		3.2560			
IR Inten		--	2.0250		3.2175		0.8846			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.04	0.01	0.00	0.01	0.00
2	6	0.01	0.01	0.01	-0.05	-0.06	-0.04	0.01	0.00	0.01
3	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00
4	6	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.11	0.01	-0.01	-0.01	-0.01
5	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.02	0.02	-0.01	0.02
6	6	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.02	-0.03	-0.01	-0.03
8	6	0.00	0.01	0.00	-0.02	-0.05	-0.02	0.00	0.03	0.00
9	6	-0.01	-0.02	-0.01	0.06	0.08	0.07	0.02	0.00	0.02
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00
11	6	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.11	-0.02	-0.01	0.02	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.03	-0.01	0.01	-0.01
13	6	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.11	0.01	0.01	-0.01	0.01
14	6	-0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.03	0.03	-0.01	-0.01	-0.01
15	6	0.00	-0.03	-0.01	0.03	0.14	0.04	0.03	-0.03	0.03
16	6	0.01	0.03	0.01	-0.04	-0.13	-0.04	0.00	0.03	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
18	1	-0.03	-0.03	-0.03	0.15	0.12	0.13	-0.01	-0.02	-0.01
19	1	-0.03	0.02	-0.03	0.15	-0.09	0.14	0.00	-0.01	0.00
20	1	0.04	-0.04	0.04	-0.22	0.18	-0.21	-0.05	0.03	-0.05
21	1	0.01	-0.07	0.00	-0.03	0.36	-0.02	-0.01	0.10	-0.01
22	1	0.00	0.01	0.00	-0.02	-0.07	-0.02	0.01	-0.17	0.01
23	1	0.04	0.03	0.04	-0.18	-0.17	-0.19	-0.05	-0.07	-0.05
24	1	0.04	-0.02	0.04	-0.19	0.10	-0.18	0.00	-0.02	-0.01
25	1	-0.05	0.04	-0.04	0.24	-0.19	0.22	0.02	-0.01	0.02
26	1	-0.01	0.08	0.00	0.06	-0.38	0.01	0.01	0.02	0.01
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
28	1	0.01	0.00	0.01	-0.03	0.04	-0.02	0.01	0.01	0.02
29	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.04	0.02	0.01	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.04	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.04	-0.02
34	6	-0.09	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.00
35	6	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00
36	6	0.08	0.07	0.04	0.02	0.01	0.01	0.07	-0.02	0.02
37	6	0.03	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.07	0.11	0.01
38	6	-0.06	-0.08	-0.04	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.00
39	6	-0.01	0.04	0.01	0.00	0.01	0.00	0.13	-0.06	0.02
40	6	-0.04	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.05	-0.08	-0.04
41	6	0.12	0.01	0.04	0.02	0.00	0.01	-0.07	0.05	-0.01
42	6	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.04	0.02
43	6	-0.07	-0.07	-0.04	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.08	-0.03
44	6	-0.04	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.03	-0.07	-0.01
45	6	0.06	0.08	0.05	0.01	0.02	0.01	-0.02	0.07	0.01
46	6	0.01	-0.05	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.06	0.01	0.02
47	6	0.11	0.07	0.06	0.02	0.01	0.01	-0.06	0.15	0.02
48	6	-0.11	-0.07	-0.06	-0.02	-0.01	-0.01	-0.06	-0.07	-0.04
49	6	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.01
50	1	0.23	-0.03	0.04	0.05	-0.01	0.01	0.10	0.02	0.03
51	1	0.11	-0.19	-0.02	0.02	-0.04	0.00	0.02	0.00	0.00
52	1	-0.13	0.31	0.04	-0.03	0.07	0.01	0.12	-0.25	-0.02
53	1	0.17	0.28	0.13	0.04	0.06	0.03	-0.17	-0.31	-0.14
54	1	-0.06	-0.03	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.31	0.49	0.24
55	1	-0.29	0.04	-0.08	-0.06	0.01	-0.02	0.36	0.02	0.12
56	1	-0.15	0.23	0.02	-0.03	0.05	0.00	0.06	0.00	0.02
57	1	0.15	-0.35	-0.05	0.03	-0.07	-0.01	-0.05	0.07	-0.01

58	1	-0.17	-0.33	-0.17	-0.04	-0.07	-0.04	-0.09	-0.01	-0.02
59	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.01
60	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
61	1	0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.06
62	1	-0.01	0.04	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.02	-0.02
63	1	-0.01	0.04	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.07	0.03	0.01
		136			137			138		
		A			A			A		
Frequencies	--	1461.1384			1477.7993			1478.9062		
Red. masses	--	2.6270			1.8623			1.9269		
Frc consts	--	3.3044			2.3963			2.4831		
IR Inten	--	0.7885			29.3593			15.9549		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.02	0.04
2	6	-0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.05	-0.01
3	6	0.02	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	-0.07	0.04	-0.06
4	6	0.05	0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	0.05	0.07	0.04
5	6	-0.09	0.05	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.02
6	6	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.06	-0.01
7	6	0.10	0.03	0.10	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.08	0.00
8	6	0.01	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.02
9	6	-0.06	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.06	-0.02
10	6	0.00	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.03	-0.05
11	6	0.02	-0.09	0.02	0.00	0.00	0.00	0.04	0.06	0.04
12	6	0.05	-0.04	0.05	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.01
13	6	-0.04	0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01
14	6	0.03	0.05	0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.07	-0.01
15	6	-0.10	0.09	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.06	-0.02
16	6	0.00	-0.10	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.06	-0.02
17	6	-0.04	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.06	-0.03
18	1	0.04	0.08	0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.19	0.12	0.17
19	1	0.00	0.02	0.00	-0.02	0.01	-0.02	0.30	-0.20	0.29
20	1	0.18	-0.13	0.18	0.02	-0.01	0.02	-0.21	0.12	-0.20
21	1	0.04	-0.38	0.03	0.00	-0.02	0.00	-0.03	0.20	-0.03
22	1	-0.05	0.63	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.03
23	1	0.18	0.25	0.19	-0.01	-0.01	-0.01	0.14	0.09	0.15
24	1	0.01	0.06	0.02	-0.02	0.01	-0.02	0.26	-0.16	0.25
25	1	-0.05	0.01	-0.06	0.01	-0.01	0.01	-0.14	0.08	-0.14
26	1	-0.04	-0.08	-0.04	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.14	-0.01
27	6	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00
28	1	-0.03	-0.03	-0.08	0.00	-0.02	-0.01	-0.06	0.19	0.08
29	1	-0.05	-0.03	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	0.29	0.12	0.06
30	1	0.01	0.03	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.11	-0.22	-0.03
31	8	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	-0.01	0.00	-0.04	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00
34	6	-0.01	0.01	0.00	0.04	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00
35	6	0.01	0.00	0.00	0.05	-0.08	-0.01	0.00	-0.01	0.00
36	6	0.02	-0.01	0.00	-0.09	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00
37	6	-0.02	0.03	0.00	-0.01	0.04	0.01	0.00	0.00	0.00
38	6	0.00	-0.01	0.00	0.05	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
39	6	0.04	-0.02	0.01	-0.03	-0.06	-0.03	0.00	-0.01	0.00
40	6	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
41	6	-0.02	0.01	0.00	0.05	0.03	0.03	0.00	0.00	0.00
42	6	0.01	0.01	0.01	0.03	-0.06	-0.01	0.00	-0.01	0.00
43	6	-0.01	-0.02	-0.01	-0.08	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00
44	6	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
45	6	-0.01	0.02	0.00	0.02	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00
46	6	0.02	0.00	0.01	-0.03	-0.06	-0.03	0.00	-0.01	0.00
47	6	-0.02	0.04	0.01	0.05	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00
48	6	-0.02	-0.02	-0.01	0.06	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
49	6	-0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.06	0.01	0.00	0.00	0.00
50	1	0.03	0.00	0.01	-0.26	0.06	-0.05	-0.03	0.01	0.00

51	1	0.01	0.00	0.00	-0.21	0.40	0.04	-0.02	0.04	0.00
52	1	0.03	-0.07	-0.01	0.15	-0.27	-0.02	0.01	-0.03	0.00
53	1	-0.05	-0.08	-0.04	-0.08	-0.18	-0.07	-0.01	-0.02	-0.01
54	1	0.09	0.14	0.07	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.01	0.00
55	1	0.10	0.01	0.03	-0.19	0.06	-0.05	-0.02	0.01	0.00
56	1	0.02	0.00	0.01	-0.18	0.33	0.03	-0.02	0.03	0.00
57	1	-0.01	0.01	0.00	0.11	-0.17	-0.01	0.01	-0.02	0.00
58	1	-0.03	-0.01	-0.01	-0.05	-0.12	-0.06	-0.01	-0.01	-0.01
59	8	0.01	0.00	0.00	0.04	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
61	1	0.00	0.01	0.01	0.09	0.19	0.00	0.01	0.01	0.00
62	1	0.00	0.01	0.00	-0.22	-0.04	-0.24	-0.01	0.00	-0.01
63	1	-0.02	0.01	0.00	-0.28	-0.06	0.13	-0.01	-0.01	0.01
			139			140			141	
			A			A			A	
Frequencies	--	1485.9099			1487.3418			1497.6950		
Red. masses	--	1.4651			1.4810			3.6634		
Frc consts	--	1.9059			1.9303			4.8415		
IR Inten	--	127.6829			141.0553			0.6549		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.07	-0.02	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.05	-0.03	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.08	-0.01	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.05	-0.06	0.00	0.00	0.00
19	1	0.01	0.00	0.01	-0.07	0.07	-0.07	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.02	0.05	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.05	-0.01	0.00	-0.01	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.07	-0.02	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00
24	1	0.01	0.00	0.01	-0.11	0.08	-0.11	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00
26	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.05	-0.01	0.00	-0.01	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.01	0.00	-0.05	0.41	0.29	0.00	0.00	0.00
29	1	0.01	0.01	0.00	0.60	0.27	0.08	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	-0.01	0.00	0.15	-0.40	-0.02	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.03	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.06	-0.01
34	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.06	0.01
35	6	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.08	-0.02
36	6	0.05	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	0.15	0.02	0.05
37	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.05	-0.03
38	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.15	0.07	0.06
39	6	-0.03	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.05	-0.04
40	6	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.06	-0.01
41	6	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.04	0.01
42	6	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.01
43	6	0.06	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.17	0.00	0.06

44	6	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.08	-0.04
45	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.12	0.06	0.07
46	6	-0.03	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.02	-0.03
47	6	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.02
48	6	-0.01	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	-0.02
49	6	-0.08	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.00
50	1	0.11	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.06	0.01
51	1	0.05	-0.13	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.05	0.03	0.00
52	1	-0.06	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.33	-0.07
53	1	0.04	0.05	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.34	-0.12
54	1	-0.02	-0.08	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.04	0.00
55	1	0.07	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.06	0.04	0.03
56	1	0.08	-0.17	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.08	-0.02
57	1	-0.05	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.32	-0.07
58	1	0.04	0.05	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.37	-0.18
59	8	0.06	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
60	6	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01
61	1	0.12	0.32	0.19	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.18	0.05
62	1	-0.32	-0.14	-0.39	0.00	0.00	0.00	0.21	0.01	0.21
63	1	-0.61	-0.01	0.21	0.00	0.00	0.00	0.20	0.05	-0.10
			142			143			144	
			A			A			A	
Frequencies	--	1497.8853			1505.0000			1522.1446		
Red. masses	--	3.5151			1.0827			4.4757		
Frc consts	--	4.6467			1.4448			6.1097		
IR Inten	--	1.0573			18.6080			10.8396		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.00	0.04	0.05	0.03
2	6	-0.03	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.06	-0.06
3	6	0.04	-0.06	0.04	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03	0.03
4	6	0.08	0.12	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.07	-0.07
5	6	-0.10	-0.04	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.10	0.11
6	6	0.05	0.15	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.10	-0.05
7	6	-0.11	-0.07	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.02	-0.06
8	6	0.03	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.00	0.06	0.01	0.06
9	6	-0.03	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.12	-0.12
10	6	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.09	0.03
11	6	0.08	0.11	0.10	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.12	-0.02
12	6	-0.10	-0.03	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.08	0.05
13	6	0.03	0.14	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.16	-0.03
14	6	-0.07	-0.07	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.08	-0.03
15	6	0.04	-0.06	0.03	0.00	0.00	0.00	0.05	0.05	0.05
16	6	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.08	0.05
17	6	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.00
18	1	-0.04	0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.17	0.15	0.14
19	1	-0.04	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.09	-0.04
20	1	0.17	-0.23	0.17	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.06	-0.16
21	1	0.09	-0.34	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.01	-0.06
22	1	0.03	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.07	0.06	0.07
23	1	0.02	0.07	0.02	0.00	0.00	0.00	0.30	0.31	0.32
24	1	0.04	-0.05	0.04	0.00	0.00	0.00	0.06	0.09	0.07
25	1	0.18	-0.23	0.17	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.06	-0.02
26	1	0.13	-0.40	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.21	-0.03
27	6	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	-0.05	0.21	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.04	-0.01
29	1	0.29	0.13	0.05	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	-0.01
30	1	0.09	-0.21	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.04	0.00
31	8	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.04	-0.01	-0.01
34	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.06	-0.01	0.01
35	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.01	-0.01
36	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.07	-0.01	0.02

37	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.10	0.01
38	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.02
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.03	-0.04	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.04	0.03	-0.01
41	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.11	-0.01	0.03
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.03	-0.02
43	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.05	0.04	0.03
44	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.06	0.01
45	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.08	-0.03
46	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.05	0.02	0.02
47	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.05	0.01	-0.01
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.01	-0.02
49	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.02	0.02	0.01	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.14	0.01	-0.03
51	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.01	0.00	-0.06	-0.01
52	1	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.08	-0.10	0.00
53	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.04	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.06	0.01	-0.02
55	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.01	-0.28	0.03	-0.09
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	0.00	-0.07	0.00	-0.02
57	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.02	0.02	0.02
58	1	0.00	0.01	0.00	0.01	0.02	0.01	0.07	0.08	0.05
59	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.06	0.00	0.00	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	-0.20	-0.07	0.68	0.01	0.03	-0.01
62	1	0.01	0.00	0.00	0.42	-0.37	0.19	-0.02	-0.02	-0.02
63	1	0.00	0.00	0.00	-0.28	0.24	-0.03	-0.02	-0.02	0.01

		145			146			147		
		A			A			A		
Frequencies	--	1522.2628			1538.3374			1539.4649		
Red. masses	--	4.4641			3.2105			3.2503		
Frc consts	--	6.0948			4.4764			4.5385		
IR Inten	--	26.4592			544.2247			174.2844		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	-0.03	-0.02	-0.04	0.01	-0.03	-0.09	0.02	-0.06
2	6	0.04	0.03	0.03	0.02	0.01	0.02	0.07	0.03	0.06
3	6	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	0.00	-0.02	-0.06	0.00	-0.05
4	6	0.04	0.04	0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00
5	6	-0.07	0.06	-0.06	0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	0.02
6	6	0.03	-0.05	0.03	0.00	-0.02	0.00	-0.01	-0.05	-0.01
7	6	0.04	-0.01	0.03	0.00	0.03	0.00	0.00	0.09	0.01
8	6	-0.04	-0.01	-0.04	0.01	-0.02	0.01	0.03	-0.05	0.02
9	6	0.06	0.07	0.07	-0.02	-0.01	-0.02	-0.05	-0.03	-0.05
10	6	-0.01	-0.05	-0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.03	0.01
11	6	0.00	0.07	0.01	0.02	-0.01	0.02	0.06	-0.03	0.06
12	6	-0.03	0.05	-0.03	-0.03	0.01	-0.03	-0.08	0.04	-0.08
13	6	0.03	-0.09	0.02	0.00	0.02	0.01	0.01	0.03	0.02
14	6	0.02	0.05	0.02	0.03	-0.03	0.02	0.06	-0.07	0.05
15	6	-0.03	-0.03	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.04	-0.02
16	6	-0.03	-0.05	-0.03	-0.01	0.02	-0.01	-0.02	0.04	-0.02
17	6	0.01	0.01	0.00	0.09	0.09	0.01	0.17	0.17	0.02
18	1	-0.09	-0.08	-0.08	-0.04	-0.05	-0.04	-0.12	-0.15	-0.10
19	1	0.02	-0.05	0.02	0.03	-0.03	0.02	0.05	-0.07	0.05
20	1	0.09	-0.03	0.09	-0.01	0.01	-0.01	-0.04	0.04	-0.04
21	1	0.03	-0.01	0.03	-0.01	0.03	-0.01	-0.02	0.11	-0.02
22	1	-0.04	-0.04	-0.04	0.00	0.08	0.01	0.01	0.21	0.02
23	1	-0.17	-0.18	-0.18	0.04	0.06	0.04	0.11	0.14	0.11
24	1	-0.04	-0.05	-0.04	0.01	0.01	0.01	0.04	0.03	0.04
25	1	-0.01	0.04	0.01	0.06	-0.05	0.07	0.16	-0.12	0.16
26	1	0.00	0.12	0.01	0.04	-0.14	0.01	0.10	-0.30	0.01
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
28	1	0.01	-0.02	0.01	0.06	-0.15	-0.01	0.12	-0.30	-0.01
29	1	-0.01	-0.01	0.01	-0.15	-0.09	0.00	-0.29	-0.17	-0.01



30	1	-0.01	0.01	0.00	-0.06	0.15	0.00	-0.13	0.30	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.05	0.00	-0.08	-0.09	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	-0.07	-0.01	-0.01	-0.08	0.07	0.02	0.03	-0.04	-0.01
34	6	0.10	-0.01	0.02	0.08	-0.04	0.01	-0.04	0.02	-0.01
35	6	-0.06	0.01	-0.01	-0.05	0.05	0.00	0.03	-0.02	0.00
36	6	0.12	-0.01	0.03	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00
37	6	-0.07	0.18	0.03	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
38	6	0.00	-0.12	-0.03	-0.03	-0.03	-0.02	0.02	0.01	0.01
39	6	0.06	-0.08	0.00	0.05	0.05	0.03	-0.03	-0.03	-0.02
40	6	-0.08	0.05	-0.01	0.00	-0.06	-0.02	0.00	0.03	0.01
41	6	0.19	-0.01	0.06	-0.07	0.03	-0.02	0.04	-0.01	0.01
42	6	-0.08	-0.05	-0.04	0.03	0.01	0.01	-0.02	-0.01	-0.01
43	6	0.08	0.08	0.05	0.05	-0.07	0.00	-0.03	0.04	0.00
44	6	-0.01	0.11	0.03	-0.06	0.09	0.00	0.03	-0.05	0.00
45	6	-0.05	-0.15	-0.06	0.03	0.01	0.02	-0.02	0.00	-0.01
46	6	0.08	0.03	0.03	0.02	-0.10	-0.03	-0.01	0.05	0.01
47	6	-0.09	0.01	-0.03	-0.04	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.01
48	6	-0.10	-0.02	-0.03	0.00	0.05	0.01	0.00	-0.02	-0.01
49	6	0.04	0.01	0.00	0.23	0.07	-0.04	-0.09	-0.03	0.02
50	1	-0.25	0.02	-0.05	-0.20	-0.01	-0.04	0.11	0.01	0.03
51	1	0.00	-0.11	-0.03	0.02	-0.09	-0.02	-0.01	0.04	0.01
52	1	0.14	-0.18	0.00	-0.02	0.06	0.01	0.01	-0.04	-0.01
53	1	0.05	-0.07	0.00	0.03	0.09	0.03	-0.02	-0.05	-0.02
54	1	-0.11	0.02	-0.03	0.13	0.14	0.08	-0.07	-0.07	-0.04
55	1	-0.51	0.05	-0.16	0.19	0.01	0.07	-0.11	0.00	-0.04
56	1	-0.12	0.00	-0.04	0.06	-0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.01
57	1	0.03	0.03	0.04	0.10	-0.23	-0.02	-0.05	0.12	0.01
58	1	0.13	0.14	0.09	-0.10	-0.26	-0.16	0.04	0.12	0.08
59	8	-0.01	-0.01	0.00	-0.12	-0.05	0.02	0.05	0.02	-0.01
60	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.00
61	1	0.02	0.05	-0.01	0.12	0.31	0.05	-0.04	-0.12	-0.03
62	1	-0.03	-0.03	-0.04	-0.17	-0.21	-0.24	0.06	0.09	0.09
63	1	-0.04	-0.03	0.02	-0.30	-0.08	0.13	0.12	0.03	-0.05

		148			149			150		
		A			A			A		
Frequencies	--	1551.7283			1552.6424			1581.6609		
Red. masses	--	3.1810			3.1660			4.8498		
Frc consts	--	4.5128			4.4969			7.1482		
IR Inten	--	97.4341			5.3098			145.1616		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	0.02	0.05	0.04	0.02	0.03	0.01	0.15	0.00
2	6	-0.10	-0.10	-0.08	-0.07	-0.07	-0.06	0.02	-0.08	0.02
3	6	-0.01	0.09	-0.01	-0.01	0.07	-0.01	-0.10	0.09	-0.09
4	6	0.06	-0.08	0.06	0.04	-0.06	0.04	0.04	-0.09	0.04
5	6	-0.02	-0.03	-0.02	-0.01	-0.03	-0.01	0.03	-0.05	0.02
6	6	-0.01	0.12	-0.01	-0.01	0.08	-0.01	-0.03	0.05	-0.03
7	6	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.02	0.06	0.02
8	6	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	-0.13	0.00
9	6	0.03	0.05	0.04	0.02	0.04	0.02	-0.03	0.06	-0.02
10	6	0.02	-0.04	0.01	0.01	-0.03	0.01	0.06	-0.04	0.06
11	6	-0.05	0.02	-0.05	-0.03	0.02	-0.03	0.02	0.02	0.02
12	6	0.04	-0.01	0.04	0.02	-0.01	0.02	-0.09	0.10	-0.09
13	6	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.06	-0.08	0.05
14	6	-0.02	0.04	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.00	-0.09	-0.01
15	6	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.04	-0.02	-0.04
16	6	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.02	0.04	0.02
17	6	0.08	0.12	-0.02	0.07	0.10	-0.01	-0.08	-0.12	0.01
18	1	0.28	0.23	0.24	0.20	0.16	0.18	0.11	-0.02	0.09
19	1	0.15	0.00	0.14	0.12	-0.01	0.11	0.21	-0.10	0.20
20	1	0.08	-0.11	0.07	0.05	-0.08	0.05	-0.03	-0.02	-0.03
21	1	0.01	-0.24	0.01	0.01	-0.17	0.00	-0.03	-0.10	-0.03
22	1	-0.03	-0.03	-0.03	-0.02	0.00	-0.02	-0.03	0.29	-0.02

23	1	-0.10	-0.08	-0.11	-0.07	-0.05	-0.07	-0.04	0.07	-0.03
24	1	-0.10	0.02	-0.10	-0.08	0.02	-0.08	-0.13	0.08	-0.12
25	1	-0.07	0.06	-0.07	-0.03	0.03	-0.03	0.15	-0.05	0.17
26	1	-0.02	0.07	-0.01	0.00	0.04	-0.01	0.05	0.09	0.06
27	6	0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00
28	1	0.04	-0.20	-0.07	0.04	-0.16	-0.05	-0.03	0.09	-0.01
29	1	-0.20	-0.11	-0.01	-0.16	-0.09	-0.01	0.06	0.06	-0.02
30	1	-0.06	0.18	-0.02	-0.05	0.14	-0.01	0.03	-0.10	0.02
31	8	-0.06	-0.07	0.00	-0.05	-0.06	0.00	0.04	0.06	-0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.05	-0.03	0.01	-0.07	0.03	-0.01	0.09	0.10	0.04
34	6	-0.12	0.00	-0.03	0.15	0.00	0.04	-0.03	-0.07	-0.03
35	6	0.03	0.05	0.02	-0.04	-0.08	-0.03	-0.05	0.14	0.02
36	6	0.01	-0.08	-0.02	-0.02	0.11	0.02	0.00	-0.09	-0.02
37	6	-0.03	-0.01	-0.01	0.04	0.01	0.01	0.00	-0.05	-0.01
38	6	0.04	0.07	0.03	-0.05	-0.09	-0.04	0.00	0.06	0.02
39	6	-0.03	-0.04	-0.02	0.04	0.05	0.03	0.05	0.03	0.02
40	6	-0.02	0.01	0.00	0.03	0.00	0.01	-0.06	-0.09	-0.04
41	6	0.05	0.00	0.02	-0.06	-0.01	-0.02	0.00	0.06	0.02
42	6	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.04	0.01	0.04	-0.07	-0.01
43	6	-0.03	0.05	0.00	0.04	-0.05	0.00	0.02	0.00	0.01
44	6	0.03	-0.04	0.00	-0.03	0.04	0.00	-0.04	0.14	0.03
45	6	-0.02	0.00	-0.01	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.10	-0.02
46	6	0.00	0.03	0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.05	-0.05	-0.03
47	6	0.03	0.00	0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.04	0.02	-0.01
48	6	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.04	0.01	0.01
49	6	0.09	0.06	-0.01	-0.13	-0.08	0.02	-0.11	-0.07	0.01
50	1	0.32	-0.04	0.07	-0.42	0.06	-0.09	0.11	-0.09	-0.01
51	1	0.12	-0.09	0.01	-0.17	0.14	-0.01	0.15	-0.23	-0.02
52	1	0.02	-0.10	-0.02	-0.02	0.14	0.03	-0.04	0.01	-0.01
53	1	-0.09	-0.13	-0.06	0.12	0.18	0.08	-0.08	-0.05	-0.04
54	1	-0.04	0.00	-0.01	0.03	-0.02	0.00	0.13	0.21	0.10
55	1	-0.12	0.02	-0.03	0.14	-0.03	0.04	0.00	0.07	0.02
56	1	-0.07	0.08	0.00	0.09	-0.11	0.00	-0.08	0.15	0.02
57	1	-0.04	0.08	0.01	0.03	-0.08	-0.01	0.13	-0.16	0.01
58	1	0.02	0.06	0.02	-0.02	-0.06	-0.01	0.10	0.01	0.04
59	8	-0.06	-0.03	0.01	0.09	0.04	-0.02	0.05	0.03	-0.01
60	6	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00
61	1	0.07	0.13	-0.02	-0.09	-0.20	0.02	-0.05	-0.10	0.02
62	1	-0.12	-0.05	-0.12	0.16	0.09	0.18	0.06	0.05	0.06
63	1	-0.13	-0.04	0.06	0.19	0.05	-0.08	0.05	0.05	-0.03

		151			152			153		
		A			A			A		
Frequencies	--	1583.9497			1629.0772			1629.4263		
Red. masses	--	4.9473			5.9886			6.0158		
Frc consts	--	7.3132			9.3640			9.4105		
IR Inten	--	10.2730			21.4281			21.8715		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.13	0.00	-0.01	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.02	-0.07	0.02	0.05	0.08	0.04	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.09	0.08	-0.08	0.01	-0.08	0.01	0.00	0.00	0.00
4	6	0.04	-0.07	0.03	-0.02	0.16	-0.02	0.00	0.00	0.00
5	6	0.03	-0.04	0.02	0.05	-0.08	0.05	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.03	0.05	-0.03	-0.01	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00
7	6	0.01	0.06	0.02	-0.11	0.07	-0.11	0.00	0.00	0.00
8	6	0.01	-0.11	0.00	0.07	-0.13	0.06	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	0.05	-0.02	-0.13	0.01	-0.13	0.00	0.00	0.00
10	6	0.05	-0.04	0.05	0.21	-0.10	0.21	0.00	0.00	0.00
11	6	0.01	0.02	0.01	-0.15	0.03	-0.16	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.08	0.09	-0.08	0.00	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00
13	6	0.05	-0.08	0.05	0.04	-0.18	0.01	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	-0.08	-0.01	-0.02	0.19	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	-0.03	-0.01	-0.03	0.10	0.09	0.10	0.00	0.00	0.00

16	6	0.02	0.03	0.02	-0.02	-0.16	-0.02	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.09	-0.13	0.01	0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.09	-0.02	0.08	-0.11	-0.05	-0.09	0.00	0.00	0.00
19	1	0.18	-0.09	0.17	-0.06	-0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.03	-0.02	-0.03	-0.15	0.04	-0.14	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.03	-0.08	-0.03	-0.02	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.02	0.26	-0.01	0.04	0.24	0.05	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.03	0.06	-0.03	0.03	0.21	0.04	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.11	0.07	-0.11	-0.32	0.24	-0.31	0.01	0.00	0.00
25	1	0.13	-0.04	0.15	0.00	0.10	0.02	0.00	0.00	0.00
26	1	0.04	0.08	0.06	-0.04	0.30	0.02	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	-0.04	0.10	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
29	1	-0.07	0.06	-0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
30	1	0.04	-0.11	0.02	-0.01	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
31	8	0.05	0.06	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	-0.10	-0.11	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.09	0.11	0.05
34	6	0.03	0.08	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.03	-0.03
35	6	0.05	-0.15	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.03	0.07	0.03
36	6	0.00	0.10	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.14	-0.06
37	6	0.00	0.06	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.10	0.02
38	6	0.00	-0.07	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.02
39	6	-0.05	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.15	-0.02
40	6	0.06	0.10	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.15	0.04
41	6	-0.01	-0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.12	0.01
42	6	-0.04	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.26	0.01
43	6	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.16	0.01
44	6	0.04	-0.15	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.05	-0.04
45	6	-0.01	0.11	0.03	0.00	0.00	0.00	0.07	0.15	0.07
46	6	0.05	0.06	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.15	-0.08
47	6	0.05	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.02	-0.05
48	6	-0.04	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.12	0.10	0.06
49	6	0.14	0.08	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.03	0.00
50	1	-0.10	0.10	0.01	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.05	0.02
51	1	-0.16	0.25	0.02	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.01	0.02
52	1	0.05	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.15	0.00
53	1	0.09	0.05	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.01
54	1	-0.14	-0.23	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.13	-0.10
55	1	0.00	-0.08	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.12	-0.09
56	1	0.09	-0.17	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.21	-0.45	-0.05
57	1	-0.14	0.17	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.06	-0.05
58	1	-0.11	-0.02	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.22	-0.14
59	8	-0.07	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00
60	6	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
61	1	0.06	0.14	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.01
62	1	-0.07	-0.07	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.01
63	1	-0.07	-0.06	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01

		154			155			156		
		A			A			A		
Frequencies	--	1640.2932			1640.3746			1644.9408		
Red. masses	--	6.5984			6.6067			5.9864		
Frc consts	--	10.4600			10.4742			9.5437		
IR Inten	--	57.1171			66.3496			63.4083		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.07	-0.01	0.06	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
3	6	-0.14	0.08	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.16	-0.08	0.16	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.14	0.10	-0.13	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00
6	6	0.07	-0.04	0.07	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
7	6	-0.07	-0.18	-0.08	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.02	0.28	0.04	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00

9	6	-0.10	-0.18	-0.11	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	0.04	0.09	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.03	-0.19	-0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
12	6	-0.03	0.07	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01
13	6	0.01	-0.06	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
14	6	0.07	0.00	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.13	0.16	0.13	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.11	-0.02	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.01	-0.07	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
19	1	0.20	-0.13	0.20	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00
20	1	0.22	-0.11	0.21	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01
21	1	0.08	0.03	0.08	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
22	1	0.09	-0.38	0.07	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00
23	1	0.17	0.08	0.17	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
24	1	0.03	0.10	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.11	-0.02	0.12	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01
26	1	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	8	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.01	0.10	-0.04	0.01
34	6	-0.01	0.00	0.00	0.07	-0.07	0.00	-0.24	0.08	-0.04
35	6	0.01	-0.01	0.00	-0.10	0.19	0.02	0.18	-0.16	0.01
36	6	-0.01	0.01	0.00	0.13	-0.20	-0.01	-0.11	0.02	-0.03
37	6	0.00	-0.01	0.00	-0.09	0.19	0.02	0.00	0.18	0.05
38	6	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.08	0.00	-0.05	-0.20	-0.07
39	6	0.01	0.00	0.00	-0.19	-0.08	-0.08	0.01	0.05	0.02
40	6	-0.01	-0.01	0.00	0.18	0.18	0.11	0.06	0.02	0.03
41	6	0.01	0.00	0.00	-0.21	-0.04	-0.08	-0.11	0.00	-0.04
42	6	0.00	0.00	0.00	0.08	0.03	0.04	0.05	0.02	0.02
43	6	0.01	0.00	0.00	-0.14	-0.11	-0.08	0.02	-0.12	-0.03
44	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.07	0.03	-0.06	0.25	0.05
45	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	-0.02	-0.02	-0.22	-0.07
46	6	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.07	0.00	-0.08	0.13	0.02
47	6	-0.01	0.00	0.00	0.23	0.00	0.08	0.00	0.05	0.01
48	6	0.01	0.00	0.00	-0.14	0.08	-0.02	0.14	-0.07	0.02
49	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.03	0.01	0.04	0.03	0.00
50	1	0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.07	-0.02	0.32	0.04	0.08
51	1	-0.01	0.02	0.00	0.15	-0.28	-0.03	-0.04	0.29	0.06
52	1	0.00	0.01	0.00	0.16	-0.27	-0.02	0.18	-0.10	0.03
53	1	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.06	0.01	0.19	0.15	0.10
54	1	0.01	0.01	0.01	-0.14	-0.36	-0.14	0.02	-0.07	-0.01
55	1	-0.01	0.00	0.00	0.22	-0.09	0.05	0.15	-0.03	0.04
56	1	0.00	0.00	0.00	0.10	0.04	0.04	0.07	0.00	0.02
57	1	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.11	0.01	0.21	-0.25	0.03
58	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.22	0.15	0.13
59	8	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.01	-0.03	-0.01	0.01
60	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.01	0.02	0.03	-0.01
62	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.02	-0.03	-0.01	-0.03
63	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.01

		157			158			159		
		A			A			A		
Frequencies	--	1645.2892			1672.9728			1673.0870		
Red. masses	--	6.0262			6.9832			6.9782		
Frc consts	--	9.6112			11.5155			11.5088		
IR Inten	--	76.7089			14.8560			49.2861		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.08	-0.03	-0.07	-0.02	-0.04	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01

2	6	0.18	0.10	0.16	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02
3	6	-0.18	0.01	-0.17	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	-0.02	0.00
4	6	0.08	0.06	0.08	-0.04	0.11	-0.04	-0.02	0.06	-0.02
5	6	0.07	-0.15	0.07	0.11	-0.16	0.11	0.06	-0.09	0.06
6	6	-0.06	0.21	-0.05	-0.07	0.23	-0.07	-0.04	0.13	-0.04
7	6	0.02	-0.06	0.01	0.09	-0.18	0.08	0.05	-0.10	0.04
8	6	-0.03	-0.05	-0.03	-0.04	0.12	-0.03	-0.02	0.07	-0.02
9	6	0.06	0.07	0.06	0.04	-0.04	0.03	0.02	-0.02	0.02
10	6	-0.02	-0.04	-0.02	-0.09	0.08	-0.08	-0.05	0.04	-0.05
11	6	-0.06	0.08	-0.06	0.10	-0.15	0.09	0.05	-0.09	0.05
12	6	0.14	-0.16	0.13	-0.10	0.11	-0.09	-0.06	0.06	-0.05
13	6	-0.09	0.20	-0.08	0.05	-0.13	0.04	0.03	-0.07	0.02
14	6	0.11	-0.06	0.10	-0.03	0.07	-0.02	-0.02	0.04	-0.01
15	6	0.02	-0.03	0.02	-0.10	0.18	-0.09	-0.06	0.10	-0.05
16	6	-0.12	-0.04	-0.11	0.06	-0.16	0.05	0.04	-0.09	0.03
17	6	-0.03	-0.05	0.00	0.03	0.03	0.01	0.02	0.02	0.00
18	1	-0.17	-0.24	-0.15	-0.05	-0.04	-0.04	-0.03	-0.03	-0.02
19	1	0.15	-0.22	0.15	-0.01	-0.04	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01
20	1	-0.15	-0.04	-0.14	-0.19	0.01	-0.19	-0.11	0.00	-0.11
21	1	-0.04	-0.26	-0.04	-0.04	-0.33	-0.05	-0.02	-0.19	-0.03
22	1	-0.04	0.02	-0.04	-0.02	-0.16	-0.02	-0.01	-0.09	-0.01
23	1	-0.09	-0.08	-0.09	0.02	-0.07	0.01	0.01	-0.04	0.01
24	1	-0.04	-0.04	-0.04	0.12	-0.04	0.12	0.07	-0.02	0.07
25	1	-0.20	0.05	-0.24	0.16	-0.06	0.19	0.09	-0.03	0.11
26	1	-0.05	-0.28	-0.07	0.02	0.14	0.04	0.01	0.08	0.02
27	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.04	0.02	0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.01	0.01
29	1	0.04	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
30	1	0.00	-0.03	0.01	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00
31	8	0.03	0.03	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.01	-0.05	-0.02	-0.01
34	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.06	0.00	0.01
35	6	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.01	0.01	-0.03	-0.02	-0.01
36	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.07	-0.02	0.02	0.12	0.04
37	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.13	0.03	0.03	-0.23	-0.05
38	6	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.14	-0.05	0.06	0.24	0.08
39	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.12	0.03	-0.01	-0.21	-0.06
40	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.07	-0.02	0.03	0.12	0.04
41	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.01	0.02	-0.06	-0.01
42	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.08	-0.01	-0.05	0.13	0.02
43	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.11	0.03	0.02	-0.19	-0.05
44	6	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.09	-0.02	-0.04	0.16	0.03
45	6	0.00	0.01	0.00	0.01	0.07	0.02	-0.02	-0.13	-0.04
46	6	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	0.01	0.08	0.03
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.03	0.00	0.21	0.06
48	6	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.10	0.03	-0.02	-0.17	-0.05
49	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.04	0.01	0.00
50	1	-0.01	0.00	0.00	0.05	0.00	0.01	-0.08	0.01	-0.02
51	1	0.00	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.01	-0.04	-0.02	-0.01
52	1	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.10	0.01	-0.21	0.18	-0.02
53	1	-0.01	-0.01	0.00	0.14	0.12	0.07	-0.24	-0.21	-0.13
54	1	0.00	0.00	0.00	0.07	0.06	0.04	-0.12	-0.10	-0.06
55	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.01	-0.02	-0.06	-0.03
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.08	0.00	0.10	-0.14	0.00
57	1	-0.01	0.01	0.00	-0.08	0.11	-0.01	0.15	-0.20	0.02
58	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.06	-0.04	-0.04	0.11	0.08	0.06
59	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.03	0.00
62	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01
63	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00











37	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.05	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
38	6	0.02	-0.01	0.00	-0.05	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	-0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
43	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
51	1	-0.03	-0.01	-0.01	0.07	0.03	0.03	0.00	0.00	0.00
52	1	0.16	0.08	0.07	-0.52	-0.26	-0.23	0.00	0.00	0.00
53	1	-0.20	0.14	-0.03	0.57	-0.39	0.07	0.00	0.00	0.00
54	1	0.33	-0.22	0.04	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
55	1	0.00	0.45	0.13	0.00	0.14	0.04	0.00	0.00	0.00
56	1	-0.56	-0.28	-0.27	-0.24	-0.12	-0.12	0.00	0.00	0.00
57	1	-0.14	-0.07	-0.08	-0.05	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
58	1	0.08	-0.06	0.03	0.03	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		172			173			174		
		A			A			A		
Frequencies	--	3209.9608			3210.0297			3211.5558		
Red. masses	--	1.0922			1.0925			1.0894		
Frc consts	--	6.6304			6.6326			6.6201		
IR Inten	--	7.0095			7.9542			1.7826		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.01
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.07	-0.02
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.18	-0.36	0.16
19	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01	0.28	0.81	0.25
20	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.10	-0.03	0.00	-0.01	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.03	-0.09	-0.01	-0.09
22	1	-0.02	0.00	-0.02	0.52	0.07	0.51	-0.01	0.00	-0.01
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.01	-0.02	-0.01	0.17	0.60	0.21	0.00	-0.02	-0.01
25	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.08	0.03	0.00	-0.01	0.00
26	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01

30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	-0.06	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	-0.04	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
51	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	-0.10	-0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	1	0.05	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.67	-0.45	0.09	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
55	1	-0.01	0.18	0.05	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.43	0.22	0.21	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
57	1	0.04	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.03	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		175			176			177		
		A			A			A		
Frequencies	--	3212.4232			3224.3734			3225.2187		
Red. masses	--	1.0893			1.0985			1.0986		
Frc consts	--	6.6233			6.7289			6.7327		
IR Inten	--	1.5441			19.2051			20.4728		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.07	0.03	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	0.21	0.68	0.22	0.00	-0.01	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.46	0.05	0.45	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00





9	6	0.03	-0.06	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.03	0.05	-0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.38	0.74	-0.33
19	1	0.01	0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	0.14	0.39	0.12
20	1	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	0.02
21	1	-0.03	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.02
22	1	-0.26	-0.04	-0.26	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.02
23	1	-0.37	0.69	-0.33	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.04	0.02
24	1	0.09	0.32	0.12	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01
25	1	0.01	0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01
26	1	0.05	0.01	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.03
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.02	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.85	0.24	0.00	-0.01	0.00
51	1	0.00	0.00	0.00	0.39	0.19	0.15	-0.01	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.05	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
53	1	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
55	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.00	0.01	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
57	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
62	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
63	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00

**Table S41.** Cartesian coordinates of optimized structure for (10/Ag<sup>+</sup>/10)

1	6	0	-1.960408	2.443697	0.965540
2	6	0	-2.464278	2.509722	2.292379
3	6	0	-3.339876	1.545473	2.788044
4	6	0	-3.767537	0.470992	1.969784
5	6	0	-4.645065	-0.555319	2.476282
6	6	0	-5.074724	-1.581425	1.668985
7	6	0	-4.672112	-1.658882	0.284243
8	6	0	-5.120536	-2.698750	-0.563562
9	6	0	-4.735048	-2.744831	-1.915181
10	6	0	-3.895740	-1.752612	-2.445685
11	6	0	-3.419231	-0.700656	-1.625662
12	6	0	-2.598272	0.360556	-2.145746
13	6	0	-2.125492	1.374050	-1.335414
14	6	0	-2.436189	1.414630	0.082624
15	6	0	-3.800482	-0.648398	-0.244218
16	6	0	-3.328635	0.413424	0.600166
17	6	0	-0.884296	3.379797	0.589097
18	1	0	-2.130601	3.303609	2.952979
19	1	0	-3.688766	1.605188	3.815205
20	1	0	-4.963596	-0.498371	3.513642
21	1	0	-5.736733	-2.349704	2.060984
22	1	0	-5.777562	-3.466298	-0.161818
23	1	0	-5.096818	-3.546228	-2.552597
24	1	0	-3.616183	-1.780916	-3.496261
25	1	0	-2.385576	0.377439	-3.212890
26	1	0	-1.614949	2.217639	-1.789426
27	6	0	-0.765936	4.736390	1.252112
28	1	0	-1.742596	5.205099	1.405997
29	1	0	-0.279284	4.638394	2.233159
30	1	0	-0.134761	5.379379	0.633839
31	8	0	0.012098	3.072100	-0.272966
32	47	0	0.702142	1.111512	-1.085675
33	6	0	4.854876	1.170027	-1.211712
34	6	0	5.890965	1.286579	-0.269533
35	6	0	5.927496	0.446010	0.855693
36	6	0	4.931267	-0.537893	1.062493
37	6	0	4.956792	-1.426437	2.203657
38	6	0	3.993274	-2.389496	2.375375
39	6	0	2.917097	-2.549244	1.422085
40	6	0	1.928019	-3.550825	1.568774
41	6	0	0.902308	-3.696132	0.620151
42	6	0	0.833226	-2.839722	-0.492533
43	6	0	1.796814	-1.822796	-0.669900
44	6	0	1.770364	-0.930261	-1.820338
45	6	0	2.763420	0.044436	-1.998508
46	6	0	3.837194	0.206051	-1.036270
47	6	0	2.858298	-1.671063	0.287900
48	6	0	3.868332	-0.665669	0.106756
49	1	0	4.835474	1.821596	-2.082344
50	1	0	6.670774	2.028530	-0.414289
51	1	0	6.735135	0.543556	1.577031
52	1	0	5.764686	-1.320775	2.923347
53	1	0	4.027988	-3.056959	3.232745
54	1	0	1.972641	-4.219765	2.424698
55	1	0	0.159558	-4.478883	0.744681
56	1	0	0.037599	-2.961576	-1.224199
57	1	0	1.075611	-1.151336	-2.629793
58	1	0	2.815203	0.603969	-2.931544

---

**Table S42. Vibrational frequencies for (10/Ag<sup>+</sup>/10)**

Harmonic frequencies (cm<sup>-1</sup>), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A<sup>4</sup>/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	-128.4730			11.2868			13.4428		
Red. masses	--	8.9458			5.6902			7.1153		
Frc consts	--	0.0870			0.0004			0.0008		
IR Inten	--	3.1863			0.0925			0.0457		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.39	-0.20	0.08	0.00	0.05	-0.03	0.00	0.02	-0.01
2	6	0.29	-0.17	0.05	0.00	0.08	-0.04	0.01	-0.01	0.00
3	6	0.14	-0.07	0.00	0.00	0.09	-0.01	0.06	-0.04	0.01
4	6	0.07	-0.03	-0.01	0.02	0.06	0.02	0.09	-0.05	0.01
5	6	-0.01	0.02	-0.03	0.02	0.07	0.05	0.13	-0.09	0.02
6	6	-0.03	0.03	-0.03	0.04	0.04	0.08	0.16	-0.10	0.02
7	6	-0.01	0.02	-0.02	0.04	0.00	0.08	0.14	-0.08	0.02
8	6	-0.03	0.02	-0.02	0.05	-0.03	0.11	0.17	-0.10	0.02
9	6	-0.03	0.01	-0.02	0.06	-0.06	0.11	0.16	-0.08	0.01
10	6	-0.02	0.01	-0.02	0.05	-0.07	0.08	0.11	-0.04	0.01
11	6	0.00	0.00	-0.02	0.04	-0.04	0.06	0.08	-0.03	0.00
12	6	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.05	0.03	0.03	0.01	-0.01
13	6	0.10	-0.06	0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.02	-0.01
14	6	0.21	-0.11	0.04	0.01	0.02	0.00	0.02	0.00	0.00
15	6	0.03	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.05	0.10	-0.05	0.01
16	6	0.11	-0.05	0.01	0.02	0.02	0.02	0.07	-0.03	0.00
17	6	0.21	-0.07	0.00	0.00	0.04	-0.06	-0.03	0.05	-0.02
18	1	0.31	-0.20	0.08	-0.01	0.10	-0.06	-0.01	0.00	0.00
19	1	0.10	-0.02	-0.01	0.00	0.11	-0.01	0.07	-0.06	0.01
20	1	-0.03	0.04	-0.04	0.02	0.09	0.05	0.15	-0.11	0.03
21	1	-0.07	0.06	-0.04	0.04	0.04	0.10	0.20	-0.13	0.03
22	1	-0.04	0.03	-0.02	0.06	-0.02	0.13	0.21	-0.13	0.03
23	1	-0.04	0.02	-0.02	0.07	-0.09	0.13	0.18	-0.09	0.02
24	1	-0.03	0.02	-0.03	0.05	-0.10	0.09	0.09	-0.03	0.00
25	1	-0.05	0.04	-0.02	0.03	-0.08	0.03	0.02	0.02	-0.01
26	1	0.09	-0.05	0.00	0.00	-0.02	-0.03	-0.03	0.04	-0.01
27	6	0.05	-0.05	-0.01	-0.01	0.06	-0.10	-0.07	0.06	-0.02
28	1	-0.01	-0.13	-0.11	-0.01	0.06	-0.11	-0.09	0.02	-0.02
29	1	-0.05	0.01	0.05	-0.02	0.09	-0.09	-0.06	0.08	-0.03
30	1	0.05	-0.01	0.04	-0.01	0.05	-0.11	-0.10	0.08	-0.03
31	8	0.12	0.09	-0.14	0.00	0.02	-0.05	-0.03	0.07	-0.02
32	47	-0.06	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.08	-0.01
33	6	-0.09	0.06	0.03	-0.03	0.08	0.14	0.01	-0.09	-0.02
34	6	-0.10	0.09	0.04	-0.06	0.06	0.17	0.02	-0.13	-0.03
35	6	-0.10	0.09	0.05	-0.08	0.01	0.14	-0.01	-0.12	-0.02
36	6	-0.08	0.07	0.04	-0.06	-0.02	0.07	-0.05	-0.07	-0.01
37	6	-0.08	0.07	0.04	-0.08	-0.07	0.03	-0.08	-0.06	0.00
38	6	-0.07	0.06	0.03	-0.06	-0.10	-0.04	-0.12	-0.02	0.01
39	6	-0.06	0.04	0.02	-0.02	-0.08	-0.09	-0.13	0.02	0.02
40	6	-0.05	0.03	0.02	-0.01	-0.11	-0.16	-0.17	0.06	0.03
41	6	-0.04	0.01	0.01	0.03	-0.09	-0.20	-0.18	0.09	0.04
42	6	-0.03	0.00	0.00	0.04	-0.05	-0.16	-0.15	0.08	0.03
43	6	-0.05	0.02	0.01	0.02	-0.02	-0.09	-0.11	0.04	0.01
44	6	-0.04	0.01	0.00	0.04	0.03	-0.05	-0.07	0.03	0.01
45	6	-0.05	0.02	0.01	0.03	0.06	0.02	-0.04	-0.01	-0.01
46	6	-0.07	0.04	0.02	-0.01	0.04	0.06	-0.03	-0.05	-0.01
47	6	-0.06	0.04	0.02	-0.01	-0.03	-0.05	-0.10	0.01	0.01
48	6	-0.07	0.05	0.03	-0.03	0.00	0.03	-0.06	-0.04	0.00
49	1	-0.09	0.06	0.03	-0.01	0.11	0.16	0.04	-0.10	-0.03
50	1	-0.11	0.10	0.05	-0.07	0.09	0.23	0.05	-0.16	-0.04



51	1	-0.11	0.10	0.06	-0.10	0.00	0.17	0.00	-0.14	-0.03
52	1	-0.09	0.09	0.05	-0.10	-0.08	0.06	-0.08	-0.09	0.00
53	1	-0.07	0.06	0.04	-0.07	-0.14	-0.07	-0.15	-0.01	0.02
54	1	-0.05	0.03	0.02	-0.02	-0.15	-0.19	-0.20	0.07	0.04
55	1	-0.03	0.00	0.01	0.04	-0.12	-0.26	-0.22	0.13	0.05
56	1	-0.02	-0.01	0.00	0.07	-0.03	-0.19	-0.16	0.11	0.03
57	1	-0.03	-0.01	-0.01	0.07	0.05	-0.08	-0.09	0.05	0.01
58	1	-0.05	0.01	0.00	0.04	0.10	0.04	-0.02	-0.02	-0.01
			4			5			6	
			A			A			A	
Frequencies	--	23.8296			32.4767			45.7517		
Red. masses	--	7.9676			5.7345			10.6902		
Frc consts	--	0.0027			0.0036			0.0132		
IR Inten	--	1.3370			0.0602			0.2013		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.08	0.01	0.00	-0.02	0.06	0.01	-0.02	0.00
2	6	-0.04	0.08	-0.01	-0.07	0.02	0.03	-0.01	-0.01	0.00
3	6	-0.06	0.08	-0.04	-0.13	0.05	0.00	-0.02	0.00	-0.01
4	6	-0.01	0.07	-0.04	-0.11	0.05	0.00	-0.02	0.00	-0.01
5	6	-0.01	0.05	-0.07	-0.16	0.08	-0.02	-0.05	0.01	-0.01
6	6	0.05	0.03	-0.07	-0.12	0.06	-0.02	-0.05	0.02	-0.01
7	6	0.10	0.03	-0.05	-0.03	0.01	0.01	-0.04	0.00	0.00
8	6	0.17	0.00	-0.06	0.02	-0.02	0.02	-0.04	0.00	0.00
9	6	0.22	-0.01	-0.04	0.10	-0.07	0.04	-0.03	-0.01	0.00
10	6	0.21	0.01	-0.02	0.14	-0.09	0.06	0.00	-0.03	0.01
11	6	0.15	0.04	-0.02	0.09	-0.06	0.05	0.00	-0.03	0.01
12	6	0.13	0.06	0.00	0.11	-0.07	0.07	0.02	-0.04	0.01
13	6	0.08	0.08	0.00	0.07	-0.05	0.06	0.02	-0.04	0.01
14	6	0.04	0.07	0.00	0.01	-0.02	0.05	0.01	-0.03	0.00
15	6	0.09	0.04	-0.03	0.01	-0.02	0.03	-0.01	-0.02	0.00
16	6	0.04	0.06	-0.03	-0.03	0.00	0.03	-0.01	-0.02	0.00
17	6	0.03	0.06	0.04	0.05	-0.06	0.10	-0.01	0.00	0.01
18	1	-0.07	0.09	0.00	-0.08	0.02	0.03	-0.01	-0.01	-0.01
19	1	-0.10	0.09	-0.05	-0.18	0.09	-0.02	-0.03	0.01	-0.01
20	1	-0.05	0.06	-0.08	-0.22	0.11	-0.04	-0.06	0.03	-0.01
21	1	0.05	0.02	-0.09	-0.15	0.08	-0.04	-0.07	0.03	-0.01
22	1	0.17	-0.01	-0.07	-0.01	0.00	0.00	-0.06	0.02	-0.01
23	1	0.27	-0.03	-0.04	0.14	-0.09	0.05	-0.03	-0.01	0.00
24	1	0.25	0.01	-0.01	0.20	-0.12	0.08	0.01	-0.04	0.01
25	1	0.15	0.06	0.00	0.15	-0.10	0.08	0.04	-0.06	0.01
26	1	0.05	0.10	0.01	0.07	-0.05	0.07	0.06	-0.06	0.01
27	6	0.03	0.06	0.03	0.11	-0.09	0.15	-0.05	0.00	0.00
28	1	0.03	0.09	-0.02	0.13	-0.03	0.13	-0.07	-0.02	-0.01
29	1	-0.02	0.06	0.06	0.07	-0.15	0.16	-0.05	0.02	0.00
30	1	0.08	0.04	0.06	0.16	-0.11	0.19	-0.07	0.02	0.00
31	8	0.05	0.03	0.07	0.05	-0.07	0.10	0.01	0.02	0.01
32	47	-0.11	-0.05	0.06	0.03	-0.02	-0.02	0.18	0.12	0.02
33	6	-0.13	0.01	-0.05	0.04	-0.02	-0.07	-0.20	0.00	-0.06
34	6	-0.10	0.04	-0.08	0.02	-0.01	-0.04	-0.21	0.08	-0.06
35	6	-0.04	0.03	-0.09	-0.02	0.02	-0.02	-0.17	0.11	-0.04
36	6	-0.01	0.00	-0.06	-0.04	0.04	-0.02	-0.11	0.05	-0.03
37	6	0.05	0.00	-0.07	-0.09	0.07	0.01	-0.06	0.06	-0.02
38	6	0.08	-0.03	-0.04	-0.10	0.09	0.01	0.01	0.01	-0.01
39	6	0.05	-0.05	-0.01	-0.08	0.08	-0.02	0.01	-0.07	0.00
40	6	0.08	-0.07	0.02	-0.09	0.09	-0.02	0.07	-0.12	0.01
41	6	0.05	-0.09	0.05	-0.07	0.08	-0.05	0.06	-0.18	0.03
42	6	-0.01	-0.09	0.06	-0.02	0.05	-0.08	0.00	-0.18	0.03
43	6	-0.04	-0.06	0.04	-0.01	0.03	-0.07	-0.06	-0.14	0.01
44	6	-0.10	-0.06	0.04	0.02	0.02	-0.09	-0.11	-0.15	0.01
45	6	-0.13	-0.04	0.01	0.04	0.00	-0.08	-0.16	-0.11	-0.03
46	6	-0.10	-0.01	-0.02	0.02	0.00	-0.07	-0.15	-0.05	-0.04
47	6	-0.01	-0.04	0.00	-0.03	0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.01
48	6	-0.04	-0.02	-0.03	-0.02	0.03	-0.05	-0.10	-0.03	-0.03

49	1	-0.18	0.02	-0.05	0.07	-0.04	-0.08	-0.24	-0.02	-0.08
50	1	-0.13	0.06	-0.10	0.03	-0.02	-0.04	-0.26	0.12	-0.07
51	1	-0.02	0.05	-0.11	-0.04	0.03	0.00	-0.18	0.17	-0.04
52	1	0.07	0.01	-0.09	-0.11	0.08	0.03	-0.06	0.12	-0.02
53	1	0.12	-0.03	-0.05	-0.14	0.12	0.03	0.05	0.02	0.00
54	1	0.13	-0.08	0.02	-0.13	0.12	0.00	0.12	-0.12	0.02
55	1	0.07	-0.11	0.08	-0.08	0.09	-0.05	0.11	-0.22	0.04
56	1	-0.03	-0.10	0.09	-0.01	0.04	-0.09	-0.01	-0.22	0.05
57	1	-0.12	-0.07	0.06	0.04	0.01	-0.10	-0.16	-0.15	0.05
58	1	-0.17	-0.03	0.01	0.05	0.00	-0.09	-0.18	-0.15	-0.05

			7			8			9	
			A			A			A	
Frequencies	--		52.5702			58.2196			85.7323	
Red. masses	--		6.6311			7.1244			4.5569	
Frc consts	--		0.0108			0.0142			0.0197	
IR Inten	--		1.1549			1.2212			2.5136	

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	0.04	0.03	-0.04	0.05	-0.02	0.00	0.01	-0.07
2	6	-0.03	0.02	0.04	-0.01	0.04	-0.01	0.00	0.02	-0.07
3	6	-0.01	0.00	0.03	0.05	-0.01	0.01	-0.01	0.04	-0.06
4	6	0.01	0.00	0.02	0.07	-0.02	0.02	-0.01	0.02	-0.04
5	6	0.06	-0.05	0.03	0.16	-0.08	0.04	0.02	0.02	-0.01
6	6	0.09	-0.06	0.02	0.16	-0.08	0.03	0.04	-0.01	0.02
7	6	0.06	-0.02	0.01	0.08	-0.02	0.01	0.02	-0.02	0.01
8	6	0.09	-0.02	0.01	0.05	0.00	-0.01	0.04	-0.06	0.04
9	6	0.05	0.02	-0.01	-0.03	0.07	-0.03	0.01	-0.06	0.03
10	6	0.00	0.06	-0.01	-0.08	0.11	-0.04	-0.05	-0.04	-0.01
11	6	-0.03	0.07	0.00	-0.05	0.08	-0.03	-0.06	-0.01	-0.03
12	6	-0.07	0.10	0.00	-0.07	0.10	-0.03	-0.08	0.00	-0.06
13	6	-0.08	0.10	0.01	-0.04	0.07	-0.02	-0.06	0.00	-0.07
14	6	-0.06	0.06	0.01	-0.03	0.05	-0.02	-0.03	0.01	-0.07
15	6	0.00	0.03	0.01	0.01	0.03	-0.01	-0.03	0.00	-0.02
16	6	-0.02	0.03	0.01	0.02	0.02	0.00	-0.03	0.02	-0.05
17	6	0.03	-0.03	0.07	0.00	0.01	-0.01	0.05	-0.04	-0.04
18	1	-0.03	0.01	0.05	-0.02	0.05	-0.02	0.02	0.02	-0.07
19	1	0.00	-0.02	0.04	0.07	-0.03	0.02	0.00	0.05	-0.06
20	1	0.08	-0.08	0.04	0.21	-0.12	0.06	0.04	0.03	-0.01
21	1	0.14	-0.09	0.03	0.22	-0.12	0.05	0.08	-0.03	0.04
22	1	0.13	-0.06	0.01	0.10	-0.03	0.00	0.08	-0.08	0.07
23	1	0.07	0.01	-0.01	-0.06	0.09	-0.04	0.03	-0.09	0.05
24	1	-0.03	0.09	-0.02	-0.14	0.15	-0.06	-0.07	-0.04	-0.01
25	1	-0.09	0.13	-0.01	-0.09	0.12	-0.04	-0.10	-0.01	-0.06
26	1	-0.10	0.12	0.02	-0.02	0.07	0.00	-0.04	-0.01	-0.08
27	6	0.21	-0.11	0.20	0.01	0.04	-0.07	0.21	-0.12	0.09
28	1	0.27	-0.02	0.34	0.02	0.05	-0.09	0.27	-0.08	0.31
29	1	0.29	-0.26	0.15	0.02	0.08	-0.07	0.39	-0.25	-0.02
30	1	0.22	-0.10	0.21	0.02	0.00	-0.10	0.14	-0.08	0.04
31	8	-0.03	-0.04	0.01	0.05	-0.08	0.07	0.00	-0.03	-0.10
32	47	-0.02	0.02	-0.15	0.04	-0.10	0.08	0.04	-0.02	0.06
33	6	-0.03	-0.01	0.03	0.01	-0.02	-0.07	-0.07	0.09	0.05
34	6	-0.05	0.02	0.05	-0.03	0.02	-0.03	-0.08	0.10	0.06
35	6	-0.05	0.04	0.06	-0.09	0.08	0.02	-0.03	0.04	0.01
36	6	-0.03	0.03	0.06	-0.09	0.09	0.02	0.01	-0.01	-0.03
37	6	-0.03	0.04	0.07	-0.15	0.15	0.07	0.05	-0.07	-0.07
38	6	-0.01	0.02	0.07	-0.14	0.14	0.06	0.05	-0.07	-0.08
39	6	0.01	-0.01	0.06	-0.08	0.07	0.00	0.00	-0.01	-0.03
40	6	0.03	-0.04	0.05	-0.06	0.05	-0.02	-0.04	0.04	0.01
41	6	0.05	-0.07	0.04	0.01	-0.02	-0.08	-0.09	0.10	0.05
42	6	0.04	-0.08	0.03	0.04	-0.06	-0.11	-0.08	0.09	0.05
43	6	0.01	-0.06	0.04	0.01	-0.03	-0.08	-0.04	0.04	0.01
44	6	0.02	-0.08	0.02	0.02	-0.04	-0.09	-0.02	0.03	0.00
45	6	0.00	-0.06	0.02	0.02	-0.03	-0.08	-0.02	0.03	0.00
46	6	-0.02	-0.02	0.04	0.00	-0.01	-0.07	-0.03	0.04	0.01

47	6	0.00	-0.02	0.05	-0.04	0.02	-0.04	-0.01	0.01	-0.02
48	6	-0.02	-0.01	0.05	-0.04	0.03	-0.03	0.00	0.01	-0.02
49	1	-0.03	-0.03	0.02	0.05	-0.06	-0.10	-0.10	0.13	0.08
50	1	-0.06	0.03	0.04	-0.02	0.01	-0.03	-0.12	0.15	0.10
51	1	-0.06	0.06	0.07	-0.13	0.13	0.06	-0.03	0.03	0.01
52	1	-0.04	0.07	0.08	-0.20	0.21	0.12	0.08	-0.10	-0.10
53	1	-0.01	0.03	0.08	-0.19	0.19	0.10	0.08	-0.10	-0.10
54	1	0.04	-0.03	0.06	-0.09	0.08	0.01	-0.04	0.03	0.00
55	1	0.06	-0.09	0.03	0.03	-0.05	-0.10	-0.13	0.15	0.09
56	1	0.05	-0.11	0.02	0.08	-0.10	-0.15	-0.11	0.13	0.07
57	1	0.03	-0.11	0.01	0.03	-0.04	-0.10	-0.03	0.04	0.00
58	1	0.02	-0.09	0.00	0.02	-0.03	-0.08	-0.02	0.04	0.01
		10				11			12	
		A				A			A	
Frequencies	--	96.4259			113.2063			117.5492		
Red. masses	--	4.4437			3.1120			1.3273		
Frc consts	--	0.0243			0.0235			0.0108		
IR Inten	--	2.9491			4.6915			2.3252		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.01	0.04	0.04	-0.03	0.04	-0.01	0.00	0.01
2	6	-0.04	0.02	0.03	0.08	-0.07	0.06	0.04	-0.03	0.03
3	6	-0.03	0.00	0.02	0.03	-0.03	0.04	0.04	-0.03	0.03
4	6	0.01	-0.02	0.03	-0.06	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01
5	6	0.03	-0.04	0.02	-0.09	0.04	-0.02	-0.02	0.01	0.00
6	6	0.03	-0.03	0.01	-0.07	0.03	-0.02	-0.04	0.02	-0.02
7	6	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.02	0.02	-0.01
8	6	-0.02	0.03	-0.02	0.11	-0.07	0.02	0.01	0.00	-0.01
9	6	-0.03	0.06	-0.03	0.15	-0.08	0.04	0.05	-0.01	0.00
10	6	0.00	0.05	-0.01	0.04	0.00	0.01	0.04	0.00	0.01
11	6	0.03	0.02	0.02	-0.07	0.06	-0.01	0.01	0.01	0.00
12	6	0.05	0.01	0.04	-0.14	0.11	-0.02	0.00	0.02	0.01
13	6	0.05	0.00	0.05	-0.12	0.09	-0.01	-0.02	0.03	0.01
14	6	0.02	-0.01	0.04	-0.05	0.03	0.01	-0.02	0.01	0.01
15	6	0.02	0.00	0.02	-0.07	0.05	-0.01	-0.01	0.02	0.00
16	6	0.02	-0.01	0.03	-0.07	0.04	0.00	-0.02	0.01	0.01
17	6	0.00	-0.01	0.03	0.01	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00
18	1	-0.08	0.04	0.02	0.15	-0.12	0.09	0.07	-0.05	0.04
19	1	-0.04	0.00	0.02	0.06	-0.06	0.05	0.07	-0.06	0.04
20	1	0.03	-0.05	0.02	-0.12	0.05	-0.03	-0.03	0.00	0.00
21	1	0.04	-0.04	0.00	-0.07	0.03	-0.03	-0.06	0.03	-0.03
22	1	-0.03	0.04	-0.04	0.17	-0.12	0.04	0.01	0.00	-0.02
23	1	-0.06	0.09	-0.05	0.26	-0.15	0.06	0.08	-0.03	0.00
24	1	-0.01	0.07	-0.01	0.05	0.00	0.01	0.07	-0.01	0.01
25	1	0.06	0.02	0.04	-0.17	0.14	-0.03	0.00	0.02	0.01
26	1	0.05	0.00	0.06	-0.11	0.09	0.01	-0.02	0.03	0.02
27	6	-0.11	0.07	-0.10	-0.05	0.01	-0.07	-0.04	0.02	-0.04
28	1	-0.14	0.11	-0.42	-0.06	0.12	-0.47	-0.06	-0.19	0.45
29	1	-0.38	0.18	0.04	-0.44	0.05	0.12	0.49	0.10	-0.29
30	1	0.07	-0.03	-0.02	0.24	-0.11	0.10	-0.47	0.18	-0.33
31	8	0.07	-0.08	0.14	-0.01	-0.03	-0.02	-0.01	-0.01	0.01
32	47	0.03	-0.04	-0.06	0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01
33	6	-0.08	0.09	0.06	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
34	6	-0.10	0.12	0.09	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.01
35	6	-0.05	0.06	0.04	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.01
36	6	0.01	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
37	6	0.06	-0.07	-0.06	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
38	6	0.06	-0.07	-0.06	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
39	6	0.01	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	-0.05	0.06	0.04	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01
41	6	-0.11	0.11	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01
42	6	-0.07	0.07	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	6	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01
44	6	0.02	-0.04	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01

45	6	0.02	-0.03	-0.03	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01
46	6	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01
47	6	0.01	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01
48	6	0.01	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01
49	1	-0.10	0.12	0.09	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.01
50	1	-0.16	0.19	0.14	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.03	0.02
51	1	-0.06	0.07	0.05	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.02
52	1	0.08	-0.10	-0.09	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
53	1	0.08	-0.10	-0.08	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	-0.07	0.07	0.06	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.02	0.01
55	1	-0.17	0.18	0.15	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.02
56	1	-0.10	0.10	0.09	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
57	1	0.04	-0.06	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.01
58	1	0.03	-0.04	-0.03	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01
			13			14			15	
			A			A			A	
Frequencies	--	148.0438			160.9856			164.1650		
Red. masses	--	4.4580			4.6661			5.1214		
Frc consts	--	0.0576			0.0712			0.0813		
IR Inten	--	2.2488			2.5057			6.3818		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.08	-0.06	0.01	0.04	-0.02	0.01	0.07	-0.04	0.03
2	6	-0.04	0.03	-0.04	-0.02	0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.00
3	6	-0.13	0.09	-0.07	-0.06	0.04	-0.03	-0.11	0.07	-0.04
4	6	-0.07	0.04	-0.04	-0.03	0.02	-0.01	-0.06	0.03	-0.02
5	6	-0.06	0.04	-0.02	-0.04	0.02	-0.01	-0.07	0.04	-0.02
6	6	0.05	-0.04	0.02	0.02	-0.02	0.01	0.03	-0.03	0.01
7	6	0.06	-0.06	0.03	0.03	-0.03	0.01	0.06	-0.05	0.02
8	6	0.09	-0.09	0.05	0.04	-0.03	0.02	0.08	-0.06	0.03
9	6	-0.02	-0.03	0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
10	6	-0.13	0.04	-0.03	-0.06	0.03	-0.01	-0.09	0.06	-0.02
11	6	-0.09	0.03	-0.03	-0.03	0.01	-0.01	-0.04	0.03	-0.01
12	6	-0.09	0.03	-0.03	-0.03	0.01	-0.01	-0.05	0.03	0.00
13	6	0.02	-0.04	-0.01	0.02	-0.02	0.00	0.03	-0.02	0.02
14	6	0.05	-0.05	0.00	0.04	-0.02	0.01	0.06	-0.04	0.03
15	6	-0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.02	0.01
16	6	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.01
17	6	0.09	-0.06	0.05	0.01	0.01	0.01	0.00	0.03	0.01
18	1	-0.07	0.05	-0.05	-0.04	0.02	-0.01	-0.06	0.03	-0.01
19	1	-0.22	0.16	-0.10	-0.11	0.08	-0.05	-0.19	0.12	-0.07
20	1	-0.10	0.08	-0.04	-0.07	0.05	-0.02	-0.13	0.08	-0.04
21	1	0.10	-0.07	0.05	0.03	-0.02	0.01	0.05	-0.04	0.02
22	1	0.18	-0.14	0.08	0.07	-0.06	0.03	0.14	-0.10	0.05
23	1	-0.02	-0.03	0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.01
24	1	-0.22	0.09	-0.05	-0.10	0.05	-0.03	-0.17	0.12	-0.05
25	1	-0.14	0.06	-0.04	-0.06	0.03	-0.01	-0.09	0.07	-0.01
26	1	0.05	-0.05	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.04	-0.02	0.03
27	6	-0.05	0.01	-0.06	-0.04	0.01	0.04	-0.07	0.01	0.06
28	1	-0.11	-0.18	0.14	-0.06	-0.05	0.09	-0.09	-0.07	0.14
29	1	0.22	0.17	-0.18	0.01	0.01	0.02	0.00	0.01	0.03
30	1	-0.32	0.10	-0.25	-0.10	0.06	0.03	-0.16	0.09	0.05
31	8	0.19	-0.08	0.17	0.01	0.06	-0.01	-0.04	0.12	-0.06
32	47	0.01	0.01	-0.02	-0.03	0.02	0.01	-0.02	0.03	0.02
33	6	0.00	0.01	0.01	0.13	-0.15	-0.11	-0.04	0.05	0.04
34	6	0.05	-0.05	-0.04	-0.01	0.02	0.03	-0.03	0.04	0.04
35	6	0.05	-0.06	-0.04	-0.12	0.15	0.13	0.04	-0.04	-0.02
36	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.05	0.05	0.07	-0.08	-0.06
37	6	0.01	-0.01	0.00	-0.04	0.05	0.05	0.04	-0.05	-0.03
38	6	0.01	0.00	0.00	0.06	-0.06	-0.05	-0.03	0.04	0.04
39	6	0.00	0.01	0.01	0.08	-0.09	-0.07	-0.02	0.02	0.03
40	6	0.04	-0.04	-0.03	0.07	-0.08	-0.06	-0.11	0.13	0.12
41	6	0.04	-0.04	-0.03	-0.03	0.04	0.03	-0.03	0.03	0.04
42	6	0.00	0.01	0.01	-0.08	0.10	0.08	0.11	-0.13	-0.09

43	6	-0.04	0.05	0.04	-0.01	0.02	0.01	0.12	-0.14	-0.10
44	6	-0.04	0.05	0.04	0.00	0.01	0.01	0.10	-0.11	-0.08
45	6	-0.04	0.05	0.05	0.11	-0.11	-0.08	0.03	-0.04	-0.02
46	6	-0.04	0.05	0.04	0.12	-0.13	-0.10	0.03	-0.04	-0.03
47	6	-0.04	0.05	0.04	0.06	-0.06	-0.04	0.08	-0.09	-0.07
48	6	-0.04	0.05	0.04	0.06	-0.06	-0.04	0.08	-0.10	-0.07
49	1	0.00	0.01	0.01	0.21	-0.24	-0.18	-0.09	0.12	0.10
50	1	0.09	-0.10	-0.08	-0.04	0.06	0.07	-0.09	0.11	0.09
51	1	0.09	-0.11	-0.08	-0.24	0.29	0.24	0.04	-0.04	-0.02
52	1	0.03	-0.03	-0.02	-0.10	0.13	0.11	0.05	-0.05	-0.03
53	1	0.02	-0.02	-0.01	0.08	-0.10	-0.07	-0.09	0.11	0.10
54	1	0.08	-0.08	-0.07	0.11	-0.12	-0.10	-0.23	0.26	0.23
55	1	0.08	-0.08	-0.07	-0.07	0.08	0.06	-0.07	0.08	0.09
56	1	0.00	0.01	0.01	-0.16	0.19	0.15	0.17	-0.19	-0.14
57	1	-0.02	0.04	0.03	-0.05	0.05	0.04	0.09	-0.09	-0.08
58	1	-0.03	0.04	0.04	0.11	-0.13	-0.10	-0.01	0.02	0.01

		16			17			18		
		A			A			A		
Frequencies	--	177.1543			221.1385			241.8964		
Red. masses	--	7.1841			4.7364			4.2162		
Frc consts	--	0.1328			0.1365			0.1454		
IR Inten	--	2.4159			17.8076			3.2866		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	0.04	-0.12	-0.01	0.02	-0.03	-0.06	0.04	-0.04
2	6	0.07	-0.03	-0.08	0.03	-0.02	-0.01	-0.01	0.02	-0.02
3	6	0.17	-0.07	-0.03	0.05	-0.02	0.00	0.06	-0.03	0.00
4	6	0.08	-0.01	-0.05	0.00	0.04	-0.03	0.10	-0.05	0.01
5	6	0.11	0.00	0.00	0.01	0.05	-0.01	-0.09	0.09	-0.04
6	6	-0.01	0.06	0.01	0.02	0.03	0.02	-0.11	0.09	-0.04
7	6	-0.08	0.06	-0.01	0.01	0.03	0.01	0.08	-0.05	0.03
8	6	-0.07	0.01	0.05	0.06	-0.02	0.06	0.01	-0.01	0.02
9	6	-0.01	-0.11	0.08	0.00	-0.02	0.04	-0.04	0.01	0.00
10	6	0.01	-0.14	0.03	-0.07	0.02	-0.01	-0.03	0.00	-0.01
11	6	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	0.03	-0.03	0.06	-0.05	0.01
12	6	-0.02	-0.08	-0.08	0.04	-0.03	-0.02	-0.10	0.05	-0.04
13	6	-0.04	-0.02	-0.13	0.09	-0.04	-0.03	-0.11	0.07	-0.05
14	6	-0.05	0.05	-0.13	0.01	0.02	-0.04	0.03	-0.02	-0.01
15	6	-0.08	0.04	-0.06	-0.04	0.05	-0.03	0.18	-0.12	0.04
16	6	-0.04	0.05	-0.10	-0.03	0.05	-0.04	0.17	-0.11	0.03
17	6	0.05	0.02	0.07	-0.06	0.09	0.03	-0.03	0.03	0.00
18	1	0.12	-0.05	-0.07	0.06	-0.04	0.00	-0.05	0.05	-0.04
19	1	0.29	-0.15	0.02	0.09	-0.05	0.01	0.04	-0.02	-0.01
20	1	0.22	-0.02	0.04	0.03	0.06	0.00	-0.25	0.21	-0.10
21	1	-0.01	0.07	0.04	0.05	0.01	0.03	-0.30	0.23	-0.09
22	1	-0.08	0.03	0.10	0.13	-0.07	0.10	-0.07	0.05	0.00
23	1	0.04	-0.17	0.13	0.02	-0.04	0.07	-0.12	0.06	-0.01
24	1	0.06	-0.25	0.05	-0.10	0.01	-0.02	-0.14	0.06	-0.04
25	1	0.02	-0.15	-0.08	0.09	-0.07	-0.01	-0.24	0.13	-0.06
26	1	-0.02	-0.04	-0.16	0.15	-0.08	-0.03	-0.22	0.13	-0.05
27	6	-0.05	0.01	0.12	-0.21	0.01	0.25	0.01	0.01	0.03
28	1	-0.08	-0.02	0.02	-0.27	-0.12	0.27	0.02	0.05	0.03
29	1	-0.15	0.00	0.16	-0.26	-0.11	0.26	-0.02	-0.04	0.04
30	1	0.00	0.04	0.20	-0.25	0.19	0.40	0.05	0.00	0.06
31	8	0.25	-0.01	0.30	-0.05	0.20	-0.01	0.00	-0.01	0.06
32	47	-0.05	0.05	0.01	0.04	-0.07	-0.02	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.04	-0.05	-0.04
34	6	-0.03	0.03	0.03	0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
35	6	-0.02	0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	0.05	0.04
36	6	0.02	-0.02	-0.01	-0.03	0.03	0.02	-0.04	0.04	0.03
37	6	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.02	-0.02	0.06	-0.07	-0.05
38	6	-0.01	0.02	0.02	0.02	-0.03	-0.03	0.05	-0.06	-0.05
39	6	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.02	0.01	-0.04	0.04	0.04
40	6	-0.04	0.05	0.05	0.01	-0.02	-0.02	-0.05	0.05	0.04

41	6	-0.01	0.02	0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01
42	6	0.04	-0.04	-0.03	-0.02	0.02	0.01	0.05	-0.05	-0.05
43	6	0.05	-0.06	-0.04	-0.03	0.03	0.03	-0.01	0.01	0.01
44	6	0.03	-0.04	-0.03	0.01	-0.02	-0.02	0.02	-0.02	-0.02
45	6	0.02	-0.03	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.02	-0.02
46	6	0.03	-0.04	-0.03	-0.03	0.04	0.03	-0.01	0.01	0.00
47	6	0.05	-0.05	-0.04	-0.05	0.06	0.04	-0.06	0.07	0.05
48	6	0.05	-0.06	-0.04	-0.06	0.07	0.05	-0.06	0.07	0.05
49	1	-0.01	0.01	0.02	0.01	-0.02	-0.02	0.10	-0.13	-0.10
50	1	-0.06	0.08	0.07	0.04	-0.05	-0.05	0.02	-0.02	-0.02
51	1	-0.04	0.05	0.05	0.03	-0.04	-0.04	-0.05	0.06	0.05
52	1	-0.01	0.02	0.02	0.05	-0.06	-0.06	0.14	-0.16	-0.13
53	1	-0.04	0.05	0.05	0.06	-0.08	-0.07	0.13	-0.16	-0.13
54	1	-0.09	0.10	0.09	0.05	-0.06	-0.06	-0.06	0.06	0.05
55	1	-0.04	0.05	0.05	0.02	-0.03	-0.03	0.03	-0.04	-0.03
56	1	0.05	-0.06	-0.04	-0.01	0.01	0.00	0.12	-0.13	-0.11
57	1	0.01	-0.02	-0.02	0.06	-0.06	-0.04	0.04	-0.04	-0.03
58	1	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.06	-0.04	0.04	-0.05	-0.03
			19			20			21	
			A			A			A	
Frequencies	--		242.9214			254.2731			273.2869	
Red. masses	--		3.8695			3.7365			4.7181	
Frc consts	--		0.1345			0.1423			0.2076	
IR Inten	--		5.9981			0.3140			0.7081	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	0.03	-0.03	-0.10	0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.01	-0.01	0.07	-0.05	0.04	0.01	-0.01	0.00
3	6	0.05	-0.03	0.00	0.12	-0.09	0.06	0.00	0.00	0.00
4	6	0.06	-0.02	0.00	-0.03	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.00
5	6	-0.05	0.06	-0.03	-0.10	0.07	-0.04	-0.01	0.01	0.00
6	6	-0.06	0.06	-0.02	-0.03	0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00
7	6	0.06	-0.03	0.02	0.07	-0.05	0.01	0.01	0.00	0.00
8	6	0.02	-0.01	0.02	0.15	-0.10	0.04	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	0.01	0.01	-0.04	0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.00
10	6	-0.04	0.01	-0.01	-0.15	0.10	-0.05	0.00	0.00	0.00
11	6	0.03	-0.02	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00
12	6	-0.04	0.02	-0.02	0.15	-0.11	0.03	0.01	-0.01	0.00
13	6	-0.04	0.03	-0.03	0.12	-0.09	0.02	0.00	0.00	0.00
14	6	0.02	-0.01	-0.01	-0.05	0.03	-0.02	-0.01	0.01	0.00
15	6	0.10	-0.06	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
16	6	0.09	-0.06	0.01	-0.05	0.04	-0.02	-0.01	0.01	0.00
17	6	-0.03	0.03	0.00	-0.04	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.01	0.02	-0.02	0.16	-0.11	0.07	0.02	-0.02	0.01
19	1	0.05	-0.03	0.00	0.25	-0.19	0.11	0.01	0.00	0.00
20	1	-0.15	0.14	-0.06	-0.18	0.12	-0.07	-0.01	0.01	0.00
21	1	-0.17	0.14	-0.05	-0.05	0.03	-0.03	0.01	-0.01	0.00
22	1	-0.01	0.01	0.02	0.29	-0.20	0.08	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.07	0.03	0.00	-0.09	0.05	-0.03	-0.02	0.02	-0.01
24	1	-0.11	0.05	-0.03	-0.27	0.18	-0.09	0.00	0.01	0.00
25	1	-0.11	0.06	-0.04	0.28	-0.19	0.05	0.02	-0.01	0.00
26	1	-0.09	0.06	-0.03	0.20	-0.14	0.01	0.00	0.00	0.00
27	6	-0.03	0.00	0.05	0.10	0.03	-0.06	-0.01	0.00	0.00
28	1	-0.03	0.01	0.05	0.16	0.16	-0.09	-0.01	-0.01	0.00
29	1	-0.05	-0.04	0.06	0.09	0.01	-0.06	-0.01	-0.01	0.01
30	1	-0.01	0.02	0.09	0.19	-0.08	-0.09	-0.01	0.00	0.01
31	8	-0.01	0.01	0.03	-0.03	-0.07	0.03	0.00	0.00	0.00
32	47	0.01	-0.02	-0.01	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	-0.07	0.09	0.07	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
34	6	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.11	0.14	0.10
35	6	0.07	-0.08	-0.06	-0.01	0.02	0.01	0.01	-0.02	-0.01
36	6	0.04	-0.05	-0.04	-0.01	0.01	0.00	0.10	-0.12	-0.10
37	6	-0.09	0.11	0.08	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.09	-0.07
38	6	-0.09	0.10	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.09	0.08

39	6	0.05	-0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.12	0.10
40	6	0.07	-0.08	-0.07	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01
41	6	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.12	-0.11
42	6	-0.08	0.09	0.08	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.03	0.02
43	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.13	0.10
44	6	-0.02	0.02	0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.06	0.08	0.06
45	6	-0.03	0.03	0.02	-0.01	0.01	0.01	0.10	-0.11	-0.08
46	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.12	-0.09
47	6	0.07	-0.09	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.09	0.07
48	6	0.07	-0.08	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.07	-0.06
49	1	-0.17	0.21	0.16	0.01	-0.01	-0.01	-0.03	0.05	0.03
50	1	-0.03	0.04	0.03	-0.01	0.00	0.00	-0.25	0.32	0.24
51	1	0.09	-0.11	-0.09	-0.02	0.03	0.02	-0.01	0.02	0.01
52	1	-0.21	0.25	0.20	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.15	-0.12
53	1	-0.20	0.24	0.19	0.00	-0.01	0.00	-0.14	0.15	0.13
54	1	0.10	-0.11	-0.09	-0.02	0.02	0.02	0.07	-0.08	-0.07
55	1	-0.05	0.05	0.04	-0.01	0.01	0.01	0.28	-0.30	-0.26
56	1	-0.19	0.20	0.17	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01
57	1	-0.04	0.05	0.03	-0.01	0.01	0.01	-0.09	0.07	0.08
58	1	-0.05	0.06	0.04	-0.02	0.02	0.01	0.12	-0.17	-0.12
			22			23			24	
			A			A			A	
Frequencies	--		280.9770			301.0327			316.3845	
Red. masses	--		4.5028			4.2904			5.8980	
Frc consts	--		0.2094			0.2291			0.3478	
IR Inten	--		1.2914			2.2256			4.1952	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.03	0.00	0.02	0.03	0.01	0.05	0.12	0.04
2	6	0.15	-0.11	0.05	0.01	-0.01	0.02	0.02	-0.01	0.04
3	6	-0.03	0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.03	-0.02
4	6	-0.14	0.12	-0.06	-0.03	-0.01	0.00	-0.07	-0.03	-0.01
5	6	-0.07	0.07	-0.03	-0.03	-0.03	-0.01	-0.07	-0.08	-0.04
6	6	0.15	-0.07	0.05	-0.01	-0.05	-0.01	-0.02	-0.12	-0.02
7	6	0.14	-0.07	0.05	-0.01	-0.04	-0.01	-0.03	-0.10	-0.02
8	6	-0.04	0.04	0.01	-0.02	-0.03	-0.02	-0.07	-0.08	-0.05
9	6	-0.14	0.11	-0.02	-0.03	-0.02	-0.02	-0.07	-0.07	-0.05
10	6	0.07	-0.04	0.03	0.00	-0.03	0.00	-0.02	-0.09	0.00
11	6	0.15	-0.09	0.04	-0.01	-0.03	0.01	-0.03	-0.08	0.02
12	6	0.06	-0.03	0.00	-0.02	-0.01	0.02	-0.06	-0.03	0.05
13	6	-0.13	0.10	-0.06	-0.03	0.00	0.01	-0.07	0.01	0.03
14	6	-0.12	0.09	-0.06	-0.01	0.02	0.01	-0.02	0.07	0.04
15	6	0.09	-0.05	0.02	-0.01	-0.02	0.01	-0.02	-0.06	0.01
16	6	-0.08	0.07	-0.04	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00
17	6	0.02	-0.05	0.00	0.03	0.06	0.01	0.07	0.22	0.04
18	1	0.36	-0.26	0.12	0.01	-0.03	0.04	0.01	-0.06	0.11
19	1	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.05	-0.01
20	1	-0.11	0.11	-0.04	-0.03	-0.03	-0.01	-0.08	-0.09	-0.05
21	1	0.26	-0.15	0.09	0.01	-0.06	0.00	0.01	-0.13	-0.01
22	1	-0.13	0.11	-0.01	-0.03	-0.02	-0.02	-0.10	-0.05	-0.05
23	1	-0.34	0.24	-0.08	-0.04	-0.01	-0.03	-0.09	-0.04	-0.07
24	1	0.07	-0.06	0.03	0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.08	0.01
25	1	0.08	-0.07	0.00	-0.01	-0.01	0.02	-0.05	-0.02	0.05
26	1	-0.19	0.13	-0.07	-0.04	0.00	0.00	-0.07	-0.01	-0.01
27	6	-0.08	-0.05	0.02	0.09	0.09	-0.03	0.17	0.28	0.00
28	1	-0.12	-0.14	0.00	0.12	0.15	-0.03	0.22	0.37	0.01
29	1	-0.09	-0.03	0.03	0.10	0.11	-0.04	0.20	0.29	-0.01
30	1	-0.11	0.01	0.05	0.11	0.03	-0.08	0.20	0.18	-0.07
31	8	0.02	-0.02	0.00	0.03	0.06	0.01	0.08	0.22	0.04
32	47	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.02	0.03	-0.04	-0.02
33	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.08	0.06	0.03	-0.03	-0.03
34	6	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.09	-0.07	-0.03	0.03	0.02
36	6	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.03	0.02	0.01	-0.02	-0.01

37	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.01
38	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
39	6	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.07	-0.06	-0.03	0.03	0.02
41	6	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.01
42	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.06	0.05	0.02	-0.02	-0.02
43	6	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	0.16	-0.18	-0.15	-0.07	0.08	0.07
45	6	-0.01	0.01	0.01	0.14	-0.18	-0.14	-0.07	0.09	0.07
46	6	0.00	0.01	0.00	-0.03	0.03	0.02	0.01	-0.01	-0.01
47	6	0.01	-0.01	-0.01	-0.05	0.07	0.05	0.02	-0.03	-0.02
48	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.08	0.06	0.03	-0.04	-0.03
49	1	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.10	0.08	0.04	-0.04	-0.03
50	1	0.01	-0.02	-0.01	0.03	-0.04	-0.03	-0.01	0.02	0.01
51	1	0.00	0.00	0.00	0.17	-0.21	-0.16	-0.07	0.09	0.07
52	1	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	1	0.01	-0.01	-0.01	0.03	-0.03	-0.03	-0.02	0.02	0.01
54	1	-0.01	0.01	0.01	0.16	-0.17	-0.15	-0.06	0.07	0.05
55	1	-0.01	0.02	0.01	-0.02	0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.01
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.08	0.07	0.02	-0.02	-0.02
57	1	0.00	0.00	0.00	0.26	-0.29	-0.20	-0.11	0.13	0.09
58	1	-0.01	0.02	0.01	0.25	-0.30	-0.20	-0.11	0.14	0.09

25				26			27			
A				A			A			
Frequencies	--	348.8116		358.6663		412.1691				
Red. masses	--	5.5938		4.5751		4.0894				
Frc consts	--	0.4010		0.3468		0.4093				
IR Inten	--	0.7494		1.5783		0.3498				
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.03	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.03	0.05
2	6	0.02	0.06	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.04	0.01
3	6	0.09	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.02	-0.05
4	6	-0.02	-0.04	0.11	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.11	-0.01
5	6	-0.06	-0.06	0.08	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.12	0.03
6	6	-0.11	-0.05	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.06	-0.06
7	6	-0.06	-0.09	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.08	-0.01
8	6	0.05	-0.06	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.05	0.11
9	6	0.08	0.09	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.08
10	6	0.05	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.05	0.01
11	6	0.01	0.03	0.14	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.04	0.00
12	6	0.03	-0.03	0.10	0.00	0.00	0.00	0.17	-0.05	0.02
13	6	-0.06	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.14	-0.04
14	6	-0.12	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.10	-0.03
15	6	-0.06	-0.05	0.11	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.03
16	6	-0.08	-0.03	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03
17	6	0.06	-0.01	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.03	0.03
18	1	0.02	0.08	-0.19	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.05	0.05
19	1	0.21	0.15	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.25	0.03	-0.10
20	1	-0.09	-0.08	0.07	0.00	0.00	0.00	0.19	-0.17	0.06
21	1	-0.16	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.28	0.13	-0.15
22	1	0.08	-0.15	-0.22	0.00	0.00	0.00	0.24	-0.12	0.20
23	1	0.10	0.15	-0.20	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.02	0.09
24	1	0.09	0.30	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.29	0.08	-0.04
25	1	0.06	-0.12	0.11	0.00	0.00	0.00	0.30	-0.14	0.04
26	1	-0.07	0.03	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.17	-0.06
27	6	-0.06	-0.10	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02
28	1	-0.09	-0.19	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.09	-0.06
29	1	-0.10	-0.25	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.10	-0.01
30	1	-0.06	0.05	0.18	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.03	-0.05
31	8	0.22	0.10	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.04	0.04	-0.05
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.14	0.05	0.08	0.01	0.02	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.06	0.17	0.02	0.02	-0.01





33	6	0.17	0.13	-0.01	-0.06	0.09	0.06	0.01	0.00	0.00
34	6	0.21	0.20	-0.05	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	0.14	0.17	-0.05	0.07	-0.08	-0.07	0.00	0.01	0.00
36	6	0.09	0.13	-0.08	-0.06	0.07	0.04	0.01	0.00	0.00
37	6	-0.05	0.05	-0.14	-0.10	0.12	0.09	0.01	-0.01	-0.01
38	6	-0.09	0.05	-0.12	0.10	-0.11	-0.09	-0.01	0.01	0.00
39	6	-0.15	-0.09	-0.03	0.05	-0.07	-0.05	-0.01	0.00	0.00
40	6	-0.16	-0.15	0.00	-0.08	0.08	0.07	0.00	-0.01	-0.01
41	6	-0.20	-0.21	0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	-0.14	-0.15	0.05	0.07	-0.08	-0.06	-0.01	0.00	0.01
43	6	-0.08	-0.14	0.08	-0.06	0.07	0.06	0.00	-0.01	0.00
44	6	0.07	-0.07	0.13	-0.10	0.13	0.10	0.01	-0.01	-0.01
45	6	0.08	-0.03	0.14	0.10	-0.11	-0.08	0.00	0.01	0.01
46	6	0.14	0.10	0.05	0.06	-0.06	-0.06	0.00	0.01	0.01
47	6	-0.04	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
48	6	0.04	0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
49	1	0.12	0.09	-0.05	-0.16	0.22	0.16	0.01	-0.01	-0.01
50	1	0.21	0.20	-0.05	0.00	0.02	0.02	0.01	0.00	0.00
51	1	0.10	0.14	0.00	0.17	-0.21	-0.16	-0.01	0.02	0.01
52	1	-0.09	-0.05	-0.08	-0.19	0.22	0.17	0.01	-0.02	-0.01
53	1	0.01	0.11	-0.08	0.19	-0.21	-0.17	-0.01	0.02	0.01
54	1	-0.11	-0.13	0.01	-0.19	0.19	0.17	0.01	-0.02	-0.01
55	1	-0.20	-0.22	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
56	1	-0.12	-0.09	0.02	0.18	-0.19	-0.17	-0.01	0.01	0.01
57	1	0.13	0.01	0.06	-0.16	0.15	0.14	0.02	-0.01	-0.01
58	1	-0.01	-0.09	0.10	0.12	-0.19	-0.13	-0.01	0.01	0.01

		31			32			33		
		A			A			A		
Frequencies	--	464.0678			467.8462			484.5538		
Red. masses	--	6.7810			4.4839			5.6152		
Frc consts	--	0.8604			0.5782			0.7768		
IR Inten	--	0.3317			7.9230			0.7907		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.05	0.00	-0.03	-0.08	-0.05
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.09	0.00	0.09	-0.11	-0.01
3	6	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.05	0.10	-0.11	0.10	0.10
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.05	0.11	-0.09	0.02	0.18
5	6	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.04	0.01	-0.02	-0.06	0.20
6	6	0.00	0.00	0.00	0.08	0.00	-0.12	0.01	0.06	0.02
7	6	0.00	0.00	0.00	0.15	0.07	-0.07	0.03	0.15	-0.01
8	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.05	0.07	0.10	0.16	-0.04
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.05	0.07	0.09	0.01	-0.04
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.14	-0.02	-0.02	0.02	-0.15
11	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.14	0.00	-0.05	-0.08
12	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.07	-0.04	-0.03	-0.13	-0.17
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.13	-0.10	-0.15	-0.10
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.02	0.12	-0.06	-0.09	-0.05
15	6	0.00	0.00	0.00	0.05	0.08	-0.11	0.09	0.03	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.02	0.07	0.01	-0.04	0.13
17	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.02	-0.10	-0.07	0.03	0.02
18	1	0.00	0.00	0.00	-0.20	0.15	-0.02	0.27	-0.15	-0.06
19	1	0.00	0.00	0.00	0.19	-0.07	0.14	-0.12	0.28	0.08
20	1	0.00	0.00	0.00	-0.27	-0.11	-0.03	0.00	-0.20	0.22
21	1	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.07	-0.28	0.02	-0.01	-0.11
22	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.15	0.22	0.10	0.17	-0.03
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.21	-0.06	0.13	0.09	-0.09	0.08
24	1	0.00	-0.01	0.00	-0.03	-0.29	-0.01	-0.08	0.09	-0.17
25	1	0.00	0.01	0.00	0.08	0.25	-0.03	-0.01	-0.14	-0.16
26	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.22	-0.09	-0.13	-0.06
27	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.08	-0.03	0.05	0.07	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.15	0.00	0.13	0.22	0.02
29	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.16	-0.02	0.10	0.05	-0.03
30	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.06	0.13	-0.07	-0.07

31	8	0.00	0.00	0.00	0.13	0.06	-0.06	-0.01	0.07	0.07
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
33	6	-0.06	-0.13	0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	0.17	0.07	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	6	0.17	0.05	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	6	0.14	0.05	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	6	0.03	0.12	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
39	6	0.03	0.15	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.06	0.15	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	6	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	-0.15	-0.08	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	6	-0.17	-0.05	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	-0.16	-0.05	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	6	-0.04	-0.14	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	-0.02	-0.15	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	6	-0.06	0.05	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.07	-0.04	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	-0.14	-0.17	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	-0.08	0.06	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
51	1	0.21	0.13	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.08	-0.06	0.19	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
53	1	-0.10	0.04	-0.19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.13	0.20	-0.08	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
55	1	0.08	-0.05	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	-0.18	-0.15	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	1	-0.11	0.07	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.09	-0.08	0.17	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00

		34			35			36		
		A			A			A		
Frequencies	--	502.6422			504.9244			508.9025		
Red. masses	--	4.6792			3.8167			3.4785		
Frc consts	--	0.6965			0.5733			0.5308		
IR Inten	--	4.9349			1.6533			0.8347		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.07	-0.04	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.06	0.05	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.07	-0.08	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.02	-0.05	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.12	0.09	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.08	0.07	0.06	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.05	0.11	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.02	0.06	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.09	-0.01	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.10	0.02	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.04	-0.13	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.36	-0.24	0.16	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.08	-0.10	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.10	0.00	0.00	-0.01	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.01
22	1	0.00	0.00	0.00	-0.20	0.07	0.02	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.29	-0.24	0.12	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	-0.01	0.00	0.17	0.12	0.08	-0.01	0.00	0.00
26	1	0.00	0.00	0.00	0.05	0.06	0.16	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.09	0.00	0.00	0.00

29	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.27	-0.04	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.06	0.01	0.11	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	-0.03	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.08	-0.10
34	6	-0.03	0.06	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.13	0.08
35	6	-0.09	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.08	-0.07
36	6	-0.06	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.06	-0.01
37	6	0.04	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.02	0.04
38	6	0.04	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.01	0.00
39	6	-0.01	-0.06	0.04	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.04	-0.07
40	6	0.04	-0.09	0.12	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.08	-0.07
41	6	0.05	0.01	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.11	0.12
42	6	-0.03	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.09	-0.05
43	6	-0.08	0.02	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.04	-0.03
44	6	0.09	0.21	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.02
45	6	0.22	0.12	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.02
46	6	0.05	-0.07	0.14	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.03	-0.04
47	6	-0.14	-0.09	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.12	0.06
48	6	-0.10	-0.11	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.11	0.08
49	1	-0.18	-0.14	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.16	-0.16
50	1	-0.04	0.07	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.25	0.31	0.22
51	1	-0.09	-0.03	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.16	-0.13	-0.15
52	1	0.06	0.08	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.02	0.12
53	1	0.07	0.08	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.05	0.05
54	1	0.03	-0.11	0.10	0.00	0.00	0.00	0.17	-0.13	-0.11
55	1	0.02	0.03	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.28	0.25
56	1	-0.10	-0.19	0.09	0.00	0.00	0.00	0.17	-0.16	-0.11
57	1	0.21	0.35	-0.26	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.07	0.06
58	1	0.38	0.26	0.15	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.08	0.05

		37			38			39		
		A			A			A		
Frequencies	--	509.6651			515.6670			528.5683		
Red. masses	--	4.4454			4.8982			3.9900		
Frc consts	--	0.6804			0.7674			0.6568		
IR Inten	--	0.3209			1.6946			4.5543		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.02	0.03	0.00	-0.01
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.01	0.00	-0.02
3	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.03	-0.09	0.01	0.02	0.03
4	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.03	-0.06	0.08	-0.05	0.07
5	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.15	0.12	-0.14	0.04	-0.09
6	6	0.00	0.00	0.00	0.05	0.05	0.21	0.12	-0.11	-0.04
7	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.01	0.09	-0.02	0.04	-0.06
8	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	0.03	-0.03	0.01	-0.01
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.07	-0.02	0.00	-0.02	0.01
10	6	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.04	-0.17	-0.02	0.02	0.07
11	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.02	-0.16	-0.10	0.07	0.03
12	6	0.00	0.00	0.00	0.12	0.05	0.02	0.12	-0.11	0.01
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.09	0.11	-0.14	0.08	-0.08
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.12	0.08	0.05	0.00	-0.02
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.04	-0.15	-0.12	0.14	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.17	-0.06	0.19	-0.08	0.09
17	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01
18	1	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.07	-0.04	-0.05	0.06	-0.07
19	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.05	-0.12	-0.12	0.16	-0.02
20	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.31	0.11	-0.37	0.11	-0.16
21	1	0.00	0.00	0.00	0.13	0.03	0.31	0.26	-0.22	-0.02
22	1	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.16	-0.05	0.06	-0.02	0.06
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.05	0.03	0.13	-0.09	0.02
24	1	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.18	-0.17	0.13	-0.04	0.11
25	1	0.00	0.00	0.00	0.26	0.16	0.05	0.33	-0.32	0.05
26	1	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.19	0.21	-0.19	0.09	-0.11

27	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.01	-0.01	0.02	0.02
28	1	0.00	0.00	0.00	0.10	0.14	0.01	-0.01	0.00	0.03
29	1	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.01	-0.04	-0.02	-0.02	0.02
30	1	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.09	-0.06	-0.01	0.05	0.05
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	0.04	-0.02	-0.05	0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.06	-0.09	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	0.05	0.00	0.14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	0.03	-0.06	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	6	-0.05	0.03	-0.14	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01
37	6	0.10	0.19	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	-0.02
38	6	0.20	0.12	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	0.02
39	6	0.08	-0.05	0.12	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.01
40	6	-0.03	-0.02	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	6	-0.08	0.08	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	-0.07	0.00	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	6	-0.02	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01
44	6	-0.01	-0.04	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.03
45	6	-0.06	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03	-0.02
46	6	-0.03	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.01
47	6	-0.06	-0.06	0.09	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	-0.03
48	6	-0.11	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04	0.03
49	1	0.12	-0.08	0.12	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	-0.02
50	1	0.00	0.05	0.15	-0.01	0.01	0.01	0.02	-0.02	-0.01
51	1	-0.04	-0.21	0.13	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	-0.02
52	1	0.16	0.37	-0.21	-0.01	0.00	0.01	0.05	-0.06	-0.05
53	1	0.36	0.24	0.15	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.07	0.06
54	1	-0.16	-0.13	-0.14	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.02
55	1	-0.10	0.11	-0.04	0.00	0.01	0.01	-0.02	0.02	0.02
56	1	-0.03	0.02	-0.19	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.03	0.02
57	1	-0.05	-0.06	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.04	0.04
58	1	-0.11	-0.02	-0.03	0.00	0.01	0.00	0.04	-0.07	-0.05

		40			41			42		
		A			A			A		
Frequencies	--	528.9763			550.6264			558.2431		
Red. masses	--	3.9386			3.9120			6.7357		
Frc consts	--	0.6493			0.6988			1.2367		
IR Inten	--	1.8059			3.0706			3.9861		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.08	-0.05	0.01	0.01	0.00
2	6	0.00	0.00	-0.01	0.07	-0.01	-0.06	0.00	0.00	-0.01
3	6	0.00	0.01	0.01	0.03	0.07	0.01	0.00	-0.01	-0.02
4	6	0.02	-0.01	0.02	-0.07	0.07	0.03	-0.01	0.00	-0.01
5	6	-0.04	0.01	-0.03	0.04	-0.05	-0.03	-0.01	-0.01	0.00
6	6	0.03	-0.03	-0.01	-0.01	0.01	-0.11	0.00	-0.01	0.00
7	6	0.00	0.01	-0.02	-0.10	0.04	-0.10	-0.01	0.02	0.00
8	6	-0.01	0.00	0.00	0.05	-0.15	0.05	0.02	0.01	0.00
9	6	0.00	-0.01	0.00	-0.12	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.01	0.00	0.02	0.02	0.00	0.13	0.00	0.00	-0.01
11	6	-0.02	0.02	0.01	0.16	-0.02	0.06	0.00	-0.02	0.00
12	6	0.03	-0.03	0.00	0.01	0.08	-0.04	-0.01	-0.01	0.01
13	6	-0.04	0.02	-0.02	0.01	0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.01
14	6	0.01	0.00	-0.01	0.12	-0.15	0.02	0.01	0.00	0.01
15	6	-0.03	0.03	0.00	-0.06	0.05	-0.02	0.00	0.01	0.00
16	6	0.05	-0.02	0.02	-0.04	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.05	-0.05	0.00	0.01	-0.01
18	1	-0.01	0.02	-0.02	0.11	0.04	-0.14	0.00	-0.01	0.01
19	1	-0.03	0.04	0.00	0.09	0.13	0.03	0.01	-0.01	-0.01
20	1	-0.09	0.02	-0.04	0.15	-0.26	0.01	0.01	-0.01	0.01
21	1	0.06	-0.06	-0.01	0.10	-0.07	-0.08	0.01	-0.02	0.00
22	1	0.01	-0.01	0.02	0.25	-0.27	0.16	0.03	0.00	0.01
23	1	0.03	-0.02	0.00	-0.19	0.16	-0.09	-0.01	0.00	0.01
24	1	0.03	-0.01	0.03	-0.02	-0.01	0.11	-0.01	0.01	-0.01

25	1	0.08	-0.08	0.01	-0.22	0.21	-0.08	-0.02	0.01	0.01
26	1	-0.05	0.03	-0.03	-0.17	0.18	0.06	-0.03	0.00	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00	0.01	0.01
28	1	0.00	0.00	0.01	0.14	0.23	0.12	-0.01	-0.01	0.02
29	1	0.00	-0.01	0.00	0.07	-0.19	-0.04	-0.01	-0.01	0.01
30	1	0.00	0.01	0.01	0.14	-0.07	0.03	-0.01	0.04	0.03
31	8	0.00	-0.01	0.00	-0.04	0.00	0.09	0.00	-0.02	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.17	0.16
34	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.02	0.06
35	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.21	0.08	0.10
36	6	0.05	-0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.08	0.15	-0.01
37	6	-0.09	0.11	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.06	-0.16
38	6	0.09	-0.11	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.05	-0.16
39	6	-0.05	0.06	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.08	0.03
40	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.19	0.15
41	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	0.06
42	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.19	0.10	0.12
43	6	-0.05	0.06	0.04	0.00	0.00	0.00	0.13	0.09	-0.07
44	6	0.12	-0.12	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.06	-0.16
45	6	-0.10	0.13	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.06	-0.16
46	6	0.05	-0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.14	-0.03
47	6	-0.12	0.13	0.11	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.04
48	6	0.11	-0.14	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.04
49	1	-0.11	0.11	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.12	0.20
50	1	-0.07	0.08	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.05	-0.17
51	1	-0.10	0.13	0.08	0.00	0.00	0.00	0.23	0.03	0.08
52	1	-0.21	0.24	0.20	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.11	-0.13
53	1	0.21	-0.25	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.08	0.06	-0.16
54	1	0.11	-0.11	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.21	0.13
55	1	0.08	-0.08	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.05	-0.17
56	1	0.09	-0.12	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.15	0.13	0.16
57	1	0.22	-0.19	-0.17	0.00	0.01	0.00	-0.19	0.01	-0.05
58	1	-0.18	0.27	0.17	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.18	-0.08

43

44

45

		A			A			A		
Frequencies --		563.1443			566.8821			576.6329		
Red. masses --		5.1531			3.2898			5.0524		
Frc consts --		0.9629			0.6229			0.9898		
IR Inten --		7.4585			0.1862			13.1153		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	-0.13	0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.08	-0.06	0.06
2	6	-0.03	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.07	0.12
3	6	-0.04	0.08	0.16	0.00	0.01	0.01	-0.08	-0.10	0.04
4	6	0.10	0.02	0.11	0.01	0.00	0.01	0.05	0.03	-0.12
5	6	0.04	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.10	0.10	-0.14
6	6	0.02	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.08	0.08	-0.05
7	6	0.04	-0.17	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.09	-0.02
8	6	-0.15	-0.14	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.09	0.07	-0.01
9	6	-0.01	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.03
10	6	0.01	0.02	0.09	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.03
11	6	-0.03	0.14	-0.04	0.00	0.01	-0.01	-0.04	-0.06	0.12
12	6	0.10	0.08	-0.14	0.01	0.01	-0.01	-0.11	-0.10	0.12
13	6	0.10	0.07	-0.11	0.01	0.01	-0.01	-0.08	-0.06	0.02
14	6	-0.11	0.00	-0.10	-0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.03	0.02
15	6	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.05	0.04
16	6	-0.04	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.05	0.01	-0.04
17	6	-0.04	-0.10	0.08	0.00	-0.01	0.01	-0.12	-0.03	-0.09
18	1	0.02	0.09	-0.07	0.00	0.01	-0.01	-0.12	-0.07	0.12
19	1	-0.13	0.13	0.13	0.00	0.01	0.01	-0.18	-0.25	0.02
20	1	-0.14	0.09	-0.07	-0.01	0.00	0.00	0.15	0.14	-0.13
21	1	-0.14	0.20	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.14	0.07	0.03
22	1	-0.27	-0.07	-0.08	-0.02	-0.01	-0.01	0.16	0.04	0.04

23	1	0.08	0.02	-0.09	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.04	0.00
24	1	0.05	-0.08	0.11	0.00	-0.01	0.00	0.09	0.12	0.05
25	1	0.21	-0.06	-0.12	0.02	0.00	-0.01	-0.17	-0.14	0.11
26	1	0.23	0.06	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.13	-0.08	-0.07
27	6	0.04	-0.07	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.14	-0.11
28	1	0.11	0.10	-0.13	0.00	0.00	-0.01	0.16	0.10	0.01
29	1	0.10	0.10	-0.09	0.00	0.02	0.00	0.09	-0.34	-0.17
30	1	0.08	-0.31	-0.27	0.00	-0.01	-0.02	0.15	-0.27	-0.11
31	8	0.03	0.19	0.03	0.00	0.01	0.00	0.13	0.19	0.05
32	47	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
33	6	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	0.01	0.01	0.01	0.03	-0.04	-0.04	0.00	0.00	0.00
36	6	0.01	0.00	-0.01	-0.11	0.12	0.13	0.00	0.01	0.00
37	6	-0.01	0.01	-0.02	0.03	-0.02	0.04	0.00	0.00	0.00
38	6	-0.01	0.01	-0.02	0.03	-0.03	0.04	0.00	0.00	0.00
39	6	0.00	-0.02	-0.01	-0.10	0.13	0.13	0.00	0.00	0.00
40	6	-0.01	-0.01	0.02	0.03	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00
41	6	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
42	6	0.02	0.01	0.01	-0.07	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
43	6	0.00	0.02	0.01	0.09	-0.15	-0.12	0.00	0.00	0.00
44	6	-0.01	0.01	-0.01	-0.03	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00
45	6	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
46	6	-0.02	0.00	0.01	0.13	-0.12	-0.13	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	-0.03	0.00	-0.11	0.21	0.11	-0.01	0.01	0.01
50	1	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00
51	1	0.00	0.02	0.02	0.16	-0.18	-0.17	0.01	0.00	0.00
52	1	-0.03	0.01	0.00	0.24	-0.24	-0.15	0.01	-0.01	-0.01
53	1	-0.02	0.04	0.00	0.21	-0.26	-0.15	0.01	-0.01	0.00
54	1	-0.02	0.01	0.03	0.13	-0.17	-0.15	0.01	-0.01	-0.01
55	1	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
56	1	0.03	0.00	0.00	-0.20	0.15	0.13	0.00	0.00	0.00
57	1	0.00	-0.02	-0.01	-0.20	0.22	0.11	-0.01	0.01	0.01
58	1	0.02	-0.01	-0.02	-0.21	0.23	0.11	-0.01	0.01	0.01

46

47

48

		A			A			A		
Frequencies	--	585.5638			586.8029			596.5699		
Red. masses	--	3.2183			6.1341			3.0989		
Frc consts	--	0.6502			1.2445			0.6498		
IR Inten	--	4.1477			0.5377			0.6348		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.12	-0.06	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.10	0.07	-0.09	0.02	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
4	6	0.11	-0.09	0.02	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.05	-0.05	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.06	0.04	-0.04	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
7	6	0.12	-0.06	0.03	-0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
8	6	0.07	-0.01	0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.10	0.07	-0.03	0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	0.11	-0.08	0.03	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.13	0.07	-0.03	0.03	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.04	0.02	0.04	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
13	6	0.03	-0.05	0.06	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.07	0.05	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	-0.06	0.05	-0.02	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
16	6	0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.05	0.05	-0.07	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
18	1	0.18	-0.14	0.06	-0.04	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.30	0.22	-0.17	0.07	-0.05	0.04	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.09	0.05	-0.04	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00

21	1	-0.32	0.21	-0.14	0.07	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.00
22	1	0.08	-0.01	0.04	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.22	0.14	-0.04	0.05	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
24	1	0.34	-0.24	0.09	-0.08	0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00
25	1	0.11	-0.04	0.07	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
26	1	0.19	-0.14	0.07	-0.04	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
27	6	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.03	0.06	0.09	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	-0.17	-0.01	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.04	0.05	0.10	-0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
31	8	-0.01	-0.04	0.03	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.01	0.01	-0.01	0.06	0.09	-0.06	-0.08	0.10	0.07
34	6	0.01	0.01	0.00	0.06	0.05	-0.01	0.09	-0.11	-0.09
35	6	0.01	0.01	0.01	0.10	0.08	0.05	-0.08	0.09	0.07
36	6	0.02	0.00	0.01	0.14	-0.03	0.08	0.02	-0.02	-0.01
37	6	0.01	-0.01	0.02	0.12	-0.06	0.20	0.04	-0.04	-0.03
38	6	0.01	-0.01	0.03	0.09	-0.09	0.21	-0.04	0.04	0.03
39	6	0.01	-0.01	0.01	0.05	-0.12	0.10	-0.02	0.03	0.02
40	6	-0.01	-0.01	0.01	-0.07	-0.09	0.07	0.08	-0.09	-0.08
41	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.06	-0.06	0.01	-0.10	0.11	0.09
42	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.10	-0.08	-0.04	0.08	-0.09	-0.07
43	6	-0.02	0.00	-0.01	-0.14	0.04	-0.08	-0.01	0.01	0.01
44	6	-0.02	0.01	-0.03	-0.13	0.05	-0.22	-0.05	0.05	0.04
45	6	-0.01	0.01	-0.03	-0.09	0.08	-0.23	0.04	-0.06	-0.04
46	6	-0.01	0.01	-0.01	-0.06	0.12	-0.10	0.01	-0.02	-0.01
47	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.03	0.01	-0.06	0.07	0.06
48	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.04	0.00	0.06	-0.07	-0.06
49	1	0.02	0.01	-0.01	0.18	0.10	-0.07	-0.20	0.25	0.19
50	1	0.01	0.01	0.00	0.07	0.05	-0.03	0.18	-0.22	-0.17
51	1	0.02	0.02	0.00	0.11	0.20	0.03	-0.20	0.25	0.19
52	1	0.01	0.00	0.03	0.08	0.02	0.26	0.06	-0.08	-0.06
53	1	0.01	-0.01	0.03	0.03	-0.03	0.26	-0.06	0.06	0.05
54	1	-0.02	-0.01	0.01	-0.18	-0.11	0.07	0.22	-0.24	-0.20
55	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.06	-0.07	0.00	-0.19	0.22	0.18
56	1	-0.01	-0.02	0.00	-0.10	-0.19	-0.02	0.20	-0.22	-0.18
57	1	-0.01	0.00	-0.03	-0.10	0.00	-0.24	-0.07	0.06	0.06
58	1	0.00	0.01	-0.03	-0.04	0.05	-0.25	0.04	-0.08	-0.05

49

50

51

		A			A			A		
Frequencies	--	607.6302			650.1951			686.0461		
Red. masses	--	4.6695			3.2881			4.8934		
Frc consts	--	1.0158			0.8190			1.3570		
IR Inten	--	4.2728			12.8942			12.3293		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	0.12	0.08	0.19	-0.13	0.09	-0.02	0.01	0.01
2	6	-0.03	0.01	0.19	-0.03	0.04	-0.01	-0.09	-0.08	0.06
3	6	-0.09	0.00	0.15	0.04	-0.02	0.01	-0.09	-0.08	0.07
4	6	-0.02	0.01	0.04	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.01
5	6	-0.04	-0.01	0.08	0.01	-0.01	0.01	0.09	0.10	-0.02
6	6	-0.08	-0.06	0.13	-0.02	-0.01	0.01	0.10	0.15	-0.06
7	6	-0.12	-0.01	0.05	0.10	-0.07	0.04	0.00	-0.06	-0.05
8	6	0.03	-0.07	-0.02	-0.06	0.05	-0.02	-0.07	-0.09	0.02
9	6	-0.06	-0.01	-0.07	0.07	-0.05	0.02	0.05	0.10	0.06
10	6	0.03	-0.07	-0.08	-0.05	0.03	-0.02	0.05	0.10	0.10
11	6	0.03	-0.04	-0.05	-0.02	0.01	-0.01	0.02	0.07	0.00
12	6	0.01	0.03	-0.11	0.05	-0.03	0.01	0.01	-0.05	-0.13
13	6	0.11	0.06	-0.16	-0.05	0.05	-0.03	-0.11	-0.13	0.01
14	6	0.14	0.08	-0.04	0.03	0.01	0.01	-0.06	-0.11	0.04
15	6	-0.04	0.01	0.00	0.03	-0.01	0.01	-0.02	-0.05	-0.04
16	6	0.11	0.02	0.01	-0.12	0.11	-0.04	-0.07	-0.08	0.01
17	6	-0.01	0.07	-0.17	-0.14	0.11	-0.15	0.11	0.09	-0.10
18	1	-0.01	-0.05	0.26	-0.29	0.21	-0.10	-0.11	-0.11	0.11



19	1	-0.15	-0.07	0.14	-0.01	0.02	-0.01	-0.10	-0.20	0.08
20	1	0.04	0.02	0.10	-0.04	0.03	-0.01	0.09	0.06	-0.02
21	1	-0.02	-0.09	0.19	-0.14	0.08	-0.03	0.09	0.21	0.03
22	1	0.15	-0.19	-0.04	-0.27	0.19	-0.09	-0.09	-0.11	-0.05
23	1	-0.10	0.00	-0.06	0.07	-0.06	0.02	0.13	0.17	-0.08
24	1	0.05	-0.11	-0.07	-0.13	0.09	-0.05	0.05	0.07	0.10
25	1	-0.11	0.04	-0.14	0.16	-0.11	0.03	0.03	-0.06	-0.12
26	1	0.02	0.08	-0.25	0.00	0.01	-0.05	-0.07	-0.10	0.11
27	6	-0.03	-0.05	-0.03	-0.01	0.03	-0.01	0.02	0.18	0.08
28	1	-0.03	-0.12	0.13	0.13	0.23	0.25	-0.09	-0.06	0.11
29	1	-0.07	-0.42	-0.04	0.04	-0.48	-0.08	-0.08	0.03	0.12
30	1	0.01	0.17	0.24	0.15	0.07	0.20	-0.06	0.47	0.30
31	8	0.10	-0.05	-0.04	-0.01	-0.06	0.07	0.08	-0.13	-0.10
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
51	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		52			53			54		
		A			A			A		
Frequencies	--	703.4705			705.9848			707.9067		
Red. masses	--	6.2662			6.9822			4.4429		
Frc consts	--	1.8270			2.0504			1.3118		
IR Inten	--	0.7273			1.2594			0.7999		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.11	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.12	0.28	0.20	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.10	0.12	-0.04	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.07	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.13	-0.18	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.20	-0.04	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.12	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.10	0.24	0.19	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.07	0.09	-0.02	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.10	-0.16	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.15	-0.04	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.05	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.07	-0.05	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.08	-0.06	0.00	0.00	0.00

17	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	-0.01	0.13	0.26	0.22	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.15	-0.17	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.21	-0.06	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.08	0.24	0.22	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.03	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.16	0.00	0.00	0.00
26	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.17	-0.02	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.05	-0.03	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.10	-0.04	0.00	0.01	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.10	0.03	0.04	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.03
34	6	0.21	0.21	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.09	0.08	-0.02
35	6	0.02	0.07	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.03
36	6	0.02	-0.06	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.13	0.08
37	6	-0.19	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.12	-0.08
38	6	-0.04	-0.18	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.02	0.10
39	6	-0.05	0.04	0.12	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.14	-0.08
40	6	0.09	0.03	0.06	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01	0.02
41	6	0.21	0.21	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.08	0.09	-0.01
42	6	0.02	0.09	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.04
43	6	0.04	-0.07	-0.12	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.15	0.10
44	6	-0.20	-0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.12	-0.08
45	6	-0.05	-0.18	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.04	0.09
46	6	-0.05	0.06	0.12	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.16	-0.09
47	6	-0.07	-0.06	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	-0.01
48	6	-0.06	-0.07	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.02
49	1	0.06	-0.13	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.17	0.14
50	1	0.21	0.22	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.10	0.07	-0.04
51	1	-0.11	0.05	0.07	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.16	-0.12
52	1	-0.25	0.04	0.05	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.25	-0.18
53	1	0.03	-0.26	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.22	0.15	0.20
54	1	0.04	-0.12	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.14	0.13
55	1	0.21	0.21	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.07	0.10	0.00
56	1	-0.12	0.09	0.10	0.00	0.00	0.00	0.16	-0.21	-0.15
57	1	-0.22	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.20	-0.12
58	1	0.00	-0.24	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.20	0.15	0.16

		55			56			57		
		A			A			A		
Frequencies	--	723.0642			751.1511			757.6209		
Red. masses	--	3.6715			5.2460			2.4878		
Frc consts	--	1.1310			1.7440			0.8413		
IR Inten	--	9.9524			0.1471			62.6253		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.04	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.19	-0.13	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.08	0.06	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.10	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.11	0.08	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.03	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.18	-0.11	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.09	0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.10	-0.08	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.18	0.11	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

15	6	-0.03	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.06	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.01	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.15	0.12	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.37	0.25	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.30	0.19	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.18	-0.11	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.07	-0.07	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.02	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.28	0.19	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.28	0.17	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
26	1	0.18	-0.13	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
27	6	0.00	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.01	0.04	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.02	0.05	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.09	0.14	-0.10	0.02	-0.03	-0.02
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.06	0.06	0.05
35	6	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.11	-0.04	0.03	-0.03	-0.02
36	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.06	0.07	-0.05	0.08	0.06
37	6	0.00	0.00	0.00	0.18	0.08	0.09	-0.02	0.01	0.01
38	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.16	-0.12	-0.01	0.01	0.01
39	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.04	-0.04	-0.06	0.07	0.06
40	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.16	0.09	0.03	-0.03	-0.02
41	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.02	-0.05	0.07	0.05
42	6	0.00	0.00	0.00	0.16	0.10	0.05	0.02	-0.03	-0.03
43	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.09	-0.05	-0.08	0.08	0.06
44	6	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.08	-0.10	0.00	0.01	0.00
45	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.14	0.14	0.00	0.01	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.08	0.04	0.04	-0.07	0.09	0.06
47	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.05	0.09	-0.10	-0.08
48	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.04	0.09	-0.10	-0.09
49	1	0.00	0.00	0.00	0.14	0.15	-0.10	0.23	-0.29	-0.22
50	1	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.11	0.29	0.06	-0.08	-0.07
51	1	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.15	-0.04	0.22	-0.24	-0.19
52	1	0.00	0.00	0.00	0.18	0.04	0.08	0.12	-0.16	-0.12
53	1	0.00	0.00	0.00	0.05	0.14	-0.14	0.13	-0.15	-0.12
54	1	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.18	0.07	0.22	-0.25	-0.20
55	1	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.09	-0.29	0.08	-0.08	-0.06
56	1	0.00	0.00	0.00	0.19	0.12	0.02	0.25	-0.29	-0.23
57	1	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.11	-0.15	0.10	-0.09	-0.06
58	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.11	0.16	0.09	-0.11	-0.07

		58			59			60		
		A			A			A		
Frequencies	--	767.9197			776.4778			808.3711		
Red. masses	--	2.8934			5.2612			1.2423		
Frc consts	--	1.0053			1.8689			0.4783		
IR Inten	--	34.6772			2.8363			10.0890		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.11	-0.07	0.06	-0.01	-0.12	-0.09	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.04	0.04	-0.02	-0.05	-0.11	-0.09	0.00	0.00	0.00
3	6	0.07	-0.05	-0.02	-0.04	0.05	0.27	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.08	0.03	-0.03	0.04	0.11	0.04	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.04	0.03	0.03	0.06	-0.01	-0.23	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.03	-0.01	-0.06	-0.09	-0.04	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.10	0.08	-0.05	-0.06	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00
8	6	0.03	-0.04	0.00	0.04	0.08	0.09	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.08	0.04	-0.04	0.01	0.10	0.09	0.00	0.00	0.00
10	6	0.04	-0.02	0.04	0.03	-0.06	-0.19	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.08	0.07	-0.02	-0.06	-0.05	-0.06	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.03	0.02	-0.02	-0.02	0.05	0.17	0.00	0.00	0.00

13	6	0.00	-0.01	0.00	0.06	0.09	0.04	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.13	0.10	-0.03	-0.04	-0.02	-0.08	0.00	0.00	0.00
15	6	0.17	-0.11	0.05	0.00	-0.09	0.02	0.00	0.00	0.00
16	6	0.07	-0.06	0.03	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.03	0.01	-0.02	0.02	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.20	0.14	-0.04	0.00	0.08	-0.34	0.00	0.00	0.00
19	1	0.07	-0.05	-0.02	-0.04	0.17	0.27	0.00	0.00	0.00
20	1	0.24	-0.17	0.13	0.12	-0.10	-0.21	0.01	-0.01	0.00
21	1	0.29	-0.18	0.07	0.01	-0.08	0.09	0.01	-0.01	0.00
22	1	0.31	-0.22	0.10	0.11	0.00	0.05	-0.03	0.02	-0.01
23	1	0.09	-0.05	-0.02	-0.05	-0.03	0.30	-0.03	0.02	-0.01
24	1	0.29	-0.18	0.11	0.04	-0.23	-0.19	-0.03	0.02	-0.01
25	1	0.23	-0.16	0.03	0.08	0.04	0.19	0.02	-0.01	0.00
26	1	0.32	-0.19	0.03	0.09	0.05	0.02	0.02	-0.01	0.00
27	6	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.11	0.06	0.00	0.00	0.00
28	1	0.03	0.06	0.05	-0.01	0.07	0.04	0.00	0.00	0.00
29	1	0.01	-0.11	-0.03	0.00	0.11	0.07	0.00	0.00	0.00
30	1	0.03	-0.01	0.02	-0.01	0.16	0.08	0.00	0.00	0.00
31	8	-0.01	-0.01	0.02	0.03	-0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03	-0.03
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.01
35	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	-0.02
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01
37	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.02
38	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.03
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	-0.03
41	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	-0.02
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.04	-0.03
43	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.02
44	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.01
45	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.01
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.02
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	-0.02
49	1	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.14	0.11
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.21	0.16
51	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.16	0.12
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.20	-0.23	-0.19
53	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.21	-0.23	-0.18
54	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.21	0.17
55	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.24	0.26	0.21
56	1	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.19	0.16
57	1	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.19	-0.16	-0.12
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.19	-0.10

		61			62			63		
		A			A			A		
Frequencies	--	813.7265			816.5442			819.5686		
Red. masses	--	1.2538			5.8653			1.4374		
Frc consts	--	0.4892			2.3041			0.5689		
IR Inten	--	7.6614			0.3035			0.3799		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.04	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.04	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.05	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.05	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

11	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.04	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.05	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.07	-0.05	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	0.08	-0.06	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.24	0.16	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.22	0.15	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.36	-0.25	0.11	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.43	-0.29	0.13	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.36	-0.24	0.11	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.20	0.12	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	-0.17	0.09	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.11	-0.17	0.03	-0.03	-0.02
34	6	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.19	0.03	0.04	-0.04	-0.03
35	6	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.01	0.16	0.02	-0.03	-0.03
36	6	0.00	0.00	0.00	0.10	0.04	0.04	0.01	-0.02	-0.01
37	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.02	-0.09	-0.01	0.01	0.02
38	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.04	-0.10	0.00	0.00	-0.01
39	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.09	0.06	-0.02	0.02	0.01
40	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.11	0.18	-0.01	0.01	0.02
41	6	0.00	0.00	0.00	0.19	0.20	-0.03	-0.03	0.04	0.03
42	6	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.01	-0.16	-0.02	0.02	0.02
43	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.05	-0.05	-0.01	0.01	0.01
44	6	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.02	0.10	0.01	0.00	0.00
45	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.04	0.09	-0.01	0.01	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.08	-0.08	0.00	-0.01	-0.01
47	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.05	0.01	0.06	-0.07	-0.06
48	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.06	0.00	-0.06	0.07	0.06
49	1	-0.01	0.01	0.00	0.14	0.23	-0.08	-0.23	0.28	0.22
50	1	-0.01	0.01	0.01	-0.20	-0.18	0.04	-0.25	0.32	0.24
51	1	-0.01	0.01	0.01	0.22	0.17	0.04	-0.23	0.27	0.21
52	1	0.02	-0.02	-0.01	-0.13	-0.07	0.01	0.04	-0.04	-0.02
53	1	0.02	-0.02	-0.01	0.06	0.13	-0.04	0.02	-0.04	-0.04
54	1	-0.02	0.02	0.01	-0.14	-0.23	0.09	0.19	-0.21	-0.17
55	1	-0.02	0.02	0.02	0.20	0.19	-0.05	0.21	-0.23	-0.19
56	1	-0.01	0.01	0.01	-0.22	-0.17	-0.03	0.21	-0.22	-0.19
57	1	0.01	0.00	0.00	0.10	0.10	0.04	-0.01	0.00	0.01
58	1	0.01	-0.01	0.00	-0.10	-0.11	0.05	0.03	-0.06	-0.04

		64			65			66		
		A			A			A		
Frequencies	--	832.1216			834.0589			851.2422		
Red. masses	--	4.6552			4.7425			1.5756		
Frc consts	--	1.8992			1.9438			0.6727		
IR Inten	--	4.7754			4.0394			5.7315		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.03	0.07	-0.01	0.01
2	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.06	0.04	-0.08	0.01	-0.07
3	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.02	-0.05	0.03	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.04	0.05	-0.02	0.02	0.01
5	6	0.00	0.00	-0.01	-0.07	-0.04	0.19	0.05	-0.02	0.00
6	6	-0.01	-0.01	0.01	0.14	0.14	-0.15	0.04	-0.03	0.02
7	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.02	-0.08	-0.04	0.00	-0.01
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.05	0.07	-0.02	-0.03	0.01

9	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.12	0.10	0.02	0.01	0.02
10	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03	-0.08	0.03	-0.01	-0.02
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.07	0.02	0.04	-0.02	-0.01
12	6	0.00	0.00	-0.01	-0.09	-0.05	0.22	-0.04	0.02	-0.02
13	6	0.00	-0.01	0.01	0.12	0.11	-0.13	-0.03	-0.02	0.02
14	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03	-0.07	-0.02	0.06	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.10	-0.10	-0.02	0.03	-0.01
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.12	-0.07	0.07	-0.01	0.04
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01
18	1	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.10	0.31	-0.29	0.10
19	1	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.04	0.03	0.50	-0.29	0.20
20	1	0.01	0.01	-0.01	-0.25	-0.25	0.15	-0.29	0.21	-0.12
21	1	0.00	0.00	0.01	0.10	0.08	-0.36	-0.23	0.17	-0.04
22	1	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.05	0.00	-0.01	-0.06	-0.01
23	1	0.00	0.00	0.00	0.06	0.13	0.10	-0.08	0.10	-0.03
24	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.08	-0.18	0.09	-0.08
25	1	0.01	0.01	-0.01	-0.21	-0.24	0.19	0.15	-0.05	0.02
26	1	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.04	-0.39	0.18	-0.14	0.04
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.02	0.03	0.04
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.01	-0.10	-0.03
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.03	-0.03	0.01
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.02
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.03	-0.01	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	0.09	0.09	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	-0.03	0.02	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	6	0.01	-0.06	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	6	0.14	-0.02	0.18	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
38	6	-0.06	0.11	-0.19	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
39	6	-0.07	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.03	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	6	0.09	0.08	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	-0.02	0.02	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	6	0.01	-0.04	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	0.14	-0.03	0.17	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
45	6	-0.06	0.11	-0.19	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
46	6	-0.06	0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	6	-0.11	-0.10	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	-0.10	-0.12	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.04	-0.07	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.12	0.06	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
51	1	-0.03	-0.02	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.07	-0.23	0.30	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01
53	1	-0.24	-0.03	-0.30	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01
54	1	-0.03	0.01	0.08	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01
55	1	0.03	0.15	0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
56	1	-0.07	0.05	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
57	1	-0.06	-0.14	0.37	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.01	-0.01
58	1	-0.22	-0.06	-0.31	-0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00

67

68

69

Frequencies	--	856.3519			874.8217			878.4256		
Red. masses	--	4.6440			1.4049			2.3952		
Frc consts	--	2.0065			0.6335			1.0889		
IR Inten	--	2.4233			3.9496			4.2973		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	0.17	-0.05	-0.02	0.01	-0.01	0.06	-0.03	0.02
2	6	0.01	-0.16	-0.10	0.01	0.00	0.01	-0.02	-0.01	-0.03
3	6	-0.01	-0.05	0.04	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.02	0.01
4	6	0.02	-0.02	0.07	0.02	-0.01	0.00	-0.07	0.05	-0.02
5	6	-0.02	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01
6	6	0.01	0.04	-0.02	0.01	-0.01	0.00	-0.05	0.03	-0.01

7	6	-0.04	-0.07	-0.02	-0.02	0.02	-0.01	0.09	-0.07	0.03
8	6	-0.13	-0.16	0.06	0.01	0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.00
9	6	0.05	0.14	0.08	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01
10	6	0.04	0.04	-0.10	0.01	-0.01	0.01	-0.04	0.04	-0.02
11	6	0.00	0.00	-0.09	-0.01	0.00	0.00	0.05	-0.03	0.00
12	6	-0.03	-0.05	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.04	-0.03	0.00
13	6	-0.12	-0.08	0.07	-0.02	0.02	-0.01	0.05	-0.06	0.02
14	6	0.15	0.11	0.06	0.04	-0.04	0.00	-0.12	0.10	-0.02
15	6	0.08	0.00	-0.01	0.03	-0.03	0.01	-0.10	0.09	-0.03
16	6	0.00	0.18	0.02	-0.04	0.02	-0.02	0.13	-0.07	0.06
17	6	0.00	0.05	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
18	1	-0.26	-0.01	-0.14	0.01	0.00	0.01	-0.09	0.03	-0.05
19	1	-0.27	0.35	-0.08	-0.03	0.01	-0.01	0.04	0.00	0.01
20	1	0.12	-0.12	0.04	-0.08	0.05	-0.02	0.26	-0.16	0.07
21	1	0.17	-0.03	0.10	-0.02	0.01	-0.02	0.04	-0.02	0.04
22	1	-0.09	-0.27	-0.08	0.05	-0.02	0.02	-0.10	0.04	-0.04
23	1	0.20	0.11	0.02	-0.03	0.01	-0.01	0.15	-0.08	0.04
24	1	0.06	-0.16	-0.09	-0.04	0.03	-0.01	0.16	-0.12	0.04
25	1	0.09	0.06	0.03	0.14	-0.10	0.03	-0.43	0.32	-0.09
26	1	-0.04	-0.19	-0.04	0.11	-0.04	0.02	-0.32	0.13	-0.05
27	6	-0.01	-0.14	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01
28	1	-0.01	-0.16	-0.08	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.02
29	1	-0.01	-0.11	-0.07	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.05	-0.02
30	1	-0.02	-0.17	-0.10	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
31	8	-0.06	0.03	0.06	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03	-0.01	0.01	-0.02	-0.01
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.03	-0.02	0.02	0.02
37	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.04	-0.03	0.02	-0.02	-0.02
38	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.04	-0.04	0.02	-0.02	-0.02
39	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.02	-0.02	0.02	0.01
40	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	-0.01
43	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04	0.03	-0.02	0.02	0.01
45	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.04	0.02	-0.02	0.02	0.01
46	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.01
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01
49	1	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.14	0.11	-0.07	0.08	0.06
50	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04	0.02	-0.02	0.03	0.02
51	1	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.11	-0.08	0.04	-0.05	-0.04
52	1	-0.01	0.01	0.00	-0.21	0.25	0.21	-0.11	0.13	0.11
53	1	0.00	0.01	0.01	-0.23	0.25	0.20	-0.12	0.14	0.11
54	1	0.01	-0.01	-0.01	0.10	-0.11	-0.09	0.05	-0.05	-0.04
55	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.02	-0.02	0.02	0.02
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.13	0.11	-0.07	0.08	0.06
57	1	0.01	-0.01	-0.01	0.35	-0.28	-0.21	0.16	-0.13	-0.10
58	1	0.01	-0.01	0.00	0.21	-0.34	-0.19	0.12	-0.18	-0.10
			70			71			72	
			A			A			A	
Frequencies	--		886.1056			901.4102			914.7477	
Red. masses	--		4.0957			1.7609			1.6395	
Frc consts	--		1.8947			0.8430			0.8083	
IR Inten	--		0.3103			4.5484			224.3868	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.03	0.03	-0.01	0.01	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.04	0.03	-0.01	0.01	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.06	-0.04	0.02	-0.01	0.01

5	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.03	0.02	-0.01	0.01	-0.01
6	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.03	0.01	0.01	-0.01	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.05	0.02	0.01	-0.01	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.05	-0.03	-0.01	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.01	-0.01	0.00	-0.34	0.27	-0.13	0.08	-0.06	0.03
19	1	0.00	0.00	0.00	-0.25	0.16	-0.09	0.04	-0.03	0.02
20	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.06	-0.02	0.08	-0.05	0.03
21	1	0.00	0.00	0.00	-0.30	0.20	-0.10	0.08	-0.06	0.03
22	1	0.00	0.00	0.00	0.21	-0.14	0.07	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.20	-0.14	0.05	0.05	-0.04	0.02
24	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.05	-0.01	0.04	-0.03	0.01
25	1	0.00	0.00	0.00	0.31	-0.21	0.06	0.01	-0.01	0.00
26	1	0.00	0.00	0.00	0.39	-0.20	0.07	0.03	-0.01	0.01
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.03	0.00	0.01	0.01
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.01	0.00	-0.01	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.05	-0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.03
34	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.02
35	6	0.04	-0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	0.02
36	6	-0.10	0.12	0.10	0.00	-0.01	0.00	0.05	-0.06	-0.04
37	6	0.03	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04	0.04
38	6	-0.03	0.04	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.03	0.04	0.03
39	6	0.11	-0.13	-0.11	0.00	-0.01	0.00	0.04	-0.05	-0.04
40	6	-0.04	0.05	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.02
41	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.02
42	6	-0.06	0.06	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	0.02
43	6	0.10	-0.11	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.05	-0.04
44	6	-0.02	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.05	0.03
45	6	0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.05	0.03
46	6	-0.09	0.11	0.08	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.06	-0.05
47	6	-0.13	0.15	0.13	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.02
48	6	0.13	-0.15	-0.12	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.02
49	1	-0.12	0.15	0.12	0.02	-0.02	-0.01	0.08	-0.11	-0.08
50	1	-0.23	0.29	0.22	0.01	-0.02	-0.01	0.18	-0.23	-0.18
51	1	-0.05	0.06	0.04	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.06	-0.05
52	1	0.16	-0.19	-0.14	0.02	-0.03	-0.02	0.18	-0.22	-0.17
53	1	-0.13	0.14	0.11	0.02	-0.03	-0.02	0.19	-0.22	-0.18
54	1	0.04	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.04	-0.04
55	1	0.27	-0.29	-0.24	0.02	-0.02	-0.01	0.18	-0.20	-0.16
56	1	0.14	-0.15	-0.13	0.02	-0.02	-0.02	0.09	-0.09	-0.08
57	1	-0.10	0.11	0.06	0.01	-0.01	-0.01	0.34	-0.26	-0.21
58	1	0.11	-0.14	-0.08	-0.01	0.01	0.01	0.19	-0.32	-0.18
			73			74			75	
			A			A			A	
Frequencies	--		919.6156			958.6447			974.6057	
Red. masses	--		1.6717			1.3670			1.5291	
Frc consts	--		0.8329			0.7402			0.8557	
IR Inten	--		120.8225			1.2431			0.2229	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01
2	6	-0.04	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01



3	6	-0.04	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.02
4	6	0.07	-0.05	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02
5	6	-0.06	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.04
6	6	-0.06	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.02
7	6	0.08	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.04	0.03
8	6	-0.03	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.08	-0.03
9	6	-0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
10	6	-0.05	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.07	0.00
11	6	0.08	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.02	0.00
12	6	-0.05	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.02
13	6	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.01
14	6	0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
15	6	-0.04	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.03
16	6	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.04
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01
18	1	0.30	-0.22	0.12	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.08	0.07
19	1	0.13	-0.10	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.03
20	1	0.33	-0.23	0.12	0.00	0.00	0.00	0.18	-0.15	0.03
21	1	0.31	-0.22	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01
22	1	0.06	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.49	-0.32	0.15
23	1	0.28	-0.21	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.06
24	1	0.14	-0.09	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.48	0.33	-0.16
25	1	0.23	-0.16	0.05	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.03
26	1	0.33	-0.16	0.07	0.01	0.00	0.00	-0.18	0.14	-0.02
27	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.02
28	1	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.06	0.01
29	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.06	-0.01
30	1	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.05	-0.04	0.01	-0.02	-0.01
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	-0.01	0.00	-0.04	0.05	0.04	-0.01	0.02	0.01
36	6	-0.01	0.01	0.01	0.02	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	-0.01
37	6	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00
38	6	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01
39	6	-0.01	0.01	0.01	-0.03	0.03	0.02	0.01	-0.01	-0.01
40	6	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.06	-0.04	-0.01	0.01	0.01
41	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	-0.01	0.00	-0.05	0.06	0.05	0.01	-0.01	-0.01
43	6	-0.01	0.01	0.01	0.02	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.00
44	6	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00
45	6	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
46	6	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	-0.01	0.02	0.01	-0.22	0.26	0.20	-0.07	0.08	0.07
50	1	-0.04	0.04	0.04	0.03	-0.04	-0.03	0.02	-0.02	-0.01
51	1	-0.01	0.02	0.01	0.21	-0.26	-0.21	0.07	-0.08	-0.06
52	1	-0.03	0.04	0.03	-0.09	0.12	0.09	0.02	-0.02	-0.02
53	1	-0.03	0.04	0.03	0.07	-0.08	-0.06	0.03	-0.03	-0.02
54	1	-0.01	0.01	0.01	-0.28	0.31	0.26	0.06	-0.07	-0.06
55	1	-0.03	0.04	0.03	-0.06	0.06	0.05	0.01	-0.02	-0.02
56	1	-0.02	0.02	0.01	0.29	-0.32	-0.26	-0.07	0.07	0.06
57	1	-0.07	0.05	0.04	-0.12	0.13	0.07	-0.05	0.04	0.03
58	1	-0.05	0.09	0.05	0.13	-0.18	-0.09	0.01	-0.01	0.00

76

77

78

		A			A			A		
Frequencies	--	975.9630			977.9969			980.9674		
Red. masses	--	1.4788			4.5517			3.3343		
Frc consts	--	0.8299			2.5651			1.8904		
IR Inten	--	1.0391			1.4896			14.9697		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	

1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.08	0.02
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03	-0.09
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.06
5	6	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.07	0.01	-0.11
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.05	-0.06
7	6	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.05	-0.01	0.04
8	6	-0.02	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.10	0.04	0.02
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.02
10	6	0.03	-0.02	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.05	0.00	-0.10
11	6	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.06
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	-0.11
13	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.07	-0.07
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.05
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.06	0.12
16	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.07	0.13
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.09	0.05
18	1	0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.19	-0.07	0.13
19	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03	-0.09
20	1	0.05	-0.04	0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.12	-0.05	-0.17
21	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	0.14	0.09
22	1	0.13	-0.09	0.04	-0.05	0.04	-0.02	-0.20	0.25	-0.10
23	1	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.13	-0.12	0.22
24	1	-0.13	0.09	-0.04	0.05	-0.03	0.01	0.26	-0.20	-0.01
25	1	-0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.02	0.00	0.05	-0.18	-0.11
26	1	-0.06	0.04	-0.01	0.02	-0.01	0.01	0.15	0.11	0.08
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.07	-0.10
28	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.08	-0.34	-0.03
29	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.24	-0.04
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.18	0.12
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.02	0.05
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	-0.05	0.05	0.05	-0.04	-0.10	0.07	0.00	0.01	0.00
34	6	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
35	6	0.06	-0.06	-0.04	0.09	0.06	0.05	0.00	-0.01	-0.01
36	6	-0.03	0.04	0.02	-0.04	0.02	-0.08	0.00	0.00	0.00
37	6	0.03	-0.02	-0.01	0.09	-0.02	0.13	0.00	0.00	-0.01
38	6	0.02	-0.03	-0.01	0.04	-0.07	0.15	0.00	0.00	0.00
39	6	-0.03	0.03	0.02	-0.03	0.02	-0.08	0.00	0.00	0.00
40	6	0.04	-0.05	-0.03	-0.05	-0.08	0.09	0.00	0.00	0.00
41	6	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
42	6	-0.03	0.05	0.04	0.11	0.04	0.04	-0.01	0.00	0.00
43	6	0.02	-0.02	-0.02	-0.05	0.04	-0.09	0.00	0.00	0.00
44	6	-0.01	0.02	0.02	0.12	-0.02	0.12	0.00	0.00	-0.01
45	6	-0.01	0.00	0.02	0.03	-0.08	0.14	-0.01	0.01	0.00
46	6	0.01	-0.02	-0.03	-0.05	0.03	-0.08	0.01	0.00	0.00
47	6	-0.01	0.00	-0.02	-0.11	0.07	-0.20	0.00	0.00	0.01
48	6	-0.01	0.00	-0.02	-0.10	0.07	-0.20	0.01	0.00	0.01
49	1	0.26	-0.34	-0.25	-0.06	-0.03	0.13	0.02	-0.03	-0.03
50	1	-0.06	0.07	0.02	-0.15	0.10	-0.34	0.01	0.00	0.01
51	1	-0.25	0.32	0.25	0.13	-0.04	0.04	-0.03	0.03	0.02
52	1	-0.06	0.10	0.08	0.22	0.13	-0.01	-0.01	0.00	0.00
53	1	-0.11	0.10	0.10	-0.12	-0.20	0.06	0.00	0.02	0.01
54	1	-0.21	0.23	0.20	0.06	-0.14	0.04	-0.01	0.01	0.01
55	1	-0.06	0.06	0.02	-0.18	0.10	-0.34	0.00	0.00	0.01
56	1	0.24	-0.24	-0.21	0.03	0.09	0.13	0.01	-0.02	-0.01
57	1	0.16	-0.09	-0.09	0.10	0.26	0.07	-0.03	0.02	0.02
58	1	0.00	-0.07	-0.03	-0.17	-0.18	0.08	0.04	-0.05	-0.03
			79			80			81	
			A			A			A	
Frequencies	--		999.1944			1008.4268			1017.7208	
Red. masses	--		1.3358			3.3082			1.3902	
Frc consts	--		0.7858			1.9821			0.8484	

IR Inten	--	11.9275			41.5279			1.5881		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.04	-0.02	-0.01	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.04	0.09	-0.06	0.04
3	6	0.00	0.00	0.01	-0.04	0.05	0.14	-0.09	0.06	-0.04
4	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.02	0.02	-0.02	0.01
5	6	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.03	0.02	-0.01	0.01
6	6	-0.01	0.00	0.01	-0.04	-0.03	0.04	-0.04	0.03	-0.02
7	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.01
8	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.08	-0.05	-0.01	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.02	0.01	0.00
10	6	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.01	0.17	0.02	-0.01	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.04	-0.01	0.00	0.00
13	6	-0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.03	0.01	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.08	-0.14	0.00	0.01	0.01
16	6	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.09	-0.14	0.00	0.01	0.01
17	6	0.00	0.00	0.00	0.07	0.11	0.06	-0.01	0.01	-0.01
18	1	0.01	0.01	-0.02	0.02	0.06	-0.15	-0.47	0.36	-0.19
19	1	0.00	0.00	0.02	0.08	0.05	0.18	0.49	-0.35	0.18
20	1	0.00	0.01	0.01	0.03	0.04	0.05	-0.14	0.10	-0.05
21	1	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.09	-0.02	0.25	-0.17	0.09
22	1	0.00	0.01	0.00	0.12	0.06	0.00	0.01	-0.02	0.01
23	1	0.01	0.01	-0.02	0.03	0.05	-0.10	0.10	-0.07	0.03
24	1	0.00	0.00	0.02	-0.06	0.05	0.17	-0.09	0.06	-0.04
25	1	0.00	0.01	0.01	-0.05	0.09	0.04	0.05	-0.04	0.01
26	1	0.02	-0.02	0.00	0.01	-0.06	0.01	-0.07	0.04	-0.02
27	6	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.07	-0.13	0.01	-0.01	0.01
28	1	-0.01	-0.02	0.00	-0.13	-0.53	-0.05	-0.02	-0.04	-0.05
29	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.17	-0.32	-0.03	0.00	0.09	0.03
30	1	0.00	0.01	0.01	-0.04	0.35	0.22	-0.04	-0.01	-0.04
31	8	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.03	0.07	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	-0.02	0.01	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01
34	6	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	-0.01	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	6	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
41	6	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
43	6	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	0.05	-0.05	-0.04	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
45	6	-0.06	0.07	0.04	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
46	6	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	6	0.02	0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.03	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.05	-0.11	-0.06	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01
50	1	0.07	-0.08	-0.03	-0.02	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
51	1	-0.12	0.11	0.07	0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.01
52	1	0.04	-0.03	-0.06	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
53	1	-0.02	0.06	0.06	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
54	1	0.07	-0.10	-0.05	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
55	1	-0.06	0.06	0.04	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
56	1	-0.07	0.02	0.04	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
57	1	-0.42	0.39	0.25	0.06	-0.05	-0.04	0.01	-0.01	0.00
58	1	0.37	-0.50	-0.28	-0.05	0.08	0.04	0.00	0.01	0.00
			82			83			84	
			A			A			A	
Frequencies	--	1018.3990			1030.4075			1034.3631		

Red. masses -- 6.0835 1.3611 1.3262  
 Frc consts -- 3.7174 0.8515 0.8360  
 IR Inten -- 0.5333 1.0599 3.7976

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
2	6	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.02
3	6	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.02
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.02
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.03	-0.01
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.04	0.02
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.02
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.03	0.01
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.04	-0.02
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
18	1	-0.05	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.08	-0.03
19	1	0.05	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.10	0.05
20	1	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.17	-0.15	0.06
21	1	0.03	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.11	-0.05
22	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.22	-0.14	0.07
23	1	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.36	0.22	-0.07
24	1	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.09	0.03
25	1	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.38	0.27	-0.08
26	1	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.50	-0.25	0.07
27	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
28	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02
29	1	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.05	0.01
30	1	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.03
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	-0.01	0.17	-0.21	-0.02	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00
34	6	-0.03	-0.02	0.01	0.03	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00
35	6	0.20	0.02	0.17	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
36	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
37	6	-0.01	0.02	-0.02	0.05	-0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00
38	6	0.02	0.00	0.01	-0.04	0.05	0.05	0.00	0.00	0.00
39	6	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
40	6	-0.02	0.17	-0.20	0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
41	6	-0.02	-0.03	0.00	-0.05	0.05	0.04	0.00	0.00	0.00
42	6	0.20	0.03	0.18	0.03	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00
43	6	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	0.03	-0.01	-0.03	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
45	6	-0.01	0.04	0.03	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
46	6	0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
47	6	-0.20	-0.20	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	-0.20	-0.20	0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.01	0.17	-0.23	0.11	-0.14	-0.11	0.00	0.00	0.00
50	1	0.02	-0.06	-0.02	-0.16	0.19	0.15	0.00	0.00	-0.01
51	1	0.18	0.08	0.21	0.05	-0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00
52	1	0.03	-0.01	-0.06	-0.27	0.32	0.25	0.01	-0.01	0.00
53	1	0.00	0.04	0.05	0.26	-0.30	-0.24	-0.01	0.01	0.01
54	1	0.04	0.14	-0.25	-0.13	0.15	0.12	0.00	0.00	0.00
55	1	-0.06	0.03	0.04	0.27	-0.29	-0.25	0.00	0.00	0.00
56	1	0.21	0.04	0.19	-0.16	0.18	0.16	0.00	0.00	0.00
57	1	-0.20	0.20	0.10	-0.07	0.06	0.04	0.01	0.00	0.00
58	1	0.18	-0.22	-0.11	0.05	-0.08	-0.04	0.00	0.00	0.00

		A			A			A		
Frequencies		1039.7647			1042.0261			1047.7702		
Red. masses		1.4028			1.3724			1.4282		
Frc consts		0.8935			0.8780			0.9238		
IR Inten		4.7725			0.1789			0.1976		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.05	-0.03	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.08	0.05	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.01	0.00	0.00	-0.15	0.10	-0.05	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.01	0.01	0.00	-0.35	0.22	-0.12	0.00	0.00	0.00
21	1	0.01	-0.01	0.00	0.33	-0.22	0.11	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.06	-0.03	0.00	0.00	0.00
23	1	0.01	0.00	0.00	0.23	-0.18	0.10	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.01	0.00	0.00	-0.21	0.16	-0.06	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.01	0.01	0.00	-0.35	0.25	-0.07	-0.01	0.00	0.00
26	1	0.01	0.00	0.00	0.39	-0.20	0.06	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.03	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03	-0.02
34	6	-0.05	0.06	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.06	0.04
35	6	0.03	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.05	-0.04
36	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.02
37	6	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.06	-0.05
38	6	0.02	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.06	0.04
39	6	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.01
40	6	0.04	-0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.03
41	6	-0.05	0.06	0.05	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	-0.03
42	6	0.03	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.01
43	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
45	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
46	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	-0.15	0.19	0.15	0.01	-0.01	0.00	-0.12	0.15	0.12
50	1	0.28	-0.34	-0.26	-0.01	0.01	0.01	0.24	-0.30	-0.23
51	1	-0.17	0.21	0.17	0.01	-0.01	-0.01	-0.20	0.25	0.19
52	1	0.06	-0.07	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.30	0.25
53	1	-0.12	0.14	0.11	0.00	0.00	0.00	0.25	-0.29	-0.24
54	1	-0.22	0.24	0.20	0.01	-0.01	0.00	0.15	-0.16	-0.14
55	1	0.28	-0.31	-0.26	-0.01	0.01	0.01	-0.15	0.17	0.14
56	1	-0.14	0.15	0.13	0.01	0.00	-0.01	0.07	-0.08	-0.07
57	1	-0.02	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.02	-0.02



56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
			91			92			93	
			A			A			A	
Frequencies	--	1094.7239			1110.1417				1123.7681	
Red. masses	--	2.3058			2.1423				1.7928	
Frc consts	--	1.6281			1.5556				1.3339	
IR Inten	--	0.5088			3.0495				6.5061	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	0.03	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.02	0.14	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.10	-0.08	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.08	0.08	-0.09	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.04	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.05	-0.05	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.04	0.06	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.08	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.19	0.58	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.12	-0.08	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.37	0.51	-0.04	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00
26	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.03	0.06	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.04	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.07	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.20	-0.09	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.07	-0.04	0.12	0.00	0.00	0.00	0.07	0.01	0.06
34	6	-0.08	-0.07	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.07	0.01
35	6	-0.06	0.05	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.08
36	6	0.04	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00
37	6	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01
38	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02
39	6	-0.03	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00
40	6	-0.07	0.04	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.07	0.01	0.06
41	6	0.07	0.08	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.07	0.01
42	6	0.06	-0.05	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.07
43	6	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.01
44	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
45	6	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01
46	6	0.03	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	0.00
47	6	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.05	0.00
48	6	0.02	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.05	0.01
49	1	0.37	0.11	0.24	0.00	0.00	0.00	0.40	0.17	0.19
50	1	-0.09	-0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.08	0.02
51	1	0.07	0.31	-0.32	0.00	0.00	0.00	0.14	0.35	-0.29
52	1	-0.01	-0.04	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.00
53	1	0.05	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.01

54	1	-0.37	-0.12	-0.24	0.00	0.00	0.00	0.38	0.18	0.19
55	1	0.08	0.09	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.08	0.01
56	1	-0.06	-0.34	0.33	0.00	0.00	0.00	0.13	0.36	-0.28
57	1	0.01	0.04	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.04	0.03
58	1	-0.04	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.05	-0.01
			94			95			96	
			A			A			A	
Frequencies	--	1136.1903			1145.3858			1171.6648		
Red. masses	--	2.5142			2.5237			1.4741		
Frc consts	--	1.9123			1.9507			1.1923		
IR Inten	--	1.2409			0.9829			5.5796		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.04	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.07	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.04	0.09	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.07	0.05	-0.08	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.05	0.05	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.07	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.05	-0.08	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.06	0.09	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	-0.09	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.05	0.13	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.08	0.07	-0.10	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.14	0.12	-0.14	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.26	0.01	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	-0.20	-0.26	0.07	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.06	-0.31	0.00	0.00	-0.01
22	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.08	-0.25	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.14	0.30	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.06	0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	0.25	0.27	-0.04	-0.01	-0.01	0.00
26	1	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.09	0.33	0.01	0.00	0.01
27	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.04	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00
34	6	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.04	0.02	0.02
35	6	0.02	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.02
36	6	-0.04	0.02	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.04
37	6	0.06	-0.03	0.10	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	-0.02
38	6	-0.05	0.04	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02
39	6	0.03	-0.03	0.07	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.04
40	6	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03
41	6	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.02
42	6	-0.02	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00
43	6	0.04	-0.02	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.04	-0.06
44	6	-0.04	0.02	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.07	0.05	0.01
45	6	0.03	-0.03	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.07	0.03
46	6	-0.03	0.03	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.01	-0.05
47	6	0.07	-0.05	0.13	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.02
48	6	-0.07	0.04	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.03
49	1	0.18	0.06	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.03	0.00
50	1	-0.14	0.10	-0.27	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.02	0.13
51	1	-0.03	-0.10	0.10	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.03



52	1	-0.04	-0.23	0.24	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.18	0.10
53	1	-0.27	-0.08	-0.19	0.00	0.00	0.00	0.20	0.13	0.05
54	1	-0.12	-0.05	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03
55	1	0.14	-0.09	0.27	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.07	0.13
56	1	0.04	0.17	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.03	0.05	-0.01
57	1	-0.02	0.34	-0.22	0.00	0.00	0.00	0.27	0.50	-0.27
58	1	0.32	0.01	0.15	0.01	0.00	0.00	-0.54	-0.28	-0.12
			97			98			99	
			A			A			A	
Frequencies	--	1175.4097			1191.1034			1197.5692		
Red. masses	--	2.2286			1.5184			1.3049		
Frc consts	--	1.8141			1.2692			1.1027		
IR Inten	--	6.4708			0.8995			5.9598		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.08	-0.03	0.12	0.01	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.05	-0.09	-0.04	0.03	0.05	0.03	0.00	0.00	0.00
3	6	0.06	0.05	-0.05	-0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.01	0.03	-0.04	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.03	-0.06	0.00	0.00	0.00
6	6	0.02	0.02	-0.02	0.03	0.05	0.02	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.03	-0.02	0.05	-0.02	-0.02	0.04	0.00	0.00	0.00
8	6	0.02	0.03	0.02	0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	-0.04	-0.02	0.00	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
10	6	0.02	0.04	0.02	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	-0.01	-0.01	0.04	0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00
12	6	0.01	0.01	-0.05	-0.01	0.02	0.06	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.02	-0.02	0.01	-0.03	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00
14	6	0.06	0.10	0.07	0.02	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.00
15	6	-0.04	-0.07	-0.03	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.03	0.00	-0.07	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.06	-0.10	-0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.12	-0.14	0.02	0.03	0.06	0.03	0.00	0.00	0.00
19	1	0.37	0.55	0.02	-0.11	-0.18	-0.04	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.14	-0.22	-0.04	-0.24	-0.41	-0.12	-0.01	-0.01	0.00
21	1	0.02	0.05	0.04	0.04	0.29	0.48	0.00	0.01	0.01
22	1	0.02	0.07	0.09	0.02	0.06	0.08	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.09	-0.09	0.08	0.05	0.02	-0.11	0.00	0.00	-0.01
24	1	0.20	0.31	0.06	-0.03	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
25	1	0.12	0.14	-0.03	0.22	0.34	0.12	0.00	0.00	0.00
26	1	-0.03	-0.13	-0.23	-0.09	-0.18	-0.31	0.00	0.00	0.00
27	6	0.04	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	-0.03	-0.07	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
29	1	-0.07	0.05	0.06	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
30	1	-0.04	0.20	0.07	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
31	8	0.03	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.03
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.05
35	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	-0.02
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.04
37	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.04	0.01
38	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.05	0.02
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.04
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	-0.01
41	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.04
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.03
43	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
44	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.01
45	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.01
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.02
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.03
49	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.04	-0.05

50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.11	0.30
51	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	0.13	-0.10
52	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.25	0.42	-0.26
53	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.45	-0.28	-0.13
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.08	-0.06
55	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.17	-0.09	0.29
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.09	-0.07
57	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.05	0.11	-0.07
58	1	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.12	-0.06	-0.04
		100			101			102		
		A			A			A		
Frequencies	--	1209.2251			1219.9372			1228.0339		
Red. masses	--	1.3738			1.2728			1.3248		
Frc consts	--	1.1836			1.1160			1.1771		
IR Inten	--	4.8566			0.6030			1.8015		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
2	6	-0.02	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	-0.03
3	6	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.03
4	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	-0.01
5	6	0.02	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01
6	6	-0.02	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03
7	6	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04
8	6	0.01	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02
9	6	-0.04	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.03
10	6	0.03	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00
11	6	0.03	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.01
12	6	0.00	0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01
13	6	-0.02	-0.04	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00
14	6	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.07
15	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03	-0.07
16	6	-0.04	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
17	6	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01
18	1	-0.09	-0.06	0.14	0.00	0.00	0.00	0.24	0.16	-0.30
19	1	0.02	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.14	0.01
20	1	0.21	0.34	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.08	-0.02
21	1	-0.03	-0.14	-0.21	0.00	0.00	0.00	0.00	0.17	0.34
22	1	0.00	-0.08	-0.19	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.24
23	1	-0.27	-0.20	0.40	0.00	0.00	0.00	-0.28	-0.22	0.44
24	1	0.12	0.16	0.01	0.00	0.00	0.00	0.16	0.25	0.03
25	1	0.21	0.31	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.20	-0.30	-0.05
26	1	-0.08	-0.20	-0.39	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	0.02
27	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
28	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
29	1	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
30	1	0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03
31	8	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00
37	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
38	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.04	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
43	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.05	0.04	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
45	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.04	0.00	0.00	0.00

48	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.07	-0.07	0.02	0.01	0.01
50	1	0.00	0.00	0.01	0.23	-0.16	0.45	-0.01	0.01	-0.03
51	1	0.00	0.00	0.00	0.07	0.15	-0.12	-0.01	-0.01	0.01
52	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.09	0.07	0.01	0.02	-0.01
53	1	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.08	-0.07	-0.01	-0.01	-0.01
54	1	0.00	0.00	0.00	0.20	0.10	0.09	0.01	0.01	0.00
55	1	0.00	0.00	0.00	-0.28	0.18	-0.53	-0.01	0.01	-0.02
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.17	0.13	-0.01	-0.01	0.01
57	1	0.00	0.01	0.00	0.06	0.16	-0.11	0.01	0.01	-0.01
58	1	-0.01	0.00	0.00	0.13	0.06	0.05	-0.01	-0.01	0.00

103

104

105

		A	A	A
Frequencies	--	1229.2386	1241.2680	1247.4728
Red. masses	--	1.2126	1.5732	2.1705
Frc consts	--	1.0795	1.4282	1.9901
IR Inten	--	16.6227	33.8346	2.0831

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.04	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.06	0.04	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.05	0.02	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.07	-0.12	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.06	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.02	-0.01	0.02	-0.37	-0.23	0.46	0.00	0.00	0.00
19	1	0.01	0.01	0.00	0.17	0.25	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	-0.14	-0.21	-0.01	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	0.09	0.23	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.04	-0.09	0.00	0.00	0.00
23	1	0.02	0.01	-0.02	-0.16	-0.13	0.25	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
25	1	0.01	0.02	0.00	-0.13	-0.18	0.02	0.00	0.00	0.00
26	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.15	0.37	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.05	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.03
34	6	-0.02	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	-0.02
36	6	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.11	-0.07
37	6	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01	0.03
38	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04
39	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.07	-0.03
40	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.03
41	6	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
42	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	-0.02
43	6	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.07	0.12	-0.08
44	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.05	0.02	0.03
45	6	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.05

46	6	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.08	-0.04
47	6	0.03	-0.02	0.06	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.03
48	6	0.04	-0.03	0.07	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02
49	1	0.25	0.13	0.09	0.00	0.00	0.00	0.34	0.21	0.09
50	1	-0.22	0.14	-0.41	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.08	0.23
51	1	-0.11	-0.21	0.16	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.27	0.17
52	1	0.13	0.25	-0.18	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.06	0.09
53	1	-0.24	-0.13	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.02	0.06
54	1	0.20	0.11	0.08	0.00	0.00	0.00	0.30	0.20	0.08
55	1	-0.16	0.11	-0.32	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.08	0.21
56	1	-0.10	-0.20	0.13	0.00	0.00	0.00	-0.20	-0.35	0.20
57	1	0.07	0.17	-0.12	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.17	0.16
58	1	-0.22	-0.10	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.18	0.05	0.12
			106			107			108	
			A			A			A	
Frequencies	--	1266.3480			1282.6698			1283.4247		
Red. masses	--	2.0483			1.8436			2.2011		
Frc consts	--	1.9353			1.7871			2.1362		
IR Inten	--	6.9348			2.7235			133.3339		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.01	0.05	-0.01	-0.01	0.01	-0.04	-0.03	0.04
2	6	-0.01	-0.03	-0.04	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.04	-0.04
3	6	0.00	-0.01	-0.03	0.01	0.00	-0.02	0.02	0.00	-0.05
4	6	0.07	0.11	0.00	0.03	0.04	0.01	0.10	0.16	0.02
5	6	-0.02	0.00	0.07	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.02
6	6	-0.03	-0.03	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.03	-0.03	0.04
7	6	-0.02	-0.10	-0.15	0.01	0.01	-0.01	0.02	0.02	-0.02
8	6	0.03	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01
9	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02
10	6	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.04
11	6	0.06	0.11	0.04	-0.02	-0.03	-0.01	-0.06	-0.11	-0.03
12	6	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
13	6	-0.02	-0.03	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.03	0.03	-0.04
14	6	0.01	0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.02	-0.04	-0.04	0.06
15	6	-0.05	-0.06	0.03	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.01	-0.06
16	6	0.00	0.01	0.02	0.00	0.01	0.01	0.01	0.03	0.04
17	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.03	0.00	0.05	0.09	0.00
18	1	0.04	0.00	-0.12	-0.01	-0.02	0.00	-0.04	-0.07	-0.01
19	1	-0.16	-0.26	-0.07	-0.06	-0.11	-0.04	-0.22	-0.39	-0.13
20	1	-0.04	-0.01	0.08	-0.07	-0.10	-0.01	-0.24	-0.35	-0.02
21	1	-0.03	0.01	0.11	-0.01	-0.02	-0.01	-0.04	-0.08	-0.05
22	1	0.06	0.34	0.57	0.00	-0.02	-0.03	-0.01	-0.06	-0.10
23	1	-0.10	-0.07	0.16	0.01	0.01	0.00	0.04	0.05	-0.02
24	1	-0.22	-0.36	-0.09	0.07	0.11	0.03	0.25	0.41	0.10
25	1	-0.09	-0.14	-0.01	0.04	0.06	0.01	0.16	0.23	0.02
26	1	-0.05	-0.14	-0.22	0.01	0.00	-0.02	0.05	0.00	-0.09
27	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.01
28	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.03	-0.02
29	1	0.00	0.02	0.01	0.02	0.01	-0.01	0.05	0.02	-0.03
30	1	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.04	-0.02	0.02	-0.13	-0.06
31	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00
37	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.04	0.00	-0.01	0.02
39	6	0.00	0.00	0.00	0.10	0.02	0.08	-0.04	-0.01	-0.03
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.05	0.01	0.02	0.02	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.01
43	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.12	-0.11	-0.01	-0.04	0.04

44	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
45	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.03	0.00	0.01	-0.01
46	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.04	0.02	-0.01	-0.01	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.04	-0.01	0.00	-0.01
48	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.02	-0.03	0.02	0.01	0.01
49	1	0.00	0.00	0.00	-0.20	-0.12	-0.06	0.04	0.03	0.01
50	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.02
51	1	0.00	0.00	0.00	0.10	0.15	-0.10	-0.04	-0.06	0.04
52	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.10	0.07	0.02	0.02	-0.01
53	1	0.00	0.00	0.00	-0.27	-0.11	-0.15	0.09	0.04	0.05
54	1	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.08	-0.04	0.06	0.04	0.02
55	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.06	0.01	0.02	0.02	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.22	-0.41	0.24	0.08	0.14	-0.08
57	1	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.38	0.26	0.05	0.12	-0.09
58	1	0.00	0.00	0.00	-0.25	-0.14	-0.05	0.06	0.04	0.01

		109			110			111		
		A			A			A		
Frequencies	--	1284.4700			1289.4842			1292.0179		
Red. masses	--	2.1068			1.5803			1.8356		
Frc consts	--	2.0479			1.5482			1.8054		
IR Inten	--	13.2275			3.6250			6.1961		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.04
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.02
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01
4	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.05	-0.01
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.05	0.15
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.02
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.06	-0.05
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.02
11	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.09	0.13	-0.02
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.03
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.01
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.04
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	-0.03
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.08
19	1	0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.07	-0.03
20	1	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.30	-0.06
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.18	-0.41
22	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.22	-0.37
23	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.08	-0.03
24	1	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.28	-0.07
25	1	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.22	-0.31	-0.01
26	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.16	-0.29
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.01
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	-0.02
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.06	-0.02
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.01	-0.02	0.03	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
34	6	-0.06	-0.06	0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
36	6	0.03	0.11	-0.11	0.06	0.10	-0.06	0.00	0.00	0.00
37	6	0.04	0.00	0.05	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
38	6	0.01	-0.02	0.03	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
39	6	-0.08	-0.05	-0.02	0.10	0.07	0.03	0.00	0.00	0.00
40	6	0.01	0.02	-0.02	0.01	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00
41	6	0.02	0.02	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00

42	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
43	6	0.01	-0.02	0.03	-0.04	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
44	6	-0.03	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
45	6	0.01	0.02	-0.03	-0.01	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
46	6	0.15	0.06	0.08	-0.01	-0.04	0.04	0.00	0.00	0.00
47	6	-0.04	-0.06	0.03	-0.03	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
48	6	0.03	0.05	-0.03	0.02	-0.02	0.05	0.00	0.00	0.00
49	1	-0.47	-0.27	-0.13	0.20	0.12	0.05	0.01	0.00	0.00
50	1	-0.07	-0.06	0.01	0.01	-0.05	0.07	0.00	0.00	0.00
51	1	-0.14	-0.24	0.16	-0.23	-0.38	0.24	0.00	0.00	0.00
52	1	-0.06	-0.22	0.21	-0.16	-0.30	0.20	0.00	0.00	0.00
53	1	0.03	-0.02	0.05	-0.33	-0.19	-0.11	0.00	0.00	0.00
54	1	0.30	0.19	0.09	-0.41	-0.26	-0.13	-0.01	0.00	0.00
55	1	0.04	0.01	0.04	-0.06	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00
56	1	0.03	0.05	-0.03	0.11	0.19	-0.11	0.00	0.00	0.00
57	1	-0.06	-0.04	-0.02	0.02	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.41	-0.17	-0.18	-0.03	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00

112				113			114			
A				A			A			
Frequencies	--	1308.1272		1364.8282		1365.5050				
Red. masses	--	2.5751		2.9153		3.0335				
Frc consts	--	2.5963		3.1996		3.3325				
IR Inten	--	244.5947		5.2220		0.2891				
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.12	-0.08	0.15	-0.06	-0.02	0.11	0.00	0.00	-0.01
2	6	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.05	-0.10	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.03	-0.07	-0.04	-0.06	0.01	0.17	0.00	0.00	-0.01
5	6	-0.01	-0.02	0.00	0.04	0.04	-0.04	0.00	0.00	0.00
6	6	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
7	6	0.01	-0.01	-0.04	-0.07	-0.07	0.06	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.03	0.06	0.03	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.01	0.00	0.05	0.05	0.03	-0.11	0.00	0.00	0.01
12	6	0.00	0.01	0.00	-0.04	-0.05	0.04	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.02	-0.04	-0.02	0.08	0.05	-0.17	0.00	0.00	0.01
15	6	0.01	0.05	0.06	-0.02	-0.06	-0.07	0.00	0.00	0.00
16	6	0.02	0.00	-0.06	0.00	0.04	0.08	0.00	0.00	0.00
17	6	0.10	0.22	0.03	-0.01	0.05	0.02	0.00	0.00	0.00
18	1	0.31	0.17	-0.39	0.21	0.14	-0.28	-0.01	-0.01	0.01
19	1	0.29	0.46	0.06	-0.09	-0.20	-0.13	0.00	0.01	0.01
20	1	0.08	0.12	0.02	0.21	0.31	-0.01	-0.01	-0.02	0.00
21	1	0.02	0.13	0.22	0.01	-0.15	-0.32	0.00	0.01	0.02
22	1	0.00	0.02	0.05	0.03	0.06	0.05	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.01	0.00	0.03	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.07	-0.12	-0.04	0.13	0.24	0.09	-0.01	-0.01	0.00
25	1	0.14	0.21	0.03	-0.09	-0.12	0.03	0.01	0.01	0.00
26	1	-0.01	-0.05	-0.08	0.00	0.18	0.44	0.00	-0.01	-0.02
27	6	-0.05	-0.08	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.01	0.05	-0.07	0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
29	1	0.13	0.04	-0.08	0.02	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00
30	1	0.05	-0.25	-0.07	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
31	8	0.02	-0.03	-0.03	0.03	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.06	-0.05
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	0.04	0.02
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.00	-0.11
37	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.04
38	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.04
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.08	-0.12

40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.06	0.04
41	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.01
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.03	-0.03
43	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.11	0.01	0.12
44	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.05
45	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	-0.04
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.09	0.14
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.10	0.11	-0.03
48	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.11	-0.10	0.01
49	1	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.25	0.18	0.04
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.02
51	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.16	0.20	-0.09
52	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.11	-0.27	0.22
53	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.30	0.14	0.14
54	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.21	-0.17	-0.03
55	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.02
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.17	-0.25	0.12
57	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.09	0.23	-0.18
58	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.28	-0.12	-0.12
		115			116			117		
		A			A			A		
Frequencies	--	1383.4310			1386.5271			1414.7587		
Red. masses	--	4.6161			4.8062			3.2575		
Frc consts	--	5.2053			5.4439			3.8415		
IR Inten	--	4.9187			23.0422			104.9120		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.07	0.19	0.17	-0.05	-0.13	-0.12
2	6	0.00	0.00	0.00	0.09	0.04	-0.13	0.04	0.07	0.02
3	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.12	0.01	-0.02	-0.03	0.01
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.05	0.11	-0.02	-0.03	-0.01
5	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	-0.03	-0.05	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.05	-0.03
7	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.08	-0.03	-0.10	-0.12	0.04
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.05	0.15	0.03	0.07	0.07
9	6	0.00	0.00	0.00	0.07	0.06	-0.11	0.03	0.02	-0.06
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.15	-0.04	-0.05	-0.06	0.02
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.06	0.18	0.00	0.00	0.03
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.05	0.08	-0.01
13	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.04	-0.01	-0.01	0.02
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.16	-0.02	-0.05	-0.03	0.10
15	6	0.00	0.00	0.00	0.07	0.08	-0.05	-0.01	-0.06	-0.12
16	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.11	0.12	0.18	0.04
17	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.11	-0.02	0.09	0.06	-0.02
18	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.07	-0.20	-0.09	0.35
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.04	0.07	0.11	0.04
20	1	0.00	0.00	0.00	0.16	0.25	0.02	0.16	0.25	0.04
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.18	0.05	0.00	-0.15
22	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.17	-0.28	0.03	0.06	0.04
23	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.02	-0.06
24	1	0.00	0.00	0.00	0.06	0.09	0.00	0.08	0.14	0.05
25	1	0.00	0.00	0.00	0.27	0.45	0.05	-0.18	-0.31	-0.06
26	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.10	-0.28	-0.03	-0.20	-0.35
27	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.03	0.03
28	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	0.01	-0.10	-0.11	-0.14
29	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.03	0.04	0.11	-0.20	-0.06
30	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.14	0.05	0.05	-0.20	-0.15
31	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01	-0.03	0.00	0.02
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.15	0.08	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	-0.06	0.05	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	-0.07	-0.13	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	6	0.13	0.06	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	6	-0.03	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

38	6	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
39	6	-0.04	-0.12	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.15	0.08	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	6	-0.08	0.04	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	-0.06	-0.14	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	6	0.15	0.08	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	6	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	-0.06	-0.13	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	6	-0.07	0.02	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	-0.04	0.05	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	-0.14	-0.07	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
51	1	0.10	0.19	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.12	0.29	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	1	-0.33	-0.16	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	-0.21	-0.12	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	1	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.05	0.13	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	1	0.10	0.23	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
58	1	-0.26	-0.13	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

118					119			120		
A					A			A		
Frequencies	--	1426.8208			1431.9590			1432.7612		
Red. masses	--	3.5120			1.6047			2.8474		
Frc consts	--	4.2125			1.9387			3.4438		
IR Inten	--	1.5224			73.9697			7.1439		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.07	-0.07
2	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	-0.01	-0.05	-0.04	0.05
3	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.00	0.06	0.09	0.01
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.05
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.04
6	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	0.00	-0.03	-0.06
7	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01	-0.05	-0.08	-0.02
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.01	0.05	0.10
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.04	0.04	-0.04
10	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.04	0.01	-0.07	-0.12	-0.03
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.03	0.06
12	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.03	0.00	-0.01	-0.05
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.05	0.00	0.03	0.09
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.05	0.03	0.08	0.10	-0.02
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.06	-0.02	0.07	0.09	-0.01
16	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.09	0.01	-0.09	-0.11	0.02
17	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.04	0.01
18	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.04	-0.07	-0.06	0.08
19	1	0.00	0.00	0.00	0.06	0.10	0.02	-0.07	-0.12	-0.03
20	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.02	0.05	0.05
21	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.07	0.00	0.06	0.11
22	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.05	0.00	-0.06	-0.13
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.03	0.09	0.08	-0.11
24	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.09	-0.01	0.15	0.24	0.02
25	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.03	-0.03	-0.07	-0.07
26	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.03	-0.03	-0.09	-0.18
27	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.10	-0.07	-0.02	-0.09	-0.06
28	1	0.00	0.00	0.00	0.25	0.34	0.33	0.20	0.24	0.31
29	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.58	0.05	-0.07	0.49	0.04
30	1	0.00	0.00	0.00	0.04	0.32	0.41	0.06	0.22	0.32
31	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.14	0.08	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	-0.04	0.02	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	-0.07	-0.12	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00



36	6	0.10	0.04	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	6	-0.01	0.05	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	6	0.05	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
39	6	0.03	0.08	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	-0.13	-0.08	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	6	0.03	-0.02	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	0.07	0.13	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	6	-0.09	-0.04	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	-0.06	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	6	-0.06	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	-0.03	-0.08	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	6	0.06	-0.03	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	-0.06	0.02	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	-0.25	-0.11	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	-0.12	0.07	-0.22	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
51	1	0.09	0.19	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	-0.13	-0.18	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	1	-0.20	-0.14	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.22	0.11	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	1	0.12	-0.08	0.23	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	-0.08	-0.21	0.16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	1	0.18	0.25	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.25	0.18	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

121					122			123		
A					A			A		
Frequencies	--	1441.6292			1445.1433			1455.0074		
Red. masses	--	6.2737			2.0607			2.5431		
Frc consts	--	7.6822			2.5356			3.1721		
IR Inten	--	37.2216			0.3363			1.9527		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.05
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.03	-0.07
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	0.12
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.03
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.10
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.01
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.06
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.03	0.10
10	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.11
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.03
13	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.11
14	6	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	-0.02
15	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.15
16	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.02	-0.15
17	6	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01
18	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.09	0.18
19	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.20	-0.02
20	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.17	0.29	0.07
21	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.16	0.30
22	1	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.04
23	1	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.15	0.13	-0.21
24	1	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.15	0.23	0.01
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.20	-0.32	-0.09
26	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.19	-0.38
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
28	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	0.02
29	1	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.03	0.01	0.02	0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00

34	6	-0.05	-0.02	-0.03	-0.04	0.04	-0.09	0.00	0.00	0.00
35	6	0.03	0.04	-0.02	0.00	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00
36	6	0.09	0.02	0.07	0.06	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00
37	6	0.09	0.11	-0.04	-0.01	-0.04	0.04	0.00	0.00	0.00
38	6	-0.12	-0.09	-0.02	-0.05	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
39	6	-0.01	-0.09	0.10	0.01	0.05	-0.05	0.00	0.00	0.00
40	6	-0.02	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
41	6	0.01	0.05	-0.05	0.06	-0.02	0.09	0.00	0.00	0.00
42	6	-0.01	-0.04	0.04	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
43	6	-0.06	0.01	-0.08	-0.07	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00
44	6	-0.14	-0.19	0.08	0.02	0.06	-0.07	0.00	0.00	0.00
45	6	0.20	0.15	0.02	0.07	0.03	0.05	0.00	0.00	0.00
46	6	-0.02	0.06	-0.09	-0.04	-0.06	0.04	0.00	0.00	0.00
47	6	0.24	0.25	-0.06	0.06	-0.03	0.09	0.00	0.00	0.00
48	6	-0.24	-0.24	0.05	-0.05	0.03	-0.09	0.00	0.00	0.00
49	1	-0.16	-0.10	-0.04	0.17	0.08	0.08	0.00	0.00	0.00
50	1	0.03	-0.08	0.14	0.13	-0.07	0.23	0.00	0.00	0.00
51	1	-0.14	-0.27	0.20	-0.03	-0.09	0.08	0.00	0.00	0.00
52	1	0.04	0.00	0.04	0.14	0.25	-0.16	0.00	0.00	0.00
53	1	0.02	-0.02	0.05	0.27	0.16	0.09	0.00	0.00	0.00
54	1	0.29	0.16	0.11	-0.11	-0.04	-0.06	0.00	0.00	0.00
55	1	0.09	0.00	0.10	-0.12	0.09	-0.24	0.00	0.00	0.00
56	1	0.10	0.18	-0.11	0.07	0.17	-0.13	0.00	0.00	0.00
57	1	0.02	0.16	-0.17	-0.20	-0.34	0.22	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.20	-0.07	-0.15	-0.38	-0.23	-0.12	0.00	0.00	0.00

		124			125			126		
		A			A			A		
Frequencies	--	1460.5212			1474.0010			1474.5561		
Red. masses	--	2.4859			2.0035			1.9811		
Frc consts	--	3.1243			2.5646			2.5380		
IR Inten	--	0.9017			7.5417			6.4819		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.02	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.05	-0.04	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.07	0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.09	-0.09	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	-0.05	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.06	0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.02	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.02	-0.05	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.04	-0.07	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.03	0.06	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.02	-0.01	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.08	0.13	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.01	-0.04	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.05	-0.02	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.15	-0.25	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.02	-0.20	-0.35	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.01	0.28	0.57	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.19	-0.12	0.34	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.05	-0.04	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.06	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	0.05	0.03	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
29	1	0.06	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.04	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	8	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.04	0.08	0.04	0.03
34	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.06	-0.01	-0.05	0.06
35	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.06	0.04	-0.03	-0.01	-0.03
36	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.01	-0.08	0.05	0.07	-0.03
37	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.04	-0.01	0.00	-0.03	0.04
38	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.03	-0.04	-0.04	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.06	0.01	-0.03	0.05	-0.09
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.04	0.07	0.05	0.02
41	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.02	0.04	0.01	-0.05	0.07
42	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.08	0.05	-0.04	-0.02	-0.02
43	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.01	-0.08	0.04	0.06	-0.03
44	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	0.00	0.00	-0.02	0.03
45	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.02	-0.03	-0.03	0.01
46	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.05	0.00	-0.02	0.05	-0.08
47	6	0.00	0.00	0.00	0.07	0.04	0.03	0.01	-0.03	0.05
48	6	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00	0.05	-0.03	-0.06	0.05
49	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.06	-0.41	-0.21	-0.16
50	1	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.13	-0.28	-0.16	0.04	-0.22
51	1	0.00	0.00	0.00	0.19	0.37	-0.28	-0.05	-0.02	-0.02
52	1	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.25	0.20	0.10	0.15	-0.09
53	1	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.12	-0.05	0.27	0.14	0.12
54	1	0.00	0.00	0.00	0.05	0.06	-0.02	-0.40	-0.22	-0.17
55	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.12	-0.22	-0.18	0.07	-0.28
56	1	0.00	0.00	0.00	0.18	0.37	-0.26	-0.02	0.04	-0.07
57	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.18	0.14	0.06	0.10	-0.06
58	1	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.07	-0.03	0.21	0.10	0.09

127				128			129			
A				A			A			
Frequencies	--	1476.6919		1483.7880		1484.8865				
Red. masses	--	1.8151		4.3017		1.4904				
Frc consts	--	2.3320		5.5800		1.9362				
IR Inten	--	22.3953		2.3344		99.5718				
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	0.05	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.03	0.00
2	6	-0.02	0.01	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
3	6	-0.05	-0.07	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.01
4	6	0.04	0.02	-0.08	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.07
5	6	0.02	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02
6	6	-0.01	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
7	6	-0.01	-0.04	-0.06	-0.01	-0.01	0.00	0.03	0.04	0.00
8	6	0.02	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.02
9	6	-0.01	0.01	0.06	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03
10	6	-0.04	-0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.00
11	6	0.03	0.02	-0.08	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.06
12	6	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02
13	6	0.00	0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01
14	6	-0.01	-0.04	-0.06	-0.01	-0.01	0.00	0.03	0.04	0.00
15	6	-0.01	0.01	0.06	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	-0.03
16	6	-0.02	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.03
17	6	0.03	-0.05	-0.04	-0.01	0.01	0.01	0.07	-0.03	-0.06
18	1	0.16	0.13	-0.17	0.01	0.01	-0.01	-0.07	-0.06	0.08
19	1	0.23	0.37	0.06	0.01	0.02	0.01	-0.07	-0.13	-0.03
20	1	-0.16	-0.25	-0.03	-0.01	-0.02	0.00	0.06	0.09	0.00
21	1	-0.02	-0.10	-0.16	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.03	0.07
22	1	0.02	0.04	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.02	-0.06	-0.07
23	1	0.11	0.11	-0.13	0.01	0.01	-0.01	-0.05	-0.05	0.05
24	1	0.20	0.32	0.04	0.02	0.03	0.01	-0.10	-0.17	-0.03
25	1	-0.11	-0.17	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.05	0.07	-0.01
26	1	-0.02	-0.07	-0.12	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.02	0.08
27	6	-0.02	-0.01	0.03	0.01	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	0.04
28	1	-0.01	0.11	-0.33	0.01	-0.02	0.08	-0.05	0.12	-0.51
29	1	0.30	-0.04	-0.14	-0.09	-0.01	0.04	0.57	0.03	-0.27

30	1	-0.03	0.16	0.17	-0.01	-0.03	-0.05	0.07	0.20	0.34
31	8	-0.03	0.02	0.03	0.01	0.00	-0.01	-0.04	0.02	0.04
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.02	0.14	0.00	0.00	0.01
37	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.10	-0.15	0.00	0.00	-0.01
38	6	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.01	0.13	0.01	0.00	0.01
39	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.08	-0.15	0.00	0.01	-0.01
40	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
43	6	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.04	0.16	0.01	0.00	0.01
44	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.09	-0.14	0.00	0.00	-0.01
45	6	0.00	0.00	0.00	0.11	0.01	0.13	0.01	0.00	0.01
46	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.08	-0.18	-0.01	0.00	-0.01
47	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.07	0.04	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.10	-0.04	-0.01	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.06	-0.11	0.00	0.00	0.00
51	1	0.00	0.01	0.00	-0.05	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	-0.23	-0.30	0.13	-0.01	-0.02	0.01
53	1	0.00	0.00	0.00	-0.31	-0.24	-0.03	-0.02	-0.02	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.00
55	1	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.06	0.00	0.00	0.01
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.11	0.06	0.00	-0.01	0.00
57	1	0.00	0.00	0.00	-0.23	-0.26	0.13	-0.01	-0.01	0.01
58	1	0.00	0.00	0.00	-0.27	-0.24	-0.02	-0.02	-0.01	0.00

				130			131			132		
				A			A			A		
Frequencies	--	1496.9539		1503.9828		1514.5151						
Red. masses	--	3.6488		1.0781		5.6959						
Frc consts	--	4.8175		1.4368		7.6976						
IR Inten	--	0.6716		16.1511		39.0243						
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z		
1	6	-0.02	-0.05	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00		
2	6	0.03	0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
3	6	-0.03	-0.07	-0.04	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00		
4	6	-0.07	-0.03	0.13	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00		
5	6	0.09	0.09	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
6	6	-0.05	0.01	0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
7	6	0.10	0.09	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
8	6	-0.03	-0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
9	6	0.02	0.04	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00		
10	6	-0.01	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
11	6	-0.08	-0.06	0.15	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00		
12	6	0.09	0.11	-0.08	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00		
13	6	-0.03	0.00	0.15	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00		
14	6	0.07	0.06	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
15	6	-0.03	-0.06	-0.05	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00		
16	6	-0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
17	6	0.00	0.02	0.01	-0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.02		
18	1	0.03	0.06	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00		
19	1	0.05	0.06	-0.01	0.01	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00		
20	1	-0.15	-0.30	-0.15	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00		
21	1	-0.06	-0.24	-0.30	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
22	1	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01		
23	1	-0.01	0.01	0.07	0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00		
24	1	-0.03	-0.06	-0.03	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00		
25	1	-0.13	-0.26	-0.14	0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00		
26	1	-0.10	-0.23	-0.34	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.02		
27	6	0.01	0.01	-0.02	-0.04	0.05	-0.02	0.00	-0.01	0.00		

28	1	-0.01	-0.11	0.26	-0.23	-0.49	0.22	0.00	0.03	-0.07
29	1	-0.20	0.04	0.10	0.23	0.28	-0.10	0.04	-0.02	-0.02
30	1	0.07	-0.15	-0.11	0.59	-0.30	0.26	-0.03	0.05	0.03
31	8	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.05
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.07	0.13
35	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.05	-0.09
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.02	0.13
37	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.11	0.14	-0.07
38	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.12	-0.03
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.08	0.15
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.01	-0.09
41	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.02	0.12
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	-0.04
43	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.05	0.10
44	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.14	0.18	-0.07
45	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.20	-0.14	-0.02
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.03	0.11
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.10	-0.14
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.01	-0.12
49	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.02	-0.07
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.20	0.09	-0.33
51	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.18	0.06
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	0.07
53	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	0.00	0.08
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.19	0.17	0.01
55	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.13	-0.31
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.02	-0.06
57	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.16	0.17
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.20	0.07	0.14

		133			134			135		
		A			A			A		
Frequencies	--	1521.4214			1537.2567			1537.5260		
Red. masses	--	4.5951			3.1581			3.0981		
Frc consts	--	6.2668			4.3971			4.3151		
IR Inten	--	15.9386			141.3099			78.7433		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	0.01	-0.07	-0.07	-0.07	0.01	0.04	0.04	-0.01
2	6	-0.07	-0.05	0.09	0.06	0.05	-0.05	-0.04	-0.03	0.03
3	6	0.04	0.03	-0.05	-0.04	-0.05	0.02	0.03	0.03	-0.01
4	6	-0.08	-0.06	0.11	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01
5	6	0.11	0.18	0.06	0.02	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.01
6	6	-0.05	-0.11	-0.08	-0.01	0.01	0.05	0.01	-0.01	-0.03
7	6	-0.07	-0.09	0.01	0.01	-0.03	-0.08	0.00	0.02	0.05
8	6	0.06	0.07	-0.05	0.02	0.05	0.03	-0.01	-0.03	-0.02
9	6	-0.11	-0.08	0.18	-0.05	-0.05	0.06	0.03	0.03	-0.03
10	6	0.03	-0.01	-0.11	0.01	0.00	-0.04	-0.01	0.00	0.02
11	6	-0.02	0.03	0.14	0.05	0.08	0.00	-0.03	-0.05	0.00
12	6	0.06	0.11	0.06	-0.06	-0.09	0.00	0.04	0.06	0.00
13	6	-0.04	-0.12	-0.15	0.01	0.01	-0.05	0.00	0.00	0.03
14	6	-0.04	0.00	0.10	0.04	0.07	0.05	-0.03	-0.04	-0.03
15	6	0.06	0.05	-0.08	-0.02	-0.01	0.04	0.01	0.00	-0.02
16	6	0.06	0.02	-0.11	-0.01	-0.03	-0.03	0.01	0.02	0.02
17	6	-0.03	0.01	0.04	0.15	-0.03	-0.14	-0.09	0.02	0.08
18	1	0.19	0.11	-0.23	-0.12	-0.05	0.17	0.07	0.03	-0.11
19	1	-0.04	-0.11	-0.08	0.03	0.07	0.05	-0.02	-0.04	-0.03
20	1	-0.15	-0.21	0.01	-0.04	-0.07	-0.02	0.02	0.04	0.01
21	1	-0.06	-0.08	0.01	-0.01	-0.07	-0.09	0.01	0.04	0.06
22	1	0.07	0.07	-0.07	0.02	-0.06	-0.19	-0.01	0.03	0.12
23	1	0.31	0.24	-0.46	0.11	0.07	-0.19	-0.07	-0.04	0.12
24	1	0.07	0.04	-0.12	0.04	0.04	-0.04	-0.03	-0.03	0.03
25	1	0.00	-0.02	0.06	0.13	0.21	0.05	-0.08	-0.13	-0.03

26	1	-0.02	0.06	0.22	0.07	0.14	0.27	-0.04	-0.09	-0.16
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00
28	1	-0.01	0.00	-0.08	0.05	0.04	0.29	-0.03	-0.03	-0.17
29	1	0.04	-0.04	-0.03	-0.23	0.06	0.12	0.14	-0.03	-0.07
30	1	-0.02	0.06	0.04	0.00	-0.19	-0.20	0.00	0.12	0.12
31	8	0.01	-0.01	-0.01	-0.08	0.03	0.07	0.05	-0.02	-0.04
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.03	-0.02	-0.05	0.05
34	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	-0.07	-0.06	0.05	-0.13
35	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.02	0.06	0.02	0.04
36	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.05	0.04	-0.05	-0.08	0.05
37	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.04	0.01	0.06	-0.06
38	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01	0.03	0.07	0.02	0.05
39	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.04	-0.01	-0.09	-0.05	-0.03
40	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.03	0.01	0.05	-0.05
41	6	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.03	0.09	0.07	-0.04	0.13
42	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.02	-0.02	-0.06	-0.03	-0.03
43	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.05	-0.01	0.06	0.08	-0.03
44	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.02	-0.02	-0.04	0.04
45	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.02	-0.02	-0.05	-0.02	-0.03
46	6	0.00	0.00	0.00	0.05	0.04	0.01	0.08	0.06	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.02
48	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.02	-0.02	0.00	-0.02
49	1	0.00	0.00	0.00	0.08	0.01	0.07	0.12	0.01	0.11
50	1	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.06	0.19	0.18	-0.11	0.33
51	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.08	0.01	-0.09	0.13
52	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.12	0.07	-0.12	-0.19	0.11
53	1	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.08	-0.03	-0.20	-0.13	-0.05
54	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.00	-0.07	-0.11	-0.01	-0.11
55	1	0.00	0.00	0.01	-0.11	0.08	-0.22	-0.17	0.12	-0.32
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.06	-0.08	-0.01	0.10	-0.13
57	1	0.00	0.00	0.00	0.05	0.08	-0.05	0.08	0.14	-0.09
58	1	0.00	0.00	0.00	0.09	0.06	0.03	0.15	0.09	0.04

		136			137			138		
		A			A			A		
Frequencies	--	1551.1263			1581.8035			1583.3935		
Red. masses	--	3.1399			4.3377			4.3720		
Frc consts	--	4.4510			6.3946			6.4581		
IR Inten	--	70.1877			59.4905			28.9604		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	-0.04	0.05	-0.02	0.05	0.13	-0.02	0.05	0.13
2	6	0.10	0.05	-0.15	0.00	-0.04	-0.07	-0.01	-0.04	-0.06
3	6	0.01	0.06	0.09	0.07	0.12	0.04	0.07	0.12	0.04
4	6	-0.05	-0.11	-0.07	-0.03	-0.07	-0.06	-0.03	-0.07	-0.05
5	6	0.02	0.01	-0.04	-0.02	-0.04	-0.03	-0.02	-0.04	-0.03
6	6	0.01	0.07	0.12	0.02	0.05	0.03	0.02	0.05	0.03
7	6	0.00	-0.03	-0.07	-0.02	0.00	0.06	-0.01	0.01	0.06
8	6	0.02	0.02	-0.03	0.00	-0.05	-0.10	0.00	-0.05	-0.10
9	6	-0.03	-0.01	0.07	0.02	0.04	0.04	0.02	0.04	0.04
10	6	-0.02	-0.04	-0.04	-0.05	-0.07	-0.01	-0.05	-0.07	-0.01
11	6	0.05	0.07	0.00	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.02
12	6	-0.03	-0.05	0.01	0.06	0.12	0.05	0.06	0.12	0.05
13	6	0.01	0.00	-0.03	-0.04	-0.08	-0.05	-0.04	-0.08	-0.05
14	6	0.01	0.03	0.03	0.01	-0.02	-0.07	0.01	-0.02	-0.07
15	6	-0.02	-0.01	0.03	0.03	0.03	-0.02	0.03	0.03	-0.02
16	6	0.01	0.02	0.01	-0.02	-0.01	0.04	-0.02	-0.01	0.03
17	6	-0.13	0.07	0.15	0.08	-0.04	-0.10	0.09	-0.05	-0.11
18	1	-0.29	-0.21	0.37	-0.09	-0.10	0.03	-0.09	-0.10	0.02
19	1	-0.16	-0.19	0.07	-0.15	-0.23	-0.01	-0.15	-0.22	-0.01
20	1	-0.07	-0.14	-0.08	0.03	0.02	-0.03	0.03	0.03	-0.03
21	1	0.00	-0.12	-0.25	0.03	-0.01	-0.09	0.03	-0.01	-0.09
22	1	0.03	0.03	-0.02	0.01	0.12	0.24	0.01	0.12	0.24
23	1	0.10	0.09	-0.13	0.02	0.05	0.05	0.02	0.05	0.05

24	1	0.10	0.15	-0.02	0.09	0.15	0.02	0.10	0.15	0.02
25	1	0.05	0.09	0.03	-0.10	-0.17	0.03	-0.10	-0.17	0.03
26	1	0.00	0.04	0.05	-0.04	-0.02	0.10	-0.03	-0.02	0.11
27	6	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01
28	1	-0.02	0.04	-0.34	0.00	0.01	0.10	0.01	0.01	0.11
29	1	0.25	-0.06	-0.13	-0.05	0.05	0.03	-0.06	0.05	0.04
30	1	-0.06	0.22	0.19	0.04	-0.10	-0.06	0.04	-0.11	-0.08
31	8	0.09	-0.03	-0.09	-0.04	0.02	0.04	-0.05	0.02	0.05
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.04	-0.07	0.12	0.04	0.07
34	6	0.00	0.00	-0.01	0.09	0.03	0.06	-0.08	-0.03	-0.05
35	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.07	0.03	0.06	0.07	-0.03
36	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03	0.00	-0.04	-0.04	0.00
37	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.06	-0.02	-0.06	-0.06	0.02
38	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.06	0.00	0.06	0.06	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.01	0.03	0.04	-0.01
40	6	0.00	0.00	0.00	0.08	0.07	0.00	-0.08	-0.06	-0.01
41	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.07	0.07	0.02	0.07	-0.07
42	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.10	-0.09	-0.03	-0.10	0.09
43	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.04	-0.02	0.01	-0.04
44	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.09	0.02	0.08	0.10	-0.02
45	6	0.00	0.00	0.00	0.10	0.08	0.00	-0.10	-0.09	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.04	-0.01	0.02	-0.04
47	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.02	-0.03	0.05	0.02	0.03
48	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	-0.04	-0.02	-0.04	0.04
49	1	0.00	-0.01	0.00	0.23	0.14	0.05	-0.23	-0.14	-0.06
50	1	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.10	-0.13	-0.01	-0.10	0.12
51	1	0.00	0.00	0.00	0.06	0.17	-0.16	-0.07	-0.17	0.15
52	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.05	0.07	-0.01	0.05	-0.07
53	1	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.06	-0.06	0.00	-0.06
54	1	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.08	-0.11	0.19	0.09	0.11
55	1	0.00	0.00	0.01	-0.12	-0.02	-0.10	0.11	0.03	0.10
56	1	0.00	0.01	0.00	-0.13	-0.21	0.12	0.12	0.21	-0.12
57	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.13	-0.13	-0.01	-0.12	0.13
58	1	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.05	-0.11	0.15	0.05	0.11

		139			140			141		
		A			A			A		
Frequencies	--	1628.9142			1631.6883			1634.4797		
Red. masses	--	6.0414			5.5992			7.6132		
Frc consts	--	9.4446			8.7831			11.9833		
IR Inten	--	19.5723			1.7639			15.8084		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.06	0.14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.05	0.01	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.01	0.04	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.01	-0.08	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.03	0.08	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.01	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.10	-0.15	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.05	0.11	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.11	-0.14	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.18	0.26	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.13	-0.17	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	-0.02	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.02	0.09	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.01	-0.09	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.09	0.07	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.03	0.04	0.16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.03	-0.02	-0.05	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.10	-0.08	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.05	-0.04	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.12	-0.16	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.01	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

22	1	0.05	-0.04	-0.24	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.04	-0.04	-0.22	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.26	-0.42	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.01	-0.02	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	-0.02	-0.11	-0.28	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.02	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	8	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.07	-0.06	-0.19	-0.07	-0.12
34	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.10	0.17	0.12	-0.03	0.17
35	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.14	-0.15	-0.04	0.05	-0.10
36	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	0.07	0.12	-0.04	0.17
37	6	0.00	0.00	0.00	-0.14	-0.15	0.04	-0.01	0.04	-0.06
38	6	0.00	0.00	0.00	0.16	0.14	-0.01	0.03	-0.02	0.05
39	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01	0.05	-0.07	0.09	-0.18
40	6	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.05	-0.11	0.08	-0.01	0.11
41	6	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.01	0.14	-0.08	0.09	-0.20
42	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.05	-0.03	-0.03	-0.16	0.16
43	6	0.00	0.00	0.00	0.13	0.12	0.00	-0.03	0.11	-0.17
44	6	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.13	0.05	0.00	-0.03	0.06
45	6	0.00	0.00	0.00	0.14	0.10	0.01	-0.05	-0.02	-0.05
46	6	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.13	0.06	0.16	0.01	0.15
47	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.03	-0.05	0.11	-0.10	0.24
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.09	-0.15	0.06	-0.23
49	1	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.01	-0.12	0.28	0.18	0.06
50	1	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.02	-0.20	-0.05	0.10	-0.18
51	1	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.21	0.10	-0.12	-0.10	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.16	-0.20	-0.04	-0.01	-0.02
53	1	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.04	-0.16	0.01	-0.03	0.05
54	1	0.00	0.00	0.00	0.21	0.16	0.03	-0.12	-0.13	0.03
55	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.12	-0.20	0.13	-0.04	0.19
56	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.10	-0.14	0.16	0.25	-0.12
57	1	0.00	0.00	0.00	0.04	0.18	-0.16	0.07	0.04	-0.02
58	1	0.00	0.00	0.00	-0.21	-0.08	-0.13	0.07	0.08	0.01

142					143			144		
A					A			A		
Frequencies	--	1640.0295			1643.2805			1646.0838		
Red. masses	--	6.5111			6.0355			5.8313		
Frc consts	--	10.3182			9.6026			9.3093		
IR Inten	--	57.7066			72.0735			10.1213		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.03	0.03	-0.07	-0.06	0.06	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.05	-0.07	0.01	0.16	0.14	-0.15	0.00	0.00	0.00
3	6	0.11	0.17	0.03	-0.16	-0.19	0.06	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.13	-0.20	-0.02	0.08	0.07	-0.08	0.00	0.00	0.00
5	6	0.11	0.18	0.04	0.05	0.13	0.11	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.06	-0.08	-0.01	-0.04	-0.14	-0.17	0.00	0.00	0.00
7	6	0.07	0.00	-0.21	0.01	0.03	0.05	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.03	0.08	0.27	-0.02	-0.01	0.06	0.00	0.00	0.00
9	6	0.09	0.04	-0.21	0.05	0.03	-0.09	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.03	0.00	0.10	-0.01	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00
11	6	0.03	-0.04	-0.19	-0.05	-0.10	-0.05	0.00	0.00	0.00
12	6	0.03	0.06	0.06	0.11	0.21	0.09	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.01	-0.03	-0.06	-0.07	-0.16	-0.15	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.06	-0.07	0.02	0.09	0.13	0.01	0.00	0.00	0.00
15	6	-0.11	-0.07	0.20	0.02	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
16	6	0.09	0.10	-0.06	-0.11	-0.11	0.08	0.00	0.00	0.00
17	6	0.04	-0.01	-0.05	-0.03	0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.01	-0.05	-0.05	-0.16	-0.06	0.27	0.00	0.00	-0.01
19	1	-0.16	-0.26	-0.03	0.12	0.26	0.14	0.00	-0.01	0.00



20	1	-0.17	-0.27	-0.02	-0.12	-0.13	0.10	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.07	-0.07	0.05	-0.04	0.06	0.25	0.00	0.00	-0.01
22	1	-0.05	-0.23	-0.34	-0.03	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.15	-0.15	0.14	-0.08	-0.07	0.11	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.04	-0.01	0.11	-0.04	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.10	-0.15	0.03	-0.16	-0.27	0.05	0.00	0.01	0.00
26	1	0.00	0.00	0.03	-0.05	0.04	0.29	0.00	0.00	-0.01
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.01	0.03	0.00	0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00
29	1	-0.02	0.01	0.01	0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
30	1	0.01	-0.04	-0.02	-0.02	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00
31	8	-0.02	0.01	0.03	0.03	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.15	0.11	0.02
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.09	0.06
35	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.11	0.19	-0.13
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.17	0.09
37	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.06	-0.05
38	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.02	0.04
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.12	-0.04
40	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.21	0.13	0.07
41	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.06	-0.03
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.10	0.14	-0.06
43	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.14	-0.13	0.01
44	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	-0.02
45	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	0.01
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.14	0.04
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.09	0.04	0.05
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.08	-0.07
49	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.22	-0.08	-0.13
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.07	-0.02
51	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.13	-0.27	0.21
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.09	-0.14	0.08
53	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.10	-0.03
54	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.31	-0.16	-0.14
55	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.11	0.06
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.20	0.18
57	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.05	-0.10	0.08
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.06	-0.04

		145			146			147		
		A			A			A		
Frequencies	--	1672.0817			1675.4160			3053.0507		
Red. masses	--	6.9585			7.1224			1.0416		
Frc consts	--	11.4626			11.7794			5.7202		
IR Inten	--	32.6029			9.9207			1.2222		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.04	-0.02	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.01	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.04	0.10	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.11	-0.22	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.06	0.20	0.22	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.08	-0.18	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.03	0.09	0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.04	-0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.08	0.14	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.08	-0.17	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.08	0.16	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.04	-0.10	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.02	0.06	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.09	0.19	0.14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.05	-0.14	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.03	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00



16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.02
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
20	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	6	-0.05	0.05	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.02	0.05
28	1	0.61	-0.28	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.51	-0.25	-0.07
29	1	0.25	-0.04	0.52	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.05
30	1	-0.27	-0.25	0.23	0.00	0.00	0.00	0.46	0.48	-0.46
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00
45	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
51	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
57	1	0.00	0.00	0.00	-0.49	-0.16	-0.58	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.32	0.53	0.00	0.00	0.00

151

152

153

		A			A			A		
Frequencies	--	3194.5877			3196.7788			3198.8647		
Red. masses	--	1.0888			1.0893			1.0911		
Frc consts	--	6.5468			6.5589			6.5784		
IR Inten	--	2.0718			1.6499			0.1805		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.02	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.02	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00



12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.03
20	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.01	-0.20
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.20	0.10
22	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.24	0.28	-0.15
23	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.32	-0.26
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.18	0.02	0.69
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.11
26	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.06	-0.03
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	6	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	6	-0.04	0.00	-0.04	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
38	6	0.00	-0.03	0.04	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	-0.02	-0.01	-0.02	0.02	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
45	6	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.03	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	-0.07	0.09	-0.01	0.28	-0.38	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.07	0.07	-0.01	-0.17	-0.17	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
51	1	-0.11	-0.01	-0.10	0.10	0.01	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.46	0.06	0.41	0.23	0.03	0.20	0.00	0.00	0.00	0.00
53	1	-0.02	0.37	-0.48	-0.01	0.20	-0.26	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	-0.04	0.05	0.00	-0.06	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00
55	1	-0.03	-0.03	0.00	0.06	0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.11	0.02	0.10	-0.06	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00
57	1	0.16	0.05	0.19	-0.27	-0.09	-0.31	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.02	-0.16	0.27	0.03	0.28	-0.46	0.00	0.00	0.00	0.00

157

158

159

		A			A			A		
Frequencies	--	3203.3514			3207.8367			3208.7006		
Red. masses	--	1.0882			1.0915			1.0918		
Frc consts	--	6.5788			6.6173			6.6229		
IR Inten	--	0.2939			6.1836			6.6718		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.02	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.04	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00



8	6	-0.04	-0.05	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.01	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	-0.14	-0.33	-0.27	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	-0.01	-0.28	0.05	0.83	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.04	0.01	0.13	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01
21	1	0.05	0.05	-0.03	0.07	0.08	-0.04	0.01	0.01	0.00
22	1	0.50	0.59	-0.30	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.06	-0.14	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.13	-0.01	-0.48	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
25	1	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.04
26	1	-0.02	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.04	0.06	-0.03
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.01	-0.04
38	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.05
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.05	0.01
51	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.02
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.52	0.07	0.46
53	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.43	0.55
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
55	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.07	-0.01
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.02
57	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		163			164			165		
		A			A			A		
Frequencies	--	3223.8432			3225.7274			3232.4428		
Red. masses	--	1.0952			1.0985			1.0986		
Frc consts	--	6.7063			6.7347			6.7631		
IR Inten	--	9.8593			14.0723			19.8424		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00

6	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.01	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.04	-0.06	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	-0.01	-0.01	-0.03	-0.07	-0.06	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00
20	1	0.01	0.00	-0.05	-0.22	0.04	0.72	0.00	0.00	0.00
21	1	0.03	0.03	-0.02	-0.39	-0.45	0.23	0.00	0.00	0.00
22	1	0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
23	1	0.01	0.02	0.02	0.03	0.06	0.04	0.00	0.00	0.00
24	1	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
25	1	0.08	0.00	-0.40	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
26	1	0.43	0.70	-0.37	0.03	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
35	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
39	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03
41	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.05	0.01
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.02
43	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03
50	1	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	0.06	-0.01
51	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.03
52	1	-0.05	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.03
53	1	0.00	0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.05
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.27	-0.34
55	1	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.57	0.60	-0.10
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.21	0.03	0.20
57	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		166			167			168		
		A			A			A		
Frequencies	--	3234.4597			3235.9394			3238.6489		
Red. masses	--	1.0986			1.0986			1.0957		
Frc consts	--	6.7713			6.7780			6.7712		
IR Inten	--	15.8221			20.8199			7.6806		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.06	-0.05
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.04





## Competitive Experiments

### Anthracene Series:

\*\*\*\*\*LOW VOLTAGE\*\*\*\*\*

#### Ag+ / 9-acetylanthracene / anthracene

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	465.3	14369	0.37	5316.5	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.259
M1 / Ag+ / M2	507.4	51255	0.40	20502.0	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	2.674
Ag+ / 2M1	549.5	137041	0.40	54816.4	[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	10.311
H2O / Ag+ / M2	305.1	13958	0.45	6281.1		
H2O / Ag+ / M1	347.2	50567	0.34	17192.8	H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	2.737
Ag+ / M2	287.1	74161	0.36	26698.0		
Ag+ / M1	329.2	506835	0.38	192597.3	[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	7.214

#### Ag+ / anthracene / 9-nitroanthracene

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	555.3	3204	0.48	1537.9	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.323
M1 / Ag+ / M2	510.3	12225	0.39	4767.8	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	4.430
Ag+ / 2M1	465.3	51510	0.41	21119.1	[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	13.732
H2O / Ag+ / M2	350.1	6184	0.35	2164.4		
H2O / Ag+ / M1	305.1	23662	0.34	8045.1	H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	3.717
Ag+ / M2	332.1	36631	0.38	13919.8		
Ag+ / M1	287.1	131212	0.37	48548.4	[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	3.488

#### Ag+ / 9-acetylanthracene / 9-nitroanthracene

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	555.36	3570	0.10	357.0	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.924
M1 / Ag+ / M2	552.41	6440	0.06	386.4	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	45.660
Ag+ / 2M1	549.46	92858	0.19	17643.0	[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	49.420
H2O / Ag+ / M2	350.13	7399	0.13	961.9		
H2O / Ag+ / M1	347.18	19600	0.15	2940.0	H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	3.057
Ag+ / M2	332.13	24365	0.14	3411.1		
Ag+ / M1	329.18	214137	0.14	29979.2	[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	8.789

**Ag+ / 9-methylanthracene / 9-nitroanthracene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	555.36	4834	0.08	386.7	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.114
M1 / Ag+ / M2	524.39	17901	0.19	3401.2	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	7.295
Ag+ / 2M1	493.22	137839	0.18	24811.0	[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	64.158
H2O / Ag+ / M2	350.13	13024	0.15	1953.6		
H2O / Ag+ / M1	319.16	54158	0.16	8665.3	H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	4.436
Ag+ / M2	332.13	19801	0.19	3762.2		
Ag+ / M1	301.16	66662	0.18	11999.2	[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	3.189

**Ag+ / 9-acetylanthracene / 9-methylanthracene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	493.22	30281	0.28	8478.7	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.525
M1 / Ag+ / M2	521.44	85080	0.19	16165.2	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	1.555
Ag+ / 2M1	549.46	125701	0.20	25140.2	[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	2.965
H2O / Ag+ / M2	319.16	28628	0.11	3149.1		
H2O / Ag+ / M1	347.18	30356	0.19	5767.6	H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	1.832
Ag+ / M2	301.16	31702	0.18	5706.4		
Ag+ / M1	329.18	336221	0.17	57157.6	[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	10.016

**Ag+ / 9-acetylanthracene / 9,10-dimethylanthracene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	521.48	8020	0.08	641.6	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.066
M1 / Ag+ / M2	535.47	48861	0.20	9772.2	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	1.430
Ag+ / 2M1	549.46	73525	0.19	13969.8	[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	21.773
H2O / Ag+ / M2	333.21	6109	0.03	183.3		
H2O / Ag+ / M1	347.20	39348	0.15	5902.2	H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	32.205
Ag+ / M2	315.19	13225	0.14	1851.5		
Ag+ / M1	329.18	172963	0.16	27674.1	[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	14.947

**Ag+ / 9-methylanthracene / 9,10-dimethylanthracene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	521.48	48419	0.19	9199.6	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.727
M1 / Ag+ / M2	507.45	66619	0.19	12657.6	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	0.403
Ag+ / 2M1	493.22	36454	0.14	5103.6		
					[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	0.555
H2O / Ag+ / M2	333.19	41480	0.14	5807.2		
H2O / Ag+ / M1	319.16	34317	0.15	5147.6		
					H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	0.886
Ag+ / M2	315.19	32613	0.16	5218.1		
Ag+ / M1	301.16	42377	0.17	7204.1		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	1.381

**Ag+ / 9,10-dimethylanthracene / 9-nitroanthracene \*due to overlap, 107 peaks used for first order areas**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	555.36	8795	0.25	2198.8	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.322
M1 / Ag+ / M2	538.42	28437	0.24	6824.9	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	3.104
Ag+ / 2M1	521.48	110195	0.19	20937.1		
					[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	9.522
H2O / Ag+ / M2	350.15	10918	0.12	1310.2		
H2O / Ag+ / M1	333.21	43583	0.16	6973.3		
					H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	5.322
Ag+ / M2	332.13	43337	0.17	7367.3		
Ag+ / M1	315.19	92682	0.12	11121.8		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	1.510

**\*\*\*\*\*HIGH VOLTAGE\*\*\*\*\*****Ag+ / 9-acetylanthracene / anthracene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / M2	287.1	44813	0.35	15684.55		
Ag+ / M1	329.2	798546	0.36	287476.56		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	18.329

**Ag+ / anthracene / 9-nitroanthracene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / M2	332.1	23433	0.41	9607.53		
Ag+ / M1	287.1	134543	0.36	48435.48		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	5.041

**Ag+ / 9-acetylanthracene / 9-nitroanthracene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / M2	332.13	12392	0.12	1487.04		
Ag+ / M1	329.18	258992	0.16	41438.72		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	27.867

**Ag+ / 9-methylanthracene / 9-nitroanthracene \*due to overlap, 107 peaks used for areas**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / M2	332.13	11888	0.24	2853.1		
Ag+ / M1	301.16	92861	0.15	13929.2		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	4.882

**Ag+ / 9-acetylanthracene / 9-methylanthracene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / M2	301.16	37967	0.17	6454.4		
Ag+ / M1	329.18	707588	0.15	106138.2		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	16.444

**Ag+ / 9-methylanthracene / 9,10-dimethylanthracene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / M2	315.19	40603	0.15	6090.5		
Ag+ / M1	301.16	40397	0.15	6059.6		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	0.995

**Ag+ / 9-acetylanthracene / 9,10-dimethylanthracene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / M2	315.19	28675	0.06	1720.5		
Ag+ / M1	329.18	487542	0.16	78006.7		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	45.340

**Ag+ / 9,10-dimethylanthracene / 9-nitroanthracene \*due to overlap, 107 peaks used for first order areas**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / M2	332.13	34703	0.16	5552.5		
Ag+ / M1	315.19	208200	0.16	33312.0		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	5.999

**Phenanthrene Series**

\*\*\*\*\*LOW VOLTAGE\*\*\*\*\*

**Ag+ / 9-acetylphenanthrene / phenanthrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	465.36	12083	0.19	2295.8	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.419
M1 / Ag+ / M2	507.40	34226	0.16	5476.2	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	3.588
Ag+ / 2M1	549.44	98238	0.20	19647.6		
					[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	8.558
H2O / Ag+ / M2	305.15	11297	0.16	1807.5		
H2O / Ag+ / M1	347.19	11079	0.15	1661.9		
					H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	0.919
Ag+ / M2	287.13	30610	0.17	5203.7		
Ag+ / M1	329.17	308095	0.15	46214.3		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	<b>8.881</b>

**Ag+ / phenanthrene / 3-methylphenanthrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	493.42	83287	0.20	16657.4	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.601
M1 / Ag+ / M2	479.39	162984	0.17	27707.28	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	0.647
Ag+ / 2M1	465.36	94406	0.19	17937.14		
					[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	1.077
H2O / Ag+ / M2	319.16	123374	0.15	18506.1		
H2O / Ag+ / M1	305.13	113438	0.15	17015.7		
					H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	0.919
Ag+ / M2	301.16	103593	0.19	19682.67		
Ag+ / M1	287.13	136844	0.17	23263.48		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	<b>1.182</b>

**Ag+ / 9-acetylphenanthrene / 3-methylphenanthrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	493.42	24969	0.21	5243.49	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.335
M1 / Ag+ / M2	521.43	78276	0.20	15655.2	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	1.643
Ag+ / 2M1	549.44	128638	0.20	25727.6		
					[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	4.907
H2O / Ag+ / M2	319.16	14743	0.21	3096.03		
H2O / Ag+ / M1	347.17	27902	0.14	3906.28		
					H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	1.262
Ag+ / M2	301.16	17698	0.17	3008.66		
Ag+ / M1	329.17	340529	0.17	57889.93		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	19.241

**Ag+ / phenanthrene / 2,7-di-t-butylphenanthrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	689.76	167423	0.20	33484.6	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	1.547
M1 / Ag+ / M2	577.61	103100	0.21	21651.0	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	0.231
Ag+ / 2M1	465.36	23846	0.21	5007.7		
					[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	0.150
H2O / Ag+ / M2	417.40	48110	0.14	6735.4		
H2O / Ag+ / M1	305.15	27841	0.17	4733.0		
					H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	0.703
Ag+ / M2	399.38	9454	0.16	1512.6		
Ag+ / M1	287.13	53600	0.16	8576.0		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	5.670

\*\*\*\*\*HIGH VOLTAGE\*\*\*\*\*

**Ag+ / 9-acetylphenanthrene / phenanthrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / M2	287.13	22753	0.18	4095.5		
Ag+ / M1	329.17	613967	0.15	92095.1		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	22.487

**Ag+ / phenanthrene / 3-methylphenanthrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / M2	301.16	179337	0.19	34074.0		
Ag+ / M1	287.13	194060	0.17	32990.2		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	0.968

**Ag+ / 9-acetylphenanthrene / 3-methylphenanthrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / M2	301.16	12827	0.13	1667.5		
Ag+ / M1	329.17	960470	0.14	134465.8		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	80.639

**Ag+ / phenanthrene / 2,7-di-t-butylphenanthrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / M2	399.38	16219	0.08	1297.5		
Ag+ / M1	287.13	49629	0.15	7444.4		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	5.737

## Pyrene Series:

\*\*\*\*\*LOW VOLTAGE\*\*\*\*\*

### Ag+ / 1-acetylpyrene / pyrene

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	513.42	37423	0.14	5239.2	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.404
M1 / Ag+ / M2	555.46	72028	0.18	12965.0	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	1.854
Ag+ / 2M1	597.50	120214	0.20	24042.8	[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	4.589
H2O / Ag+ / M2	329.16	37033	0.11	4073.6		
H2O / Ag+ / M1	371.20	14136	0.14	1979.0	H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	0.486
Ag+ / M2	311.16	32553	0.18	5859.5		
Ag+ / M1	353.20	180316	0.18	32456.9	[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	5.539

### Ag+ / 1-(1-pyrenyl)ethanol / pyrene

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	513.42	97613	0.19	18546.5	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.567
M1 / Ag+ / M2	557.48	148582	0.22	32688.0	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	0.870
Ag+ / 2M1	601.54	167371	0.17	28453.1	[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	1.534
H2O / Ag+ / M2	329.18	48082	0.12	5769.8		
H2O / Ag+ / M1	373.24	11357	0.15	1703.6	H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	0.295
Ag+ / M2	311.16	45953	0.16	7352.5		
Ag+ / M1	355.22	116421	0.17	19791.6	[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	2.692

### Ag+ / pyrene / 2-hydroxypyrene \*due to overlap, 107 peaks used for first order areas

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	545.42	27528	0.20	5505.6	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.532
M1 / Ag+ / M2	529.42	54478	0.19	10350.8	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	1.516
Ag+ / 2M1	513.42	98072	0.16	15691.5	[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	2.850
H2O / Ag+ / M2	345.16	40304	0.16	6448.6		
H2O / Ag+ / M1	329.16	74597	0.13	9697.6	H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	1.504
Ag+ / M2	327.16	35945	0.15	5391.8		
Ag+ / M1	311.16	98027	0.14	13723.8	[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	2.545

**Ag+ / 1-(1-pyrenyl)ethanol / 2-hydroxypyrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	545.42	20803	0.16	3328.5	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.278
M1 / Ag+ / M2	573.48	56914	0.21	11951.9	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	1.441
Ag+ / 2M1	601.54	81992	0.21	17218.3		
					[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	5.173
H2O / Ag+ / M2	345.16	41691	0.17	7087.5		
H2O / Ag+ / M1	373.22	11063	0.09	995.7		
					H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	0.140
Ag+ / M2	327.16	35416	0.11	3895.8		
Ag+ / M1	355.22	113927	0.17	19367.6		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	4.971

**Ag+ / 1-acetylpyrene / 2-hydroxypyrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	545.42	14985	0.21	3146.9	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.361
M1 / Ag+ / M2	570.49	43553	0.20	8710.6	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	3.041
Ag+ / 2M1	597.50	126156	0.21	26492.8		
					[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	8.419
H2O / Ag+ / M2	345.16	37060	0.16	5929.6		
H2O / Ag+ / M1	371.20	15659	0.11	1722.5		
					H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	0.290
Ag+ / M2	327.16	25917	0.13	3369.2		
Ag+ / M1	353.20	153647	0.18	27656.5		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	8.209

**Ag+ / 1-acetylpyrene / 1-(1-pyrenyl)ethanol \*due to overlap, 107 peaks were compared with 109 peaks**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	601.54	115226	0.20	23045.2	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	-
M1 / Ag+ / M2	599.52	-	-	-	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	-
Ag+ / 2M1	597.50	140513	0.22	30912.9		
					[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	1.341
H2O / Ag+ / M2	373.22	13811	0.07	966.8		
H2O / Ag+ / M1	371.22	29183	0.20	5836.6		
					H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	6.037
Ag+ / M2	355.22	91532	0.19	17391.1		
Ag+ / M1	353.20	178000	0.15	26700.0		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	1.535

\*M1 / Ag+ / M2 peaks were completely lost due to overlap

**Ag+ / pyrene / 1-nitropyrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	603.42	31832	0.18	5729.8	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.676
M1 / Ag+ / M2	558.42	44624	0.19	8478.6	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	2.877
Ag+ / 2M1	513.42	135531	0.18	24395.6		
					[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	4.258
H2O / Ag+ / M2	374.18	17700	0.15	2655.0		
H2O / Ag+ / M1	329.16	76195	0.13	9905.4		
					H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	3.731
Ag+ / M2	356.16	27202	0.15	4080.3		
Ag+ / M1	311.16	90729	0.17	15423.9		
					[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	3.780



**Ag+ / 2-hydroxypyrene / 1-nitropyrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	603.42	16836	0.20	3367.2	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.371
M1 / Ag+ / M2	574.42	45344	0.20	9068.8	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	1.910
Ag+ / 2M1	545.42	82474	0.21	17319.5		
					[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	5.144
H2O / Ag+ / M2	374.18	11414	0.12	1369.7		
H2O / Ag+ / M1	345.18	46808	0.16	7489.3	H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	5.468
Ag+ / M2	356.16	16425	0.15	2463.8		
Ag+ / M1	327.16	30846	0.08	2467.7	[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	1.002

**Ag+ / 1-acetylpyrene / 1-nitropyrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	603.42	14136	0.08	1130.9	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.283
M1 / Ag+ / M2	600.46	21030	0.19	3995.7	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	12.670
Ag+ / 2M1	597.50	281261	0.18	50627.0		
					[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	44.768
H2O / Ag+ / M2	374.18	6203	0.05	310.2		
H2O / Ag+ / M1	371.22	13500	0.17	2295.0	H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	7.400
Ag+ / M2	356.16	9226	0.21	1937.5		
Ag+ / M1	353.20	182591	0.18	32866.4	[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	16.964

**Ag+ / 1,2,3,6,7,8-hexahydroxyrene / pyrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / 2M2	513.42	28063	0.18	5051.3	[Ag+ / 2M2] : [M1 / Ag+ / M2]	0.221
M1 / Ag+ / M2	519.48	126732	0.18	22811.8	[Ag+ / 2M1] : [M1 / Ag+ / M2]	1.704
Ag+ / 2M1	525.54	194320	0.20	38864.0		
					[Ag+ / 2M1] : [Ag+ / 2M2]	7.694
H2O / Ag+ / M2	329.16	51773	0.13	6730.5		
H2O / Ag+ / M1	335.22	102283	0.15	15342.5	H2O ([Ag+ / M1] : [Ag+ / M2])	2.280
Ag+ / M2	311.16	47667	0.17	8103.4		
Ag+ / M1	317.22	111346	0.16	17815.4	[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	2.199

\*\*\*\*\*HIGH VOLTAGE\*\*\*\*\*

**Ag+ / 1-acetylpyrene / pyrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / M2	311.16	27448	0.21	5764.08		
Ag+ / M1	353.20	633638	0.16	101382.08	[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	17.589

**Ag+ / 1-(1-pyrenyl)ethanol / pyrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area		
Ag+ / M2	311.16	110836	0.14	15517.04		
Ag+ / M1	355.22	424256	0.17	72123.52	[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2]	4.648

**Ag+ / pyrene / 2-hydroxypyrene** \*due to overlap, 107 peaks used for first order areas

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area
Ag+ / M2	327.16	50388	0.17	8565.96
Ag+ / M1	311.16	155653	0.15	23347.95

[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2] **2.726**

**Ag+ / 1-(1-pyrenyl)ethanol / 2-hydroxypyrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area
Ag+ / M2	327.16	40145	0.13	5218.85
Ag+ / M1	355.22	210830	0.18	37949.4

[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2] **7.272**

**Ag+ / 1-acetylpyrene / 2-hydroxypyrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area
Ag+ / M2	327.16	19658	0.19	3735.02
Ag+ / M1	353.20	41925	0.15	6288.75

[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2] **1.684**

**Ag+ / 1-acetylpyrene / 1-(1-pyrenyl)ethanol** \*due to overlap, 107 peaks were compared with 109 peaks

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area
Ag+ / M2	355.22	272909	0.18	49123.62
Ag+ / M1	353.20	538295	0.18	96893.1

[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2] **1.972**

**Ag+ / pyrene / 1-nitropyrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area
Ag+ / M2	356.16	35963	0.14	5034.82
Ag+ / M1	311.16	134653	0.15	20197.95

[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2] **4.012**

**Ag+ / 2-hydroxypyrene / 1-nitropyrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area
Ag+ / M2	356.16	11207	0.20	2241.4
Ag+ / M1	327.16	29317	0.16	4690.72

[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2] **2.093**

**Ag+ / 1-acetylpyrene / 1-nitropyrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area
Ag+ / M2	356.16	13293	0.14	1861.02
Ag+ / M1	353.20	690977	0.16	110556.32

[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2] **59.406**

**Ag+ / 1,2,3,6,7,8-hexahydroxyrene / pyrene**

Complex	m/z (109)	Intensity	Width	Area
Ag+ / M2	311.16	50687	0.15	7603.05
Ag+ / M1	317.22	257322	0.17	43744.74

[Ag+ / M1] : [Ag+ / M2] **5.754**