

## Supplementary Materials

### Spectroscopic and structural study of a new conducting pyrazolium salt

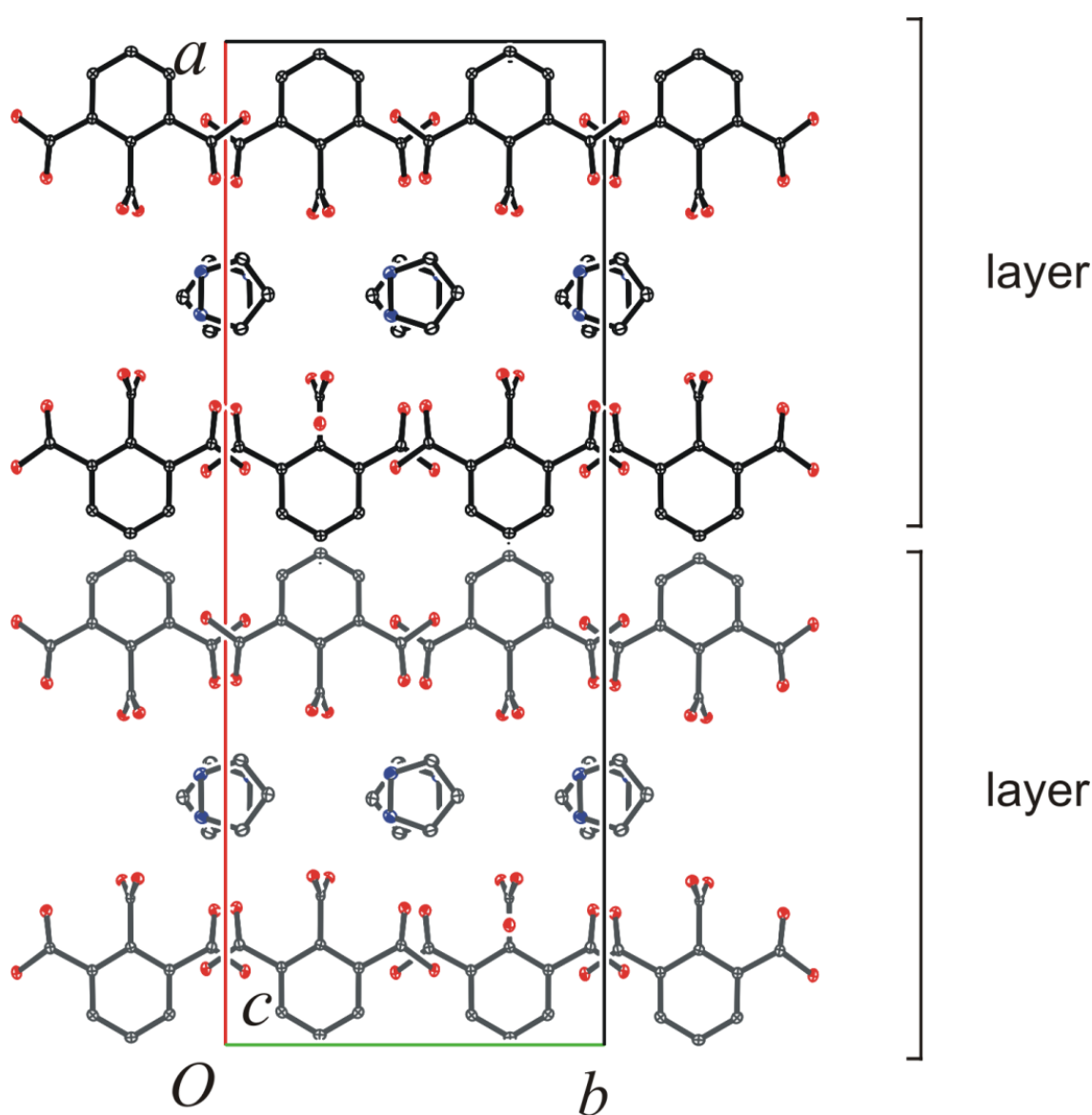
Sylvia Zięba <sup>1</sup>, Agata Piotrowska <sup>2</sup>, Adam Mizera <sup>1</sup>, Paweł Ławniczak <sup>1</sup>, Karolina H. Markiewicz <sup>3</sup>, Andrzej Gzella <sup>4</sup>, Alina T. Dubis <sup>3</sup> and Andrzej Łapiński <sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup> Institute of Molecular Physics Polish Academy of Sciences, Smoluchowskiego 17, 60-179 Poznań, Poland

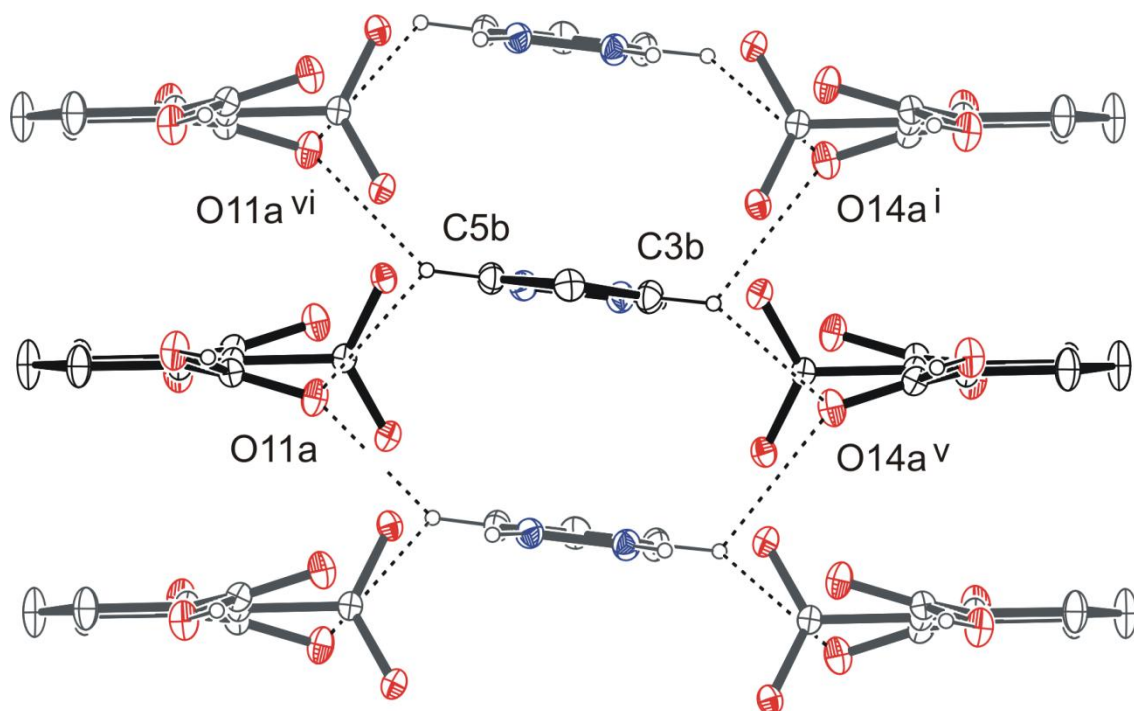
<sup>2</sup> Poznań University of Technology, Piotrowo 3, 60-965 Poznań Poland

<sup>3</sup> Faculty of Chemistry University of Białystok, Ciołkowskiego 1K, 15-245 Białystok, Poland

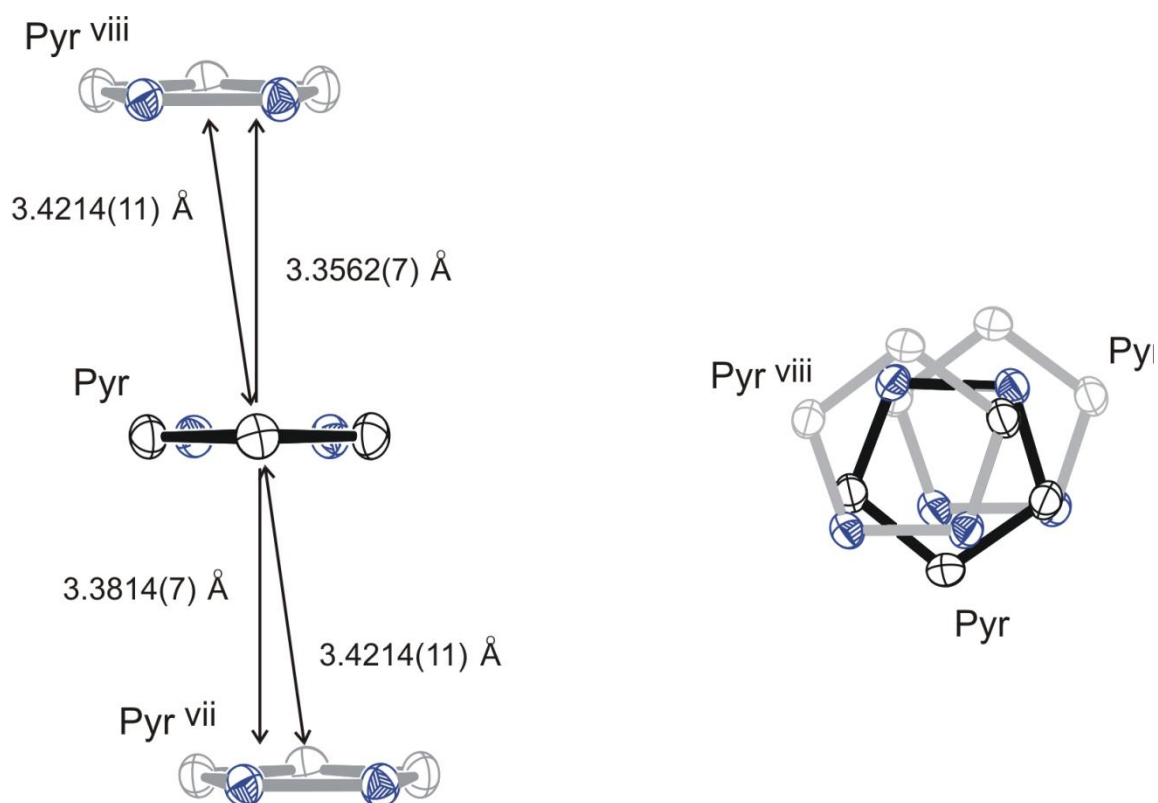
<sup>4</sup> Department of Organic Chemistry Poznań University of Medical Sciences, Grunwaldzka 6, 60-780 Poznań, Poland



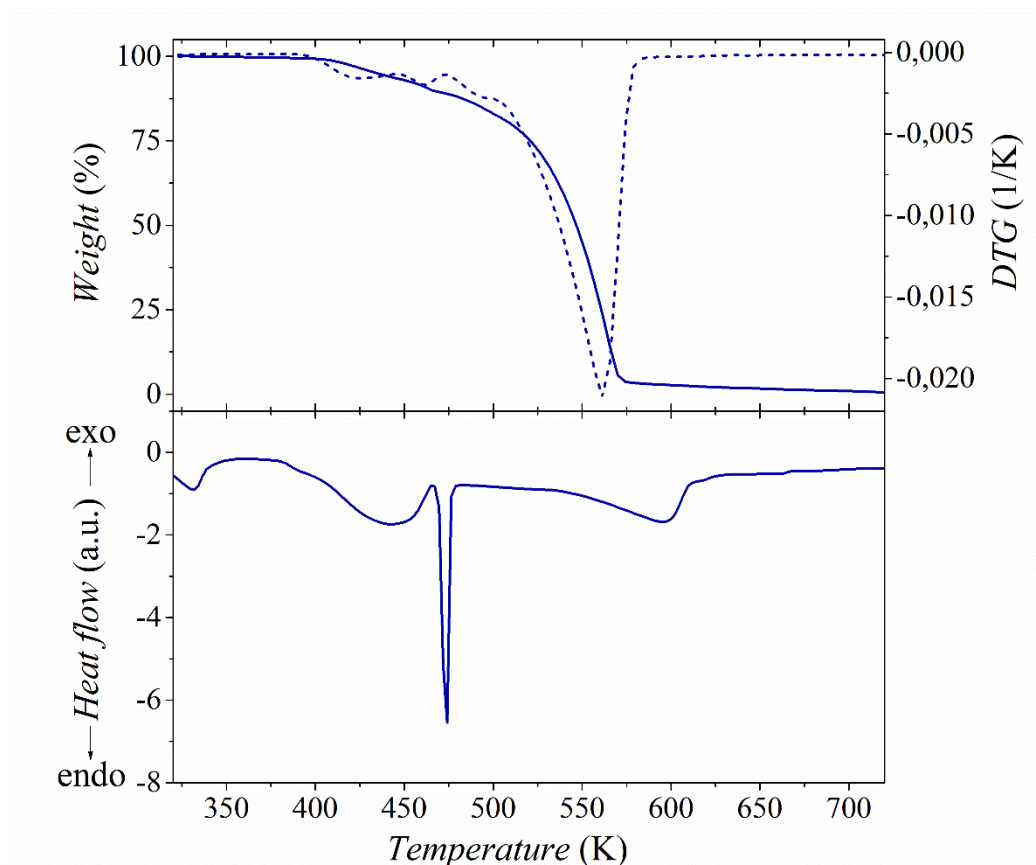
**Figure S1.** The molecular packing in the crystal PyrHemxH<sub>2</sub>O, showing sheets (layers) parallel to the *bc* plane. The H atoms not involved in hydrogen bonds have been omitted for clarity.



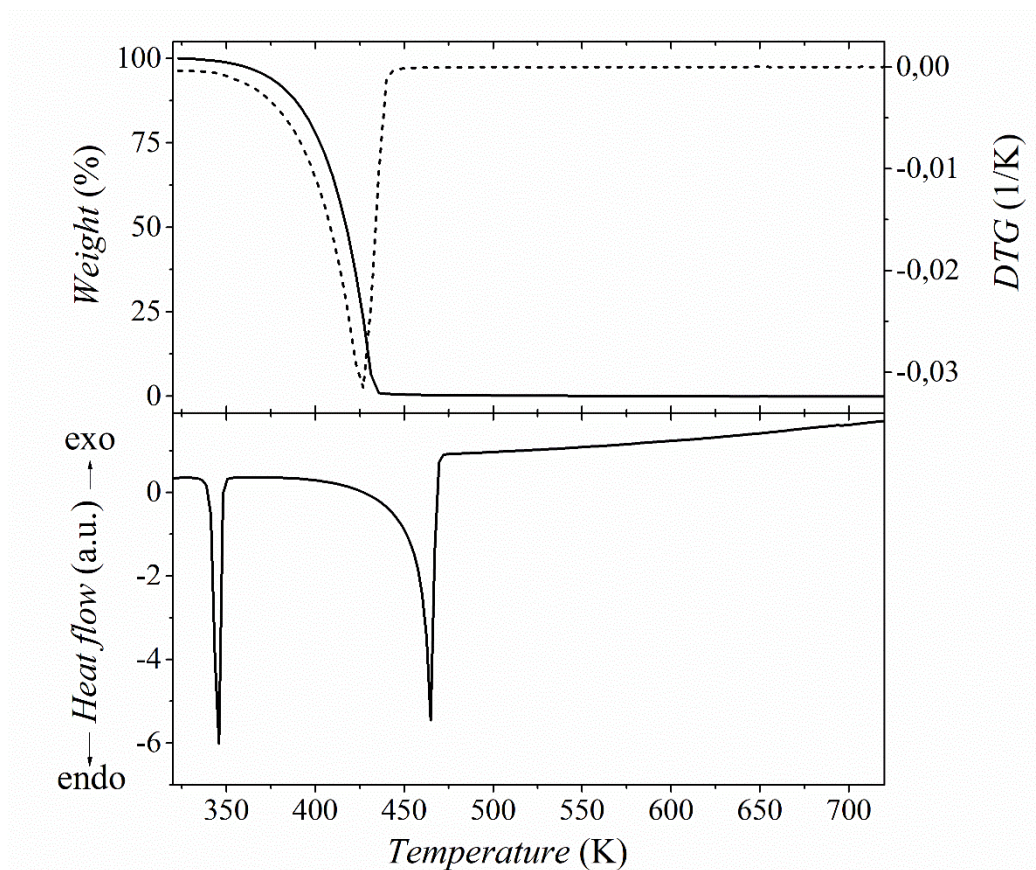
**Figure S2.** Non-classic C-H...O hydrogen bonds linking types into layers parallel to the *bc* plane. The symmetry codes are explained in Table 1



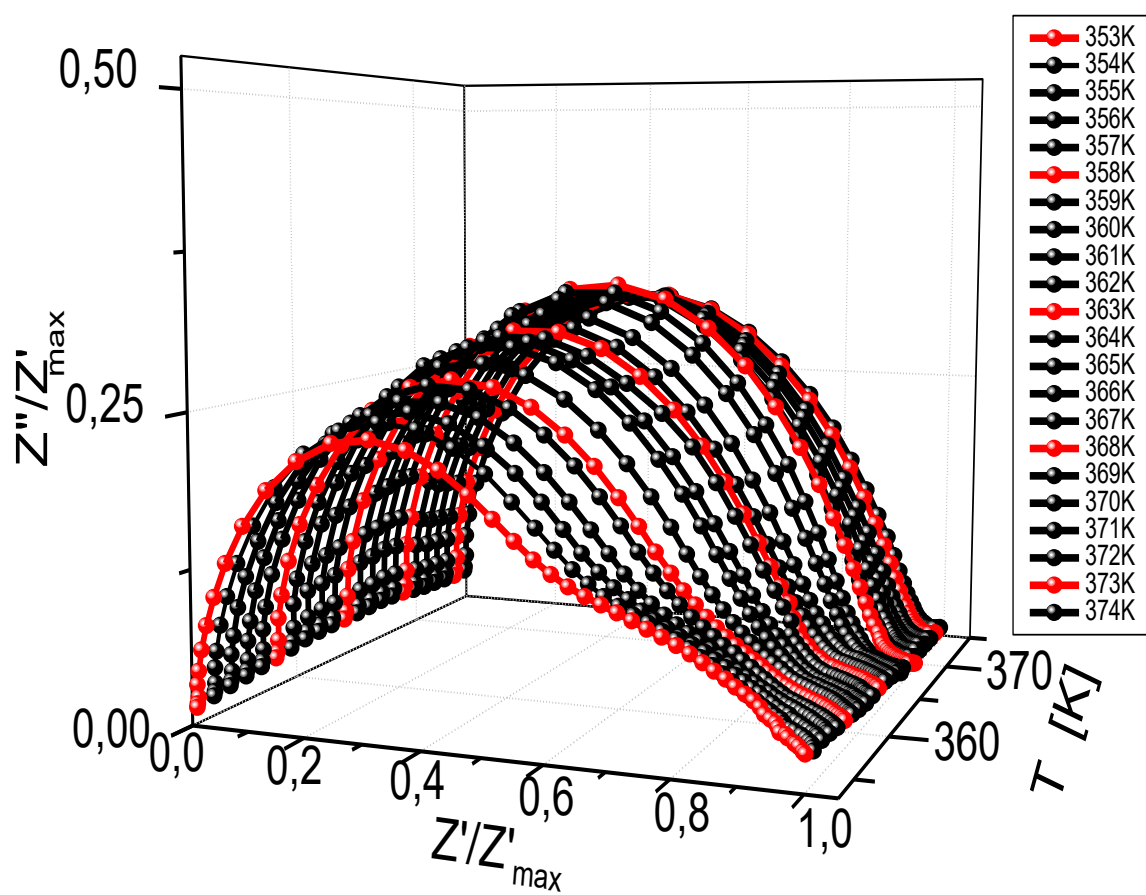
**Figure S3.**  $\pi \cdots \pi$  interactions between pyrazolium rings. The molecules are shown in two orthogonal projections. Hydrogen atoms have been omitted for clarity.



**Figure S4.** TGA/DTG curves (top panel) and DSC curves (bottom panel) of Hem×H<sub>2</sub>O.



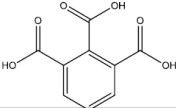
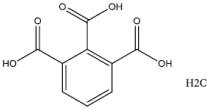
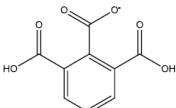
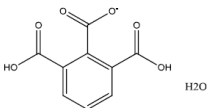
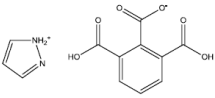


**Figure S5.** TGA/DTG curves (top panel) and DSC curves (bottom panel) of Pyr.



**Figure S6.** Scaled complex impedance plots  $-Z''(Z')$  plot for the measured pyrazolium hemimellitate.

**Table S1.** Experimental and calculated (WB97XD/6-311++G(d,p)) IR stretching and bending frequencies of the O-H, N-H, and C=O groups.

	Selected experimental and calculated IR frequencies [cm <sup>-1</sup> ]											
	Exp.	Calc.*	Exp.	Calc.*	Exp.	Calc.*	Exp.	Calc.*	Exp.	Calc.*	Exp.	Calc.*
	ν <sub>N-H</sub>		ν <sub>O-H</sub>		ν <sub>C=O or COO<sup>-</sup></sub>		δ <sub>O-H</sub>		γ <sub>O-H</sub>		γ <sub>N-H</sub>	
	3425	3548										527
		3501 3491										548
				3716 3683 3673		1808 1779 1771						
			3400- 2500	3306 3583 3677 3684 3799	1727 1705 1701 1697 1685	1735 1771 1785		1552	898	889		
				3695		1750 1747 1670						
				3395 3143		1747 1731 1668		1623	898	939		
		3327		3687 3686 2897		1780 1767 1723				964		

\* scaling factor of 0.957 was used

## Supplementary data – Theoretical Calculation of vibrational modes (wb97xd\_6311++G\_dp)

pyrazole PYR

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 --		551.0021					639.8957					696.5277				
Red. masses --		1.7096					2.3982					2.8376				
Frc consts --		0.3058					0.5786					0.8111				
IR Inten --		65.7180					0.0009					23.9088				
Raman Activ --		0.3548					0.0017					0.2578				
Depolar (P) --		0.7489					0.7491					0.7500				
Depolar (U) --		0.8564					0.8566					0.8571				
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z						
1	6	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	0.08						
2	1	0.00	0.00	0.22	0.00	0.00	0.53	0.00	0.00	0.16						
3	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	0.04						
4	1	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	-0.28	0.00	0.00	0.26						
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.14	0.00	0.00	-0.21						
6	1	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.47	0.00	0.00	-0.33						
7	7	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.14						
8	7	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.28						
9	1	0.00	0.00	0.94	0.00	0.00	-0.54	0.00	0.00	-0.80						
4					5					6						
A					A					A						
Frequencies --		769.7786					862.9843					906.9295				
Red. masses --		1.2012					1.2435					1.3550				
Frc consts --		0.4194					0.5457					0.6567				
IR Inten --		104.4112					8.1462					2.3796				
Raman Activ --		0.1196					0.2676					0.3782				
Depolar (P) --		0.7492					0.7497					0.7498				
Depolar (U) --		0.8566					0.8569					0.8570				
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z						
1	6	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.06						
2	1	0.00	0.00	-0.61	0.00	0.00	0.62	0.00	0.00	-0.38						
3	6	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.12						
4	1	0.00	0.00	-0.73	0.00	0.00	-0.39	0.00	0.00	0.57						
5	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	0.12						
6	1	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	-0.65	0.00	0.00	-0.71						
7	7	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01						
8	7	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01						
9	1	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.02						
7					8					9						
A					A					A						
Frequencies --		930.8108					946.8630					1056.2637				
Red. masses --		5.6542					3.6028					1.4588				
Frc consts --		2.8863					1.9031					0.9589				
IR Inten --		9.4544					3.5992					6.2431				
Raman Activ --		3.3064					1.1856					1.5429				
Depolar (P) --		0.7341					0.6833					0.5783				
Depolar (U) --		0.8467					0.8119					0.7328				
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z						
1	6	0.22	0.12	0.00	0.13	0.23	0.00	-0.02	0.02	0.00						
2	1	-0.04	0.39	0.00	0.40	-0.03	0.00	0.03	-0.02	0.00						
3	6	0.17	-0.35	0.00	0.12	-0.04	0.00	0.06	0.08	0.00						
4	1	0.34	-0.24	0.00	-0.44	-0.43	0.00	0.71	0.53	0.00						

5	6	-0.32	-0.15	0.00	0.10	-0.06	0.00	-0.04	-0.11	0.00
6	1	-0.29	-0.25	0.00	-0.08	0.41	0.00	0.05	-0.36	0.00
7	7	0.02	0.10	0.00	-0.22	0.11	0.00	-0.07	0.06	0.00
8	7	-0.07	0.25	0.00	-0.06	-0.23	0.00	0.01	-0.08	0.00
9	1	-0.17	-0.30	0.00	-0.18	0.19	0.00	-0.01	0.20	0.00
10				11				12		
A				A				A		
Frequencies --		1071.6262			1159.9395			1205.3788		
Red. masses --		1.5564			1.8191			2.9900		
Frc consts --		1.0531			1.4421			2.5595		
IR Inten --		44.6039			21.6112			2.6461		
Raman Activ --		1.4128			7.5022			28.2985		
Depolar (P) --		0.6358			0.0325			0.0797		
Depolar (U) --		0.7774			0.0630			0.1476		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	-0.04	0.00	-0.04	-0.15	0.00	0.10	0.01	0.00
2	1	0.58	-0.57	0.00	0.13	-0.35	0.00	0.52	-0.38	0.00
3	6	-0.05	0.03	0.00	0.01	-0.13	0.00	-0.10	0.10	0.00
4	1	-0.22	-0.08	0.00	0.27	0.02	0.00	-0.29	0.00	0.00
5	6	0.00	-0.03	0.00	-0.02	0.07	0.00	-0.20	-0.04	0.00
6	1	0.15	-0.44	0.00	-0.22	0.61	0.00	-0.23	-0.05	0.00
7	7	-0.11	0.00	0.00	-0.04	0.12	0.00	0.24	0.07	0.00
8	7	0.08	0.12	0.00	0.07	0.01	0.00	-0.10	-0.13	0.00
9	1	-0.13	-0.03	0.00	0.14	0.53	0.00	0.39	0.36	0.00
13				14				15		
A				A				A		
Frequencies --		1297.4867			1413.2508			1445.1333		
Red. masses --		1.6875			2.7127			4.3175		
Frc consts --		1.6738			3.1921			5.3125		
IR Inten --		4.0680			3.0272			18.1955		
Raman Activ --		11.5773			10.5409			28.0619		
Depolar (P) --		0.0440			0.1020			0.5317		
Depolar (U) --		0.0842			0.1851			0.6942		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.10	0.00	-0.11	0.07	0.00	0.21	0.03	0.00
2	1	0.19	-0.08	0.00	0.43	-0.47	0.00	0.05	0.24	0.00
3	6	-0.09	0.03	0.00	-0.06	-0.11	0.00	-0.29	-0.20	0.00
4	1	0.18	0.24	0.00	0.39	0.17	0.00	0.40	0.28	0.00
5	6	-0.07	-0.06	0.00	0.21	-0.07	0.00	0.02	0.31	0.00
6	1	-0.34	0.62	0.00	0.15	0.14	0.00	0.33	-0.46	0.00
7	7	0.01	-0.07	0.00	0.11	0.08	0.00	-0.02	0.05	0.00
8	7	0.15	-0.02	0.00	-0.20	0.06	0.00	0.03	-0.16	0.00
9	1	-0.19	-0.52	0.00	-0.14	-0.45	0.00	-0.16	-0.25	0.00
16				17				18		
A				A				A		
Frequencies --		1513.4885			1592.1268			3261.7151		
Red. masses --		2.7071			3.0669			1.0927		
Frc consts --		3.6535			4.5804			6.8492		
IR Inten --		7.1197			7.0465			2.7825		
Raman Activ --		3.0395			2.4205			84.7030		
Depolar (P) --		0.7487			0.0813			0.5784		
Depolar (U) --		0.8563			0.1505			0.7329		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.10	0.23	0.00	0.23	-0.04	0.00	0.01	0.01	0.00
2	1	0.31	-0.16	0.00	-0.14	0.39	0.00	-0.10	-0.11	0.00
3	6	0.02	-0.11	0.00	-0.20	0.03	0.00	0.03	-0.03	0.00
4	1	0.24	0.01	0.00	0.08	0.27	0.00	-0.27	0.40	0.00
5	6	-0.02	0.09	0.00	0.14	-0.18	0.00	-0.07	-0.03	0.00
6	1	0.07	-0.12	0.00	-0.07	0.40	0.00	0.80	0.30	0.00
7	7	0.00	-0.24	0.00	-0.06	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00

8	7	0.01	0.04	0.00	-0.09	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00
9	1	0.45	0.67	0.00	0.24	0.58	0.00	0.01	0.00	0.00
		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies --		3276.3668			3294.5996			3708.9206		
Red. masses --		1.0964			1.1076			1.0821		
Frc consts --		6.9346			7.0837			8.7699		
IR Inten --		1.6933			0.1013			91.5755		
Raman Activ --		43.2397			132.4981			86.0580		
Depolar (P) --		0.3770			0.1323			0.2211		
Depolar (U) --		0.5476			0.2336			0.3621		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.04	0.00	-0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	-0.39	-0.39	0.00	0.58	0.57	0.00	-0.01	-0.01	0.00
3	6	0.03	-0.05	0.00	0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00
4	1	-0.38	0.56	0.00	-0.31	0.45	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.04	0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
6	1	-0.44	-0.17	0.00	-0.15	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00
7	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.03	0.00
8	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	1	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.90	0.42	0.00

## 2. PYRH+

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 --		453.2490			573.0164			621.2772		
Red. masses --		1.5759			1.3541			2.0727		
Frc consts --		0.1907			0.2620			0.4714		
IR Inten --		0.0024			231.0918			8.2680		
Raman Activ --		0.2505			0.0021			0.0065		
Depolar (P) --		0.7493			0.5953			0.7424		
Depolar (U) --		0.8567			0.7463			0.8522		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.15
2	1	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	0.47
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.23
4	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	-0.27
5	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.15
6	1	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	0.47
7	7	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.02
8	7	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.02
9	1	0.00	0.00	-0.67	0.00	0.00	0.67	0.00	0.00	-0.44
10	1	0.00	0.00	0.66	0.00	0.00	0.67	0.00	0.00	-0.43
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		635.6544			800.3666			916.0982		
Red. masses --		2.2808			1.1782			1.2833		
Frc consts --		0.5430			0.4447			0.6345		
IR Inten --		0.0010			101.9502			0.0006		
Raman Activ --		0.4315			0.0130			0.0818		
Depolar (P) --		0.7500			0.7439			0.7495		
Depolar (U) --		0.8571			0.8531			0.8568		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z



1	6	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.11
2	1	0.00	0.00	0.21	0.00	0.00	0.42	0.00	0.00	0.69
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00
4	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.79	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.11
6	1	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	0.42	0.00	0.00	-0.69
7	7	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01
8	7	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01
9	1	0.00	0.00	-0.63	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	-0.13
10	1	0.00	0.00	0.64	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.13
		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies --		917.0146			948.5643			949.3146		
Red. masses --		5.7193			3.7439			1.3863		
Frc consts --		2.8336			1.9848			0.7361		
IR Inten --		2.8855			0.9460			0.0567		
Raman Activ --		3.9288			0.6556			0.0882		
Depolar (P) --		0.7148			0.7500			0.7493		
Depolar (U) --		0.8337			0.8571			0.8567		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.33	0.00	0.12	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.09
2	1	-0.15	-0.31	0.01	-0.34	0.25	0.00	0.00	0.00	0.51
3	6	0.39	0.00	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	0.00	0.13
4	1	0.41	0.00	0.00	0.00	-0.47	0.00	0.00	0.00	-0.66
5	6	-0.01	0.33	0.00	-0.12	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.09
6	1	-0.15	0.31	-0.01	0.34	0.25	-0.01	0.00	0.00	0.52
7	7	-0.16	-0.02	0.00	0.20	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.01
8	7	-0.17	0.02	0.00	-0.20	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.01
9	1	0.02	0.30	0.00	0.32	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02
10	1	0.02	-0.30	0.00	-0.32	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02
		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies --		1081.9582			1085.5749			1138.1878		
Red. masses --		1.2973			1.4253			1.5495		
Frc consts --		0.8948			0.9896			1.1826		
IR Inten --		16.3727			47.1092			47.2144		
Raman Activ --		2.0657			0.3760			0.1733		
Depolar (P) --		0.7500			0.7486			0.7498		
Depolar (U) --		0.8571			0.8562			0.8570		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.06	0.00	0.04	-0.04	0.00	-0.12	-0.04	0.00
2	1	0.09	-0.08	0.00	0.65	-0.17	0.00	-0.56	0.04	0.00
3	6	0.00	0.07	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.00
4	1	0.00	0.90	0.00	-0.10	0.01	0.00	0.00	-0.14	0.00
5	6	0.00	-0.06	0.00	0.04	0.04	0.00	0.12	-0.04	0.00
6	1	-0.11	-0.09	0.00	0.65	0.17	0.00	0.55	0.04	0.00
7	7	0.08	-0.02	0.00	-0.04	0.09	0.00	0.04	0.05	0.00
8	7	-0.07	-0.02	0.00	-0.04	-0.09	0.00	-0.04	0.05	0.00
9	1	0.19	0.16	0.00	0.00	0.17	0.00	0.21	0.33	0.00
10	1	-0.19	0.16	0.00	-0.01	-0.17	0.00	-0.22	0.33	0.00
		13			14			15		
		A			A			A		
Frequencies --		1212.8127			1268.5138			1351.7687		
Red. masses --		5.0425			1.3069			1.3790		
Frc consts --		4.3700			1.2390			1.4846		
IR Inten --		6.4626			0.2188			8.8563		
Raman Activ --		44.7853			9.6005			0.4346		
Depolar (P) --		0.0562			0.3121			0.7500		
Depolar (U) --		0.1064			0.4757			0.8571		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	6	0.06	0.25	0.00	-0.03	-0.04	0.00	-0.10	0.00	0.00
2	1	-0.21	0.35	0.00	-0.27	0.01	0.00	0.47	-0.13	0.00
3	6	0.26	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.10	0.00
4	1	0.31	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.46	0.00
5	6	0.06	-0.25	0.00	-0.03	0.04	0.00	0.10	0.00	0.00
6	1	-0.21	-0.36	0.00	-0.28	-0.01	0.00	-0.47	-0.13	0.00
7	7	-0.15	0.22	0.00	0.06	0.06	0.00	0.01	-0.04	0.00
8	7	-0.15	-0.22	0.00	0.06	-0.06	0.00	-0.01	-0.04	0.00
9	1	-0.13	0.31	0.00	0.35	0.54	0.00	0.22	0.31	0.00
10	1	-0.13	-0.31	0.00	0.35	-0.53	0.00	-0.22	0.31	0.00

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	1460.0448	1530.9064	1582.6399
Red. masses --	4.1161	2.6415	3.8994
Frc consts --	5.1697	3.6475	5.7546
IR Inten --	71.6132	13.0320	0.8406
Raman Activ --	20.0942	3.9957	0.6933
Depolar (P) --	0.7500	0.1230	0.1188
Depolar (U) --	0.8571	0.2190	0.2124

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.17	-0.19	0.00	-0.05	-0.10	0.00	0.30	-0.08	0.00
2	1	-0.40	-0.11	0.00	-0.24	-0.08	0.00	-0.54	0.09	0.00
3	6	0.00	0.35	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00
4	1	0.00	-0.44	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.26	0.00	0.00
5	6	-0.17	-0.19	0.00	-0.05	0.10	0.00	0.30	0.08	0.00
6	1	0.40	-0.11	0.00	-0.24	0.08	0.00	-0.54	-0.09	0.00
7	7	-0.11	0.02	0.00	0.09	0.21	0.00	-0.11	0.00	0.00
8	7	0.11	0.02	0.00	0.09	-0.21	0.00	-0.11	0.00	0.00
9	1	0.05	0.30	0.00	-0.34	-0.50	0.00	-0.18	-0.08	0.00
10	1	-0.05	0.30	0.00	-0.35	0.50	0.00	-0.18	0.08	0.00

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	1606.4810	3284.8434	3288.3133
Red. masses --	2.2404	1.0977	1.1025
Frc consts --	3.4066	6.9783	7.0238
IR Inten --	33.4609	0.1471	38.7585
Raman Activ --	0.8277	90.0564	8.2995
Depolar (P) --	0.7500	0.4286	0.7459
Depolar (U) --	0.8571	0.6000	0.8544

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.07	-0.09	0.00	0.01	0.06	0.00	-0.01	-0.07	0.00
2	1	0.02	-0.14	0.00	-0.13	-0.61	0.00	0.15	0.71	0.00
3	6	0.00	0.13	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
4	1	0.00	-0.27	0.00	0.39	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00
5	6	0.08	-0.09	0.00	0.01	-0.06	0.00	0.01	-0.06	0.00
6	1	-0.02	-0.14	0.00	-0.14	0.66	0.00	-0.14	0.67	0.00
7	7	0.15	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	7	-0.15	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	1	-0.24	-0.58	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
10	1	0.24	-0.58	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	3309.3330	3648.0377	3659.3064
Red. masses --	1.1081	1.0853	1.0861
Frc consts --	7.1498	8.5094	8.5689
IR Inten --	26.9738	151.8665	347.0569
Raman Activ --	97.4513	27.7952	98.7144
Depolar (P) --	0.1005	0.7494	0.1151
Depolar (U) --	0.1826	0.8568	0.2065

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	0.00	0.00	0.00
2	1	0.05	0.27	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
3	6	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	1	0.92	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	1	0.05	-0.27	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
7	7	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.03	0.00	0.05	-0.03	0.00
8	7	0.00	0.00	0.00	0.05	0.03	0.00	0.05	0.03	0.00
9	1	0.01	-0.01	0.00	0.60	-0.36	0.00	-0.61	0.37	0.00
10	1	0.01	0.01	0.00	-0.61	-0.37	0.00	-0.59	-0.37	0.00

## HEM

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 --		36.0310			50.8398			69.3695		
Red. masses --		9.7882			7.4072			9.2713		
Frc consts --		0.0075			0.0113			0.0263		
IR Inten --		3.6050			1.6587			4.1927		
Raman Activ --		1.0499			0.8085			0.4063		
Depolar (P) --		0.7457			0.7370			0.7481		
Depolar (U) --		0.8543			0.8486			0.8559		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.19	0.00	-0.01	-0.16
2	6	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.12	0.00	-0.02	-0.10
3	6	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.01	-0.05	0.01	-0.01	-0.03
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.06	0.01	-0.01	-0.03
5	6	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.08	0.01	-0.01	-0.01
6	6	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.15	0.00	-0.01	-0.08
7	1	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.25	0.00	-0.02	-0.23
8	1	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.01	-0.12	0.00	-0.02	-0.11
9	1	0.01	-0.01	0.04	0.01	-0.02	-0.15	0.00	0.00	-0.09
10	6	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.03	-0.04	-0.02	-0.16
11	8	0.24	0.00	-0.12	0.00	0.03	-0.01	-0.01	-0.17	-0.27
12	8	-0.25	0.00	0.09	0.08	-0.02	-0.04	-0.17	0.14	-0.21
13	1	-0.25	0.00	0.08	0.11	-0.02	-0.03	-0.22	0.12	-0.34
14	6	0.00	0.01	0.03	0.00	0.01	0.05	0.02	0.00	0.11
15	8	-0.01	0.12	0.34	0.04	-0.05	-0.12	0.06	0.05	0.26
16	8	0.03	-0.12	-0.29	-0.05	0.09	0.37	0.00	-0.05	0.09
17	1	0.02	-0.09	-0.21	-0.03	0.08	0.42	0.01	-0.03	0.21
18	6	0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.03	0.03	0.01	0.14
19	8	0.10	0.23	-0.22	0.14	0.13	-0.07	0.08	-0.15	0.33
20	8	-0.10	-0.21	0.22	-0.17	-0.16	0.29	0.00	0.22	0.08
21	1	-0.19	-0.39	0.32	-0.30	-0.26	0.30	-0.03	0.35	-0.05
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		117.7184			136.8653			151.8997		
Red. masses --		10.4229			11.8515			6.2447		
Frc consts --		0.0851			0.1308			0.0849		
IR Inten --		2.6360			2.1048			2.3020		
Raman Activ --		1.5538			1.2329			3.3107		
Depolar (P) --		0.7188			0.7399			0.7436		
Depolar (U) --		0.8364			0.8505			0.8530		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.04	0.06	-0.04	0.08	0.00	-0.01	-0.03	-0.21

2	6	0.01	-0.05	0.00	-0.05	0.07	-0.07	-0.01	-0.04	-0.23
3	6	-0.01	-0.05	-0.06	-0.04	0.07	-0.07	0.00	-0.02	0.04
4	6	0.00	-0.07	-0.04	-0.03	0.10	-0.04	0.01	0.00	0.25
5	6	0.00	-0.05	0.03	-0.04	0.10	0.03	0.01	0.01	0.26
6	6	0.00	-0.05	0.07	-0.02	0.10	0.06	-0.01	0.00	0.08
7	1	0.01	-0.04	0.10	-0.05	0.08	0.01	-0.03	-0.04	-0.44
8	1	0.01	-0.05	0.00	-0.05	0.07	-0.11	-0.02	-0.05	-0.47
9	1	0.00	-0.05	0.11	-0.03	0.11	0.13	-0.01	0.00	0.08
10	6	0.04	-0.06	-0.01	0.15	0.12	-0.06	0.01	-0.01	0.10
11	8	0.40	0.03	-0.12	0.40	0.21	-0.13	0.04	-0.19	-0.01
12	8	-0.34	-0.17	0.21	0.10	0.05	0.00	-0.03	0.18	0.01
13	1	-0.33	-0.16	0.29	0.34	0.07	-0.03	-0.03	0.16	-0.17
14	6	-0.07	0.03	-0.09	0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01
15	8	-0.17	-0.03	-0.27	0.14	-0.01	-0.02	-0.04	-0.04	-0.08
16	8	-0.02	0.21	0.12	-0.06	-0.09	0.04	0.00	0.02	0.04
17	1	-0.07	0.27	0.08	-0.01	-0.15	0.08	-0.01	0.02	-0.01
18	6	0.04	0.03	0.04	-0.15	-0.12	0.08	0.00	0.03	0.06
19	8	0.10	0.00	0.09	-0.40	-0.28	0.17	-0.14	0.13	-0.09
20	8	0.04	0.20	-0.04	-0.04	-0.28	0.02	0.16	-0.05	-0.07
21	1	0.01	0.17	-0.04	0.11	-0.10	-0.04	0.29	-0.12	0.06

		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies --		165.1556			171.8812			267.5933		
Red. masses --		5.9677			6.0388			5.8185		
Frc consts --		0.0959			0.1051			0.2455		
IR Inten --		3.6620			2.2733			5.1453		
Raman Activ --		1.3650			0.7248			0.6681		
Depolar (P) --		0.7376			0.6384			0.7493		
Depolar (U) --		0.8490			0.7793			0.8567		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.03	0.07	-0.01	-0.04	0.06	-0.18	0.00	0.00
2	6	0.01	0.02	-0.17	-0.01	-0.05	-0.20	-0.08	-0.15	0.02
3	6	0.03	0.02	-0.20	-0.03	-0.05	-0.20	0.09	-0.15	-0.04
4	6	0.03	0.03	-0.14	-0.03	-0.07	-0.11	0.16	0.01	-0.11
5	6	0.04	0.03	0.04	-0.03	-0.05	0.08	0.09	0.16	-0.08
6	6	0.03	0.04	0.20	-0.02	-0.04	0.24	-0.08	0.16	-0.04
7	1	0.03	0.04	0.16	0.00	-0.03	0.14	-0.34	0.00	0.04
8	1	0.01	0.01	-0.25	-0.01	-0.05	-0.31	-0.13	-0.27	0.08
9	1	0.02	0.06	0.40	-0.01	-0.03	0.45	-0.16	0.29	-0.02
10	6	-0.10	0.03	-0.03	0.05	-0.06	-0.07	0.09	0.02	-0.05
11	8	-0.18	0.09	0.04	0.02	0.02	0.00	-0.09	0.01	0.03
12	8	-0.23	-0.05	0.06	0.22	-0.17	-0.08	-0.05	0.02	0.00
13	1	-0.44	-0.05	0.22	0.37	-0.15	-0.04	-0.36	0.01	0.12
14	6	0.09	-0.05	-0.06	-0.07	0.06	0.00	0.05	-0.09	0.01
15	8	0.24	-0.05	-0.03	-0.12	0.15	0.21	-0.18	-0.06	0.05
16	8	-0.02	-0.14	0.11	-0.05	0.12	0.05	0.19	0.13	0.01
17	1	0.06	-0.20	0.25	-0.09	0.23	0.26	0.07	0.31	0.06
18	6	0.03	0.02	0.02	0.00	0.01	0.02	0.06	0.08	0.00
19	8	-0.02	0.04	-0.02	-0.01	0.05	-0.03	-0.08	-0.01	0.05
20	8	0.08	-0.02	-0.02	0.04	0.05	-0.05	0.10	-0.14	0.06
21	1	0.12	-0.05	0.04	0.06	-0.04	0.03	0.21	0.05	-0.03

		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies --		291.5103			329.7312			367.3092		
Red. masses --		10.7013			5.8229			6.7701		
Frc consts --		0.5358			0.3730			0.5382		
IR Inten --		0.9453			8.4404			5.7670		
Raman Activ --		2.4055			0.8410			2.3919		
Depolar (P) --		0.5569			0.0892			0.1566		
Depolar (U) --		0.7154			0.1638			0.2708		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.11	0.04	-0.03	-0.01	0.19	0.12	-0.09	-0.12
2	6	-0.07	-0.04	-0.03	-0.02	-0.06	-0.17	0.10	-0.06	-0.07
3	6	-0.13	-0.03	-0.05	0.03	-0.04	-0.13	0.03	-0.06	0.17
4	6	-0.03	0.10	-0.01	0.04	-0.01	0.08	-0.01	0.00	-0.04
5	6	0.10	-0.06	-0.03	-0.01	0.00	-0.17	-0.01	-0.06	0.05
6	6	0.04	-0.06	0.02	-0.02	0.01	0.08	0.12	-0.08	0.18
7	1	0.01	-0.11	0.11	-0.05	0.00	0.43	0.13	-0.11	-0.30
8	1	-0.03	0.04	-0.06	-0.03	-0.09	-0.33	0.13	-0.01	-0.20
9	1	0.00	0.01	0.06	-0.03	0.04	0.18	0.15	-0.12	0.32
10	6	-0.02	0.21	0.02	0.06	0.01	0.16	-0.02	0.10	-0.09
11	8	0.02	0.28	0.04	0.05	-0.14	0.08	-0.02	0.27	0.00
12	8	0.00	0.29	-0.02	0.01	0.25	0.07	-0.03	0.06	-0.06
13	1	0.00	0.28	-0.15	-0.07	0.21	-0.17	-0.08	0.06	-0.03
14	6	-0.19	-0.09	-0.01	0.04	-0.01	-0.06	0.05	-0.13	0.13
15	8	-0.25	-0.07	0.03	0.04	0.01	0.00	-0.12	-0.16	0.02
16	8	-0.25	-0.13	0.03	0.06	0.05	0.02	0.22	0.02	-0.01
17	1	-0.20	-0.17	0.12	0.03	0.12	0.11	0.10	0.12	-0.25
18	6	0.19	-0.12	-0.02	-0.05	-0.04	-0.15	-0.10	-0.04	-0.01
19	8	0.32	-0.11	0.01	0.07	-0.12	-0.04	-0.07	0.00	-0.05
20	8	0.22	-0.11	-0.04	-0.23	0.05	-0.02	-0.19	0.14	-0.02
21	1	0.26	-0.13	0.00	-0.40	0.09	-0.15	-0.36	-0.11	0.08

13

14

15

A

A

A

Frequencies -- 396.6048 421.5011 498.4035

Red. masses -- 6.5824 5.0677 1.1473

Frc consts -- 0.6100 0.5305 0.1679

IR Inten -- 4.9527 8.4168 84.9252

Raman Activ -- 2.7665 3.3556 0.6255

Depolar (P) -- 0.7473 0.2139 0.3633

Depolar (U) -- 0.8554 0.3524 0.5330

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.23	0.00	-0.06	0.04	0.14	-0.05	0.02	-0.01	0.02
2	6	-0.23	0.05	-0.06	0.06	0.08	-0.12	0.01	0.00	-0.01
3	6	-0.03	0.08	0.17	0.01	0.07	0.22	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.09	0.01	0.07	0.05	0.05	0.00	-0.01	-0.01	0.02
5	6	-0.05	-0.07	0.01	0.05	0.13	-0.13	0.00	-0.02	0.02
6	6	-0.23	-0.04	0.13	0.06	0.17	0.17	0.01	-0.03	0.00
7	1	-0.15	0.00	-0.18	0.00	0.13	-0.14	0.03	-0.01	0.01
8	1	-0.27	-0.04	-0.22	0.05	0.07	-0.37	0.02	0.01	-0.04
9	1	-0.27	0.04	0.23	0.06	0.19	0.36	0.00	-0.02	-0.07
10	6	-0.12	0.01	-0.02	0.05	-0.04	-0.03	-0.02	0.00	0.00
11	8	0.01	0.07	-0.04	-0.03	-0.12	-0.04	0.00	0.02	0.00
12	8	-0.01	-0.07	-0.02	0.01	-0.13	0.03	-0.01	0.00	-0.01
13	1	0.30	-0.04	-0.06	-0.08	-0.12	0.21	0.09	0.00	-0.05
14	6	0.10	0.07	0.08	-0.07	0.02	0.12	0.00	-0.01	0.00
15	8	0.17	0.03	-0.03	-0.13	-0.04	-0.04	0.00	-0.01	0.00
16	8	0.18	0.12	-0.03	-0.11	-0.09	0.00	0.01	0.00	0.00
17	1	0.11	0.14	-0.33	-0.03	-0.30	-0.32	0.00	0.02	0.01
18	6	0.06	-0.09	-0.05	0.04	0.04	-0.11	0.00	0.02	0.00
19	8	0.22	-0.10	0.00	0.07	-0.07	0.02	0.00	0.03	-0.02
20	8	0.05	-0.08	-0.05	-0.04	-0.05	0.01	-0.02	-0.05	0.04
21	1	0.07	-0.05	-0.06	-0.04	0.16	-0.17	0.17	0.79	-0.56

16

17

18

A

A

A

Frequencies -- 521.2878 565.7509 579.1314

Red. masses -- 2.7003 2.0629 1.6520

Frc consts -- 0.4323 0.3890 0.3264

IR Inten -- 15.3017 50.8517 54.4733

Raman Activ -- 0.8765 3.4419 1.3656

Depolar (P) --	0.2826	0.3475	0.6327							
Depolar (U) --	0.4406	0.5157	0.7750							
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	0.04	0.08	0.10	0.00	0.06	-0.06	-0.01	-0.03	-0.09
2	6	0.01	0.10	-0.09	-0.01	0.06	0.07	0.03	-0.06	0.08
3	6	-0.03	0.05	-0.06	0.00	0.03	-0.04	0.03	-0.04	0.02
4	6	-0.07	0.04	0.02	0.00	0.05	0.06	0.04	-0.02	-0.06
5	6	-0.03	0.02	-0.06	0.01	0.04	0.12	0.03	0.02	-0.04
6	6	0.02	0.01	-0.09	0.01	0.06	0.04	0.01	0.03	0.08
7	1	0.09	0.09	0.29	-0.01	0.06	-0.21	-0.07	-0.04	-0.18
8	1	0.03	0.14	-0.12	-0.01	0.05	0.11	0.01	-0.09	0.16
9	1	0.05	-0.04	-0.09	0.00	0.06	-0.06	0.00	0.06	0.19
10	6	-0.13	0.00	0.04	0.00	0.02	-0.01	-0.03	-0.01	0.03
11	8	0.00	-0.03	-0.04	-0.01	-0.02	-0.03	-0.01	0.00	0.03
12	8	-0.03	-0.04	0.03	0.01	-0.04	0.02	-0.07	0.03	0.03
13	1	0.78	0.00	-0.21	0.00	-0.03	0.13	0.80	0.05	-0.40
14	6	0.02	-0.10	0.03	0.02	-0.07	-0.09	0.00	0.03	-0.02
15	8	-0.09	-0.11	0.03	-0.04	-0.03	0.02	0.02	0.03	-0.01
16	8	0.12	-0.02	0.02	0.04	-0.03	-0.03	-0.04	0.00	-0.01
17	1	0.03	0.10	-0.03	-0.04	0.32	0.84	-0.01	0.00	0.15
18	6	0.00	0.03	0.03	-0.01	-0.06	-0.03	0.01	0.03	-0.03
19	8	-0.01	0.03	0.03	0.07	-0.05	-0.02	-0.01	-0.01	0.00
20	8	0.06	-0.01	0.00	-0.06	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.01
21	1	0.10	-0.15	0.14	-0.11	0.02	-0.08	-0.04	-0.01	0.01

19

20

21

A

A

A

Frequencies --	593.4339	620.1620	650.2438
Red. masses --	4.0425	1.9521	4.5722
Frc consts --	0.8388	0.4423	1.1390
IR Inten --	9.6504	57.6246	52.9399
Raman Activ --	1.4982	1.1518	1.6954
Depolar (P) --	0.1365	0.7469	0.6599
Depolar (U) --	0.2402	0.8551	0.7951

Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	-0.02	-0.06	0.16	0.02	-0.02	0.03	0.03	-0.19	-0.02
2	6	0.02	-0.14	-0.11	0.01	0.00	-0.05	-0.05	-0.06	0.02
3	6	0.06	-0.07	0.10	-0.01	0.01	0.15	-0.16	-0.03	0.01
4	6	0.09	0.02	0.25	-0.03	-0.04	0.00	-0.04	0.14	-0.02
5	6	0.08	0.05	0.09	-0.03	-0.03	-0.15	0.04	0.04	-0.07
6	6	0.04	0.06	-0.12	-0.01	-0.05	0.00	0.13	0.01	0.02
7	1	-0.15	-0.07	0.15	0.05	-0.01	0.08	-0.03	-0.19	0.01
8	1	-0.01	-0.20	-0.45	0.01	0.00	-0.20	0.04	0.10	0.05
9	1	-0.01	0.11	-0.45	0.01	-0.07	0.12	0.08	0.11	0.12
10	6	-0.04	0.04	-0.09	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.16	0.00
11	8	-0.05	0.11	-0.06	0.02	0.03	0.03	-0.06	-0.10	-0.13
12	8	-0.05	-0.11	-0.04	0.00	0.01	-0.03	0.06	-0.02	0.13
13	1	0.39	-0.06	0.02	-0.20	-0.01	-0.05	0.14	0.04	0.52
14	6	-0.01	0.04	-0.05	-0.01	0.02	0.02	-0.13	-0.07	0.02
15	8	0.04	0.07	-0.01	0.03	0.00	-0.03	0.17	-0.09	0.04
16	8	-0.07	0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.08	-0.03	0.14	-0.06
17	1	-0.01	-0.05	0.12	-0.08	0.33	0.82	-0.29	0.49	-0.13
18	6	0.04	0.00	-0.05	0.01	0.07	0.00	0.01	0.00	0.01
19	8	-0.02	-0.04	-0.02	-0.04	0.04	0.03	-0.03	0.01	-0.01
20	8	-0.04	0.03	0.02	0.06	-0.01	0.03	0.01	0.02	0.02
21	1	-0.20	-0.14	0.08	0.12	-0.03	0.08	0.01	0.06	-0.02

22

23

24

A

A

A

Frequencies --	663.5443	725.8286	737.0709
Red. masses --	6.0002	4.9317	6.0663
Frc consts --	1.5565	1.5308	1.9417

IR Inten	--	50.1226		61.1692		8.6291
Raman Activ	--	1.4252		17.9031		3.2206
Depolar (P)	--	0.1449		0.0452		0.0257
Depolar (U)	--	0.2531		0.0865		0.0501

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	0.12	0.00	0.00	0.09	-0.02	-0.03	0.07	0.11
2	6	0.17	-0.12	0.01	-0.03	0.10	0.03	-0.05	0.05	-0.11
3	6	-0.07	-0.12	-0.01	-0.06	0.02	-0.06	-0.01	0.04	0.09
4	6	-0.08	-0.09	0.05	0.00	-0.03	0.06	0.06	0.01	-0.25
5	6	-0.18	0.11	0.05	0.09	-0.01	0.03	0.04	-0.01	0.17
6	6	0.05	0.16	-0.01	0.00	0.02	0.03	-0.02	0.02	-0.11
7	1	-0.18	0.12	-0.04	0.07	0.09	-0.13	0.02	0.08	0.16
8	1	0.18	-0.11	-0.02	-0.01	0.14	0.02	-0.07	0.02	-0.18
9	1	0.14	0.01	-0.09	-0.02	0.04	-0.09	-0.04	0.05	-0.26
10	6	0.02	-0.10	-0.01	-0.03	-0.14	0.04	0.28	-0.03	-0.09
11	8	0.03	0.06	0.09	0.06	0.04	0.11	-0.05	-0.04	0.09
12	8	-0.05	0.00	-0.09	-0.04	-0.03	-0.13	-0.09	0.03	0.04
13	1	-0.17	-0.04	-0.30	-0.23	-0.08	-0.40	0.35	0.02	-0.33
14	6	-0.12	-0.07	0.00	-0.11	-0.11	-0.02	-0.06	0.03	0.22
15	8	0.14	-0.08	0.04	0.08	-0.11	0.06	0.05	-0.07	-0.04
16	8	-0.04	0.12	-0.03	-0.05	0.10	-0.02	-0.04	0.03	-0.09
17	1	-0.24	0.34	-0.27	-0.28	0.35	-0.27	-0.16	0.29	0.23
18	6	-0.17	0.06	0.00	0.22	0.04	-0.14	-0.03	-0.23	0.17
19	8	0.18	0.05	0.12	-0.11	-0.12	-0.09	0.02	0.00	-0.10
20	8	-0.03	-0.14	-0.15	0.06	0.09	0.16	-0.01	0.06	-0.02
21	1	0.32	-0.11	0.02	-0.38	-0.02	0.00	-0.09	0.10	-0.10

25

A

26

A

27

A

Frequencies	--	772.9378		796.5451		801.4289
Red. masses	--	3.1258		4.3993		2.7506
Frc consts	--	1.1003		1.6446		1.0409
IR Inten	--	57.6221		35.2196		28.0627
Raman Activ	--	1.4994		0.9628		0.9992
Depolar (P)	--	0.1530		0.1079		0.7496
Depolar (U)	--	0.2654		0.1947		0.8569

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	-0.03	0.07	0.02	-0.04	-0.06	0.00	0.04	-0.11
2	6	-0.05	0.09	0.04	0.01	0.01	-0.06	-0.01	0.04	-0.02
3	6	-0.01	0.05	0.04	-0.01	0.00	-0.14	0.00	0.01	0.01
4	6	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.02	0.07	0.03	0.00	0.20
5	6	-0.02	-0.04	0.00	-0.01	-0.02	0.15	-0.01	-0.03	-0.12
6	6	-0.04	-0.12	0.04	-0.05	-0.09	-0.02	-0.04	-0.03	-0.02
7	1	0.21	-0.06	-0.51	0.12	-0.01	0.49	0.09	0.08	0.55
8	1	-0.04	0.12	-0.46	0.04	0.06	0.58	-0.01	0.05	0.39
9	1	-0.02	-0.20	-0.39	-0.03	-0.11	0.12	-0.01	-0.01	0.58
10	6	0.22	0.02	-0.09	0.09	0.03	-0.06	0.18	0.01	-0.10
11	8	-0.06	-0.01	0.02	-0.04	0.01	-0.02	-0.05	0.03	0.02
12	8	-0.05	0.01	0.05	-0.02	0.00	0.03	-0.06	-0.03	-0.01
13	1	0.21	0.02	-0.05	0.11	0.02	0.08	0.13	-0.01	-0.03
14	6	0.01	-0.07	-0.15	-0.02	0.10	0.28	0.00	-0.05	-0.10
15	8	0.00	0.00	0.05	0.00	-0.03	-0.08	0.00	-0.01	0.04
16	8	0.00	0.02	0.04	0.01	-0.03	-0.07	-0.02	0.02	0.02
17	1	-0.01	-0.02	-0.14	-0.01	0.07	0.18	-0.03	0.01	-0.10
18	6	0.00	0.16	-0.10	0.06	0.23	-0.21	-0.03	-0.07	0.08
19	8	0.01	0.01	0.08	0.00	-0.04	0.08	0.00	0.03	-0.02
20	8	-0.02	-0.05	-0.02	-0.04	-0.06	0.00	0.01	0.01	-0.01
21	1	0.06	-0.12	0.09	-0.06	-0.12	0.03	0.06	0.07	-0.02

28

A

29

A

30

A

Frequencies	--	808.4555		859.2699		903.4019
-------------	----	----------	--	----------	--	----------

Red. masses --	5.2266	3.7505	7.5643
Frc consts --	2.0127	1.6316	3.6373
IR Inten --	3.6265	3.3289	14.5839
Raman Activ --	2.2530	0.9744	1.7075
Depolar (P) --	0.1817	0.6181	0.7485
Depolar (U) --	0.3076	0.7640	0.8562

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.30	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	0.02	0.00
2	6	0.23	-0.07	0.01	0.00	0.01	-0.10	-0.08	0.13	0.02
3	6	0.10	-0.10	0.02	0.03	0.01	0.24	0.27	0.06	-0.06
4	6	0.00	-0.12	-0.03	0.00	0.00	-0.19	0.32	0.01	0.03
5	6	-0.08	-0.10	-0.01	0.03	0.01	0.20	0.27	-0.06	-0.05
6	6	-0.23	-0.08	0.01	-0.01	-0.02	-0.12	-0.09	-0.13	0.02
7	1	-0.02	0.30	-0.15	0.04	0.04	0.73	0.37	0.02	-0.11
8	1	0.10	-0.32	-0.11	0.01	0.02	0.25	-0.19	-0.07	-0.06
9	1	-0.09	-0.31	-0.04	0.00	0.02	0.38	-0.18	0.01	0.00
10	6	-0.03	0.15	-0.03	-0.08	0.00	0.05	-0.20	0.00	0.08
11	8	-0.05	0.01	-0.13	0.02	-0.02	-0.01	0.04	0.02	-0.03
12	8	0.06	0.07	0.13	0.03	0.02	0.02	0.03	-0.02	-0.04
13	1	0.16	0.12	0.47	-0.04	0.01	-0.01	-0.03	-0.01	0.04
14	6	-0.05	-0.04	-0.01	0.01	-0.08	-0.21	-0.04	-0.08	0.08
15	8	0.03	-0.04	0.02	0.01	0.02	0.06	0.02	-0.13	0.04
16	8	-0.06	0.04	-0.01	-0.03	0.03	0.04	-0.18	0.10	-0.06
17	1	-0.12	0.11	-0.08	-0.02	-0.01	-0.07	-0.32	0.28	-0.12
18	6	0.07	-0.03	-0.02	0.02	0.08	-0.08	-0.10	0.02	0.11
19	8	-0.03	-0.04	-0.05	0.01	-0.02	0.03	0.01	0.12	0.10
20	8	0.06	0.03	0.07	-0.04	-0.03	-0.02	-0.15	-0.07	-0.16
21	1	-0.08	0.02	0.00	-0.06	-0.03	-0.03	0.15	-0.08	0.01

31

A

32

A

33

A

Frequencies --	967.2492	1017.9954	1095.2816
Red. masses --	1.3934	1.3457	4.2176
Frc consts --	0.7681	0.8216	2.9811
IR Inten --	0.1769	1.6356	27.2431
Raman Activ --	0.2015	0.1116	21.6552
Depolar (P) --	0.1315	0.0910	0.0821
Depolar (U) --	0.2324	0.1667	0.1517

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.13	-0.01	0.07	0.00
2	6	0.01	0.01	0.11	0.00	0.01	0.10	-0.26	0.07	0.00
3	6	-0.01	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.01	0.10	-0.04	0.00
4	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.23	0.02
5	6	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.04	0.01
6	6	0.00	-0.01	-0.13	0.01	0.01	0.07	0.27	0.08	-0.02
7	1	0.00	-0.01	-0.08	0.00	0.04	0.70	-0.01	0.09	-0.03
8	1	-0.01	-0.03	-0.64	-0.03	-0.04	-0.55	-0.49	-0.32	0.04
9	1	0.00	0.07	0.74	0.01	-0.04	-0.42	0.51	-0.28	0.09
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	-0.07
11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.05	-0.06
12	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.06	0.10
13	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	0.05
14	6	0.00	0.01	0.03	0.00	0.00	0.01	0.07	-0.01	0.02
15	8	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01
16	8	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.04	-0.02
17	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.06	0.02
18	6	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.02	-0.05
19	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01
20	8	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	0.04
21	1	-0.02	0.02	-0.03	0.00	-0.01	0.01	0.10	0.06	0.05

34

35

36



	A			A			A			
Frequencies --	1141.3529			1162.0854			1184.1718			
Red. masses --	4.9331			2.4255			1.7790			
Frc consts --	3.7863			1.9299			1.4698			
IR Inten --	12.3168			50.3642			172.1896			
Raman Activ --	4.9784			2.5099			1.7496			
Depolar (P) --	0.2097			0.7052			0.7296			
Depolar (U) --	0.3467			0.8271			0.8437			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.22	-0.01	0.02	0.07	0.00	0.07	0.00	0.00
2	6	-0.09	-0.05	0.00	-0.05	-0.08	0.00	-0.06	-0.02	0.00
3	6	-0.19	-0.11	0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.04	-0.05	0.01
4	6	-0.03	0.02	0.00	0.02	0.17	-0.02	0.06	-0.05	0.00
5	6	0.19	-0.13	-0.03	-0.03	0.02	0.02	0.00	0.02	0.01
6	6	0.12	-0.04	0.01	0.02	-0.07	0.00	-0.05	0.04	0.00
7	1	-0.17	0.24	-0.02	0.18	0.08	-0.01	0.79	0.02	-0.01
8	1	-0.23	-0.29	0.03	-0.28	-0.51	0.03	-0.12	-0.12	0.02
9	1	0.29	-0.29	0.00	0.27	-0.48	0.04	-0.19	0.28	-0.02
10	6	0.01	0.02	0.01	0.02	0.09	0.09	-0.02	-0.02	-0.01
11	8	0.00	-0.01	0.01	0.03	-0.05	0.06	0.00	0.01	-0.02
12	8	-0.01	-0.01	-0.02	-0.05	-0.06	-0.13	0.01	0.01	0.02
13	1	0.01	0.00	0.04	0.08	-0.01	0.19	0.00	0.01	-0.02
14	6	-0.13	0.05	-0.02	0.02	0.00	0.01	-0.11	0.03	-0.01
15	8	0.02	0.09	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.06	-0.02
16	8	0.12	-0.09	0.04	-0.01	0.01	-0.01	0.08	-0.08	0.04
17	1	-0.04	0.12	-0.05	0.02	-0.03	0.02	-0.19	0.27	-0.12
18	6	0.19	0.05	0.10	-0.09	0.00	-0.06	-0.06	-0.01	-0.02
19	8	-0.04	0.09	0.08	0.01	-0.03	-0.03	0.01	-0.02	-0.02
20	8	-0.10	-0.07	-0.12	0.02	0.03	0.05	0.01	0.02	0.03
21	1	-0.42	-0.12	-0.27	0.34	0.09	0.18	0.17	0.03	0.11

	37			38			39			
	A			A			A			
Frequencies --	1208.5482			1229.8966			1238.4330			
Red. masses --	1.5143			1.8399			1.6048			
Frc consts --	1.3032			1.6397			1.4501			
IR Inten --	123.0617			108.2180			214.7757			
Raman Activ --	4.2659			7.2294			20.9915			
Depolar (P) --	0.7361			0.2669			0.0467			
Depolar (U) --	0.8480			0.4213			0.0893			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00	-0.01	0.03	0.00
2	6	-0.02	-0.03	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.03	0.04	0.00
3	6	-0.03	-0.04	0.00	0.10	0.06	0.00	-0.07	-0.11	0.01
4	6	-0.04	0.01	0.00	0.00	-0.09	-0.01	0.03	-0.10	-0.01
5	6	-0.05	0.04	-0.01	-0.09	0.01	0.00	0.06	-0.03	0.00
6	6	-0.02	0.02	0.00	0.02	0.03	0.00	0.00	0.02	0.00
7	1	0.61	0.02	0.00	-0.09	-0.07	0.00	0.03	0.04	0.00
8	1	-0.12	-0.21	0.00	-0.03	-0.01	0.01	0.19	0.48	-0.04
9	1	-0.11	0.17	-0.02	0.00	0.06	0.00	-0.06	0.14	-0.01
10	6	0.00	0.01	0.01	0.02	0.06	0.04	0.00	0.03	0.02
11	8	0.00	-0.01	0.01	0.02	-0.02	0.05	0.02	-0.01	0.03
12	8	-0.01	-0.01	-0.02	-0.05	0.01	-0.11	-0.03	0.01	-0.07
13	1	0.01	0.00	0.04	0.25	0.12	0.63	0.20	0.10	0.50
14	6	0.08	-0.01	0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00
15	8	0.00	-0.04	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.00
16	8	-0.05	0.08	-0.03	0.01	-0.05	0.02	0.00	0.04	-0.02
17	1	0.28	-0.35	0.15	-0.28	0.32	-0.14	0.27	-0.31	0.14
18	6	0.07	0.00	0.04	0.03	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.01
19	8	-0.01	0.02	0.02	0.00	0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.01
20	8	0.01	-0.03	-0.03	0.03	-0.02	-0.01	-0.03	0.01	0.01

21	1	-0.44	-0.08	-0.24	-0.43	-0.07	-0.23	0.35	0.05	0.19
		40			41			42		
		A			A			A		
Frequencies --		1261.1684			1327.5501			1349.4504		
Red. masses --		1.7127			4.3469			3.5824		
Frc consts --		1.6050			4.5137			3.8436		
IR Inten --		56.6536			129.9620			372.3619		
Raman Activ --		3.1289			3.7375			7.5246		
Depolar (P) --		0.3708			0.4873			0.4210		
Depolar (U) --		0.5410			0.6553			0.5925		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.01	0.00	0.17	0.04	0.00	0.11	-0.05	0.00
2	6	0.03	-0.04	0.00	-0.09	-0.14	0.01	-0.06	-0.10	0.01
3	6	-0.01	0.12	-0.01	-0.13	0.15	0.00	-0.03	0.10	0.00
4	6	-0.08	-0.02	0.00	0.27	0.02	-0.01	0.11	-0.02	0.00
5	6	0.04	-0.16	0.00	-0.06	-0.24	0.01	-0.17	0.02	0.00
6	6	0.04	0.05	0.00	-0.07	0.13	-0.01	-0.09	0.12	0.00
7	1	-0.12	0.01	0.00	-0.39	0.03	0.01	0.09	-0.06	0.01
8	1	-0.20	-0.49	0.03	0.11	0.25	-0.04	0.09	0.18	-0.02
9	1	-0.30	0.62	-0.05	0.03	-0.04	0.02	0.27	-0.48	0.02
10	6	0.03	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00
11	8	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00
12	8	-0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1	0.04	0.02	0.11	-0.01	-0.02	-0.07	0.00	0.00	-0.02
14	6	0.04	-0.01	0.00	-0.05	0.00	-0.01	0.06	-0.01	0.00
15	8	-0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00
16	8	-0.02	0.01	0.00	0.03	0.03	-0.01	-0.02	-0.01	0.00
17	1	-0.02	0.01	-0.01	0.24	-0.25	0.11	-0.11	0.13	-0.06
18	6	0.03	0.03	-0.01	-0.15	0.01	-0.07	0.28	0.01	0.11
19	8	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.04	-0.03	-0.03	-0.04
20	8	-0.04	0.00	0.00	0.11	-0.01	0.03	-0.14	-0.01	-0.06
21	1	0.34	0.03	0.19	-0.51	-0.06	-0.26	0.56	0.06	0.27
		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies --		1390.2970			1400.1353			1502.8715		
Red. masses --		2.4830			3.2260			2.5155		
Frc consts --		2.8278			3.7261			3.3474		
IR Inten --		93.8464			76.5178			7.6677		
Raman Activ --		11.7423			6.2536			0.2883		
Depolar (P) --		0.1190			0.4721			0.3540		
Depolar (U) --		0.2127			0.6414			0.5229		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.06	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.20	0.00	0.00
2	6	-0.05	-0.02	0.00	-0.01	0.07	0.00	-0.03	0.14	-0.01
3	6	-0.02	-0.12	0.01	0.13	0.01	0.00	-0.10	-0.11	0.01
4	6	-0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.09	0.00	0.11	-0.01	0.00
5	6	-0.02	-0.09	0.00	-0.09	-0.01	0.00	-0.07	0.12	0.00
6	6	0.03	0.02	0.00	0.03	0.01	0.00	-0.03	-0.13	0.01
7	1	0.07	0.07	0.00	-0.09	-0.04	0.00	-0.68	-0.02	0.01
8	1	0.18	0.43	-0.03	-0.08	-0.06	0.01	-0.31	-0.35	0.03
9	1	-0.09	0.23	-0.02	-0.06	0.15	-0.01	-0.31	0.28	-0.02
10	6	0.04	0.16	0.10	0.06	0.24	0.14	-0.02	0.00	0.01
11	8	-0.01	-0.01	-0.03	-0.02	-0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.01
12	8	-0.01	-0.07	-0.02	-0.01	-0.09	-0.02	0.00	0.00	0.00
13	1	-0.16	-0.12	-0.43	-0.24	-0.17	-0.62	0.01	0.00	0.00
14	6	0.21	-0.03	0.03	-0.23	0.03	-0.02	0.04	-0.01	0.01
15	8	-0.02	0.05	-0.02	0.03	-0.03	0.01	0.00	0.02	-0.01
16	8	-0.07	-0.03	0.00	0.07	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00
17	1	-0.39	0.41	-0.18	0.34	-0.36	0.16	-0.03	0.04	-0.02
18	6	-0.01	0.01	-0.02	0.06	0.00	0.02	0.02	-0.01	0.02

19	8	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01		
20	8	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00		
21	1	-0.04	-0.01	-0.02	0.08	0.00	0.04	0.01	-0.01	0.01		
		46			47			48				
		A			A			A				
Frequencies --		1517.2578				1660.4119			1664.3328			
Red. masses --		4.3903				7.5967			6.2507			
Frc consts --		5.9547				12.3398			10.2014			
IR Inten --		8.6855				36.5590			5.8748			
Raman Activ --		5.5714				28.7092			19.0537			
Depolar (P) --		0.3187				0.6951			0.7434			
Depolar (U) --		0.4833				0.8202			0.8528			
Atom AN		X	Y	Z		X	Y	Z		X	Y	Z
1	6	0.00	0.10	-0.01		0.41	0.00	-0.01		-0.04	-0.18	0.01
2	6	-0.10	-0.07	0.00		-0.23	-0.09	0.01		0.14	0.33	-0.02
3	6	0.23	-0.13	0.00		0.28	-0.08	0.00		0.02	-0.28	0.02
4	6	0.01	0.28	0.00		-0.37	0.01	0.01		0.02	0.18	0.00
5	6	-0.23	-0.11	0.00		0.26	0.03	0.00		-0.04	-0.29	0.00
6	6	0.12	-0.10	0.00		-0.25	0.14	0.00		-0.11	0.31	-0.01
7	1	-0.05	0.12	0.00		-0.45	-0.03	0.01		0.05	-0.21	0.01
8	1	0.17	0.48	-0.03		-0.06	0.28	-0.01		-0.27	-0.42	0.03
9	1	-0.27	0.55	-0.04		0.02	-0.34	0.02		0.31	-0.36	0.03
10	6	-0.03	-0.13	-0.08		0.03	0.01	-0.03		-0.02	-0.03	-0.03
11	8	0.01	0.00	0.03		0.00	-0.01	0.02		0.01	0.00	0.02
12	8	0.01	0.03	0.02		0.00	0.00	0.00		0.00	0.01	0.01
13	1	0.06	0.04	0.16		-0.02	0.00	0.01		0.01	0.01	0.02
14	6	-0.11	0.01	0.00		-0.06	-0.01	0.01		-0.01	-0.02	0.02
15	8	0.01	0.00	0.00		0.01	0.01	-0.01		0.01	0.04	-0.01
16	8	0.01	-0.01	0.00		0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00
17	1	0.04	-0.05	0.02		0.02	-0.03	0.01		0.00	-0.01	-0.01
18	6	0.08	0.02	0.01		-0.05	-0.01	0.00		0.01	0.01	-0.02
19	8	-0.01	-0.01	0.00		0.00	0.00	0.00		-0.01	0.01	0.02
20	8	-0.01	-0.01	-0.01		0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00
21	1	0.06	-0.01	0.04		-0.02	0.00	-0.01		0.02	0.01	0.00
		49				50				51		
		A				A				A		
Frequencies --		1851.5188				1859.3550				1888.1898		
Red. masses --		10.6255				10.9588				11.1433		
Frc consts --		21.4613				22.3223				23.4075		
IR Inten --		239.4496				424.8398				341.6463		
Raman Activ --		42.3414				23.6627				40.9328		
Depolar (P) --		0.3102				0.1765				0.1405		
Depolar (U) --		0.4735				0.3000				0.2464		
Atom AN		X	Y	Z		X	Y	Z		X	Y	Z
1	6	0.02	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00		-0.01	0.00	0.00
2	6	-0.01	0.02	0.00		0.00	0.00	0.00		0.00	0.01	0.00
3	6	-0.02	-0.10	0.01		0.01	0.01	0.00		-0.01	-0.02	0.00
4	6	-0.01	0.04	-0.01		-0.02	0.06	-0.02		0.00	0.01	0.00
5	6	0.01	-0.01	0.00		0.01	-0.02	0.00		0.03	-0.06	-0.02
6	6	-0.01	0.01	0.00		-0.01	0.00	0.00		0.01	0.01	0.00
7	1	-0.02	-0.01	0.00		0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00
8	1	-0.04	-0.01	0.00		0.00	-0.01	0.00		-0.01	-0.01	0.00
9	1	0.01	-0.02	0.00		0.01	-0.02	0.00		0.02	-0.01	0.00
10	6	0.06	-0.06	0.11		0.28	-0.38	0.57		-0.04	0.06	-0.07
11	8	-0.03	0.04	-0.07		-0.18	0.23	-0.37		0.03	-0.03	0.05
12	8	-0.01	0.00	-0.01		-0.03	0.01	-0.07		0.00	-0.01	0.00
13	1	0.04	0.01	0.05		0.14	0.07	0.38		-0.04	-0.02	-0.06
14	6	0.09	0.68	-0.24		-0.02	-0.12	0.04		0.02	0.09	-0.03
15	8	-0.04	-0.43	0.15		0.01	0.07	-0.03		-0.01	-0.06	0.02
16	8	0.01	-0.06	0.02		0.00	0.01	0.00		0.00	-0.01	0.00

17	1	-0.28	0.32	-0.14	0.05	-0.05	0.03	-0.04	0.04	-0.02
18	6	0.02	-0.06	-0.05	-0.02	0.08	0.08	-0.18	0.55	0.49
19	8	-0.01	0.04	0.04	0.02	-0.05	-0.05	0.11	-0.35	-0.31
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.03	-0.03
21	1	0.03	0.01	0.01	-0.05	-0.02	-0.01	-0.35	-0.06	-0.17
		52			53			54		
		A			A			A		
Frequencies --		3197.2236			3219.9720			3243.3981		
Red. masses --		1.0897			1.0934			1.0949		
Frc consts --		6.5629			6.6793			6.7864		
IR Inten --		1.1114			4.2330			1.3453		
Raman Activ --		61.3935			125.7513			121.4530		
Depolar (P) --		0.4796			0.2932			0.1767		
Depolar (U) --		0.6483			0.4535			0.3004		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.03	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.07	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	-0.07	-0.04	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
7	1	0.01	-0.35	0.02	-0.03	0.88	-0.05	0.00	-0.30	0.02
8	1	-0.05	0.03	0.00	0.27	-0.15	0.00	0.84	-0.44	0.00
9	1	0.79	0.48	-0.05	0.30	0.18	-0.02	-0.05	-0.03	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1	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	8	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	1	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	1	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 --		3839.4755			3849.4091			3884.8297		
Red. masses --		1.0643			1.0648			1.0662		
Frc consts --		9.2439			9.2959			9.4804		
IR Inten --		112.5035			128.7161			59.7886		
Raman Activ --		123.1417			131.3467			46.3328		
Depolar (P) --		0.2735			0.2408			0.1464		
Depolar (U) --		0.4295			0.3882			0.2555		
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	0.00	0.00
8	1	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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	8	0.01	-0.06	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1	-0.08	0.99	-0.11	0.00	0.04	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	8	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	-0.05	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.03	-0.02	0.01	0.81	0.55	-0.15	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	0.02	-0.04	-0.04
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.39	0.59	0.70

# HEM-

Harmonic frequencies (cm\*\*-1), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A\*\*4/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 --		29.8182				49.3968			98.5185		
Red. masses --		12.3349				9.8566			11.2020		
Frc consts --		0.0065				0.0142			0.0641		
IR Inten --		0.4852				1.4278			8.4491		
Raman Activ --		0.8370				0.6831			1.2867		
Depolar (P) --		0.7500				0.7500			0.7500		
Depolar (U) --		0.8571				0.8571			0.8571		
Atom AN		X	Y	Z		X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.01	0.00	0.02	0.00	0.05	-0.06	0.00	0.12	
2	6	0.00	0.02	0.01	0.01	-0.01	0.05	-0.05	0.02	0.06	
3	6	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.16	0.00	0.02	-0.05	
4	1	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.18	0.01	0.04	-0.11	
5	6	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.24	0.01	0.00	-0.09	
6	1	0.00	0.03	0.00	-0.01	0.00	0.34	0.03	0.00	-0.17	
7	6	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	0.16	0.00	-0.02	-0.05	
8	8	-0.16	-0.27	0.10	-0.21	-0.08	-0.12	-0.09	0.19	-0.18	
9	1	-0.17	-0.27	0.13	-0.18	-0.07	-0.23	-0.10	0.13	-0.30	
10	8	-0.19	0.01	0.40	0.00	0.02	0.18	0.24	0.20	0.14	
11	6	0.00	0.03	0.03	0.02	-0.02	-0.13	-0.08	0.10	-0.01	
12	8	-0.10	0.20	0.14	0.19	-0.10	-0.30	-0.08	0.32	0.01	
13	6	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.01	0.05	-0.05	-0.02	0.06	
14	6	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.14	0.12	0.00	0.14	
15	6	0.00	0.03	-0.03	0.02	0.02	-0.13	-0.08	-0.10	-0.01	
16	8	0.19	0.01	-0.40	0.00	-0.02	0.18	0.24	-0.20	0.14	
17	1	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.01	0.18	0.01	-0.04	-0.11	
18	8	0.10	0.20	-0.14	0.19	0.10	-0.30	-0.08	-0.32	0.01	
19	8	0.16	-0.27	-0.10	-0.21	0.08	-0.12	-0.09	-0.19	-0.18	
20	1	0.17	-0.27	-0.13	-0.18	0.07	-0.23	-0.10	-0.13	-0.30	

		4		5		6					
		A		A		A					
Frequencies --		125.0010				146.3385			149.8282		
Red. masses --		9.4156				6.8782			5.4551		
Frc consts --		0.0867				0.0868			0.0722		
IR Inten --		0.1607				6.9506			3.0346		
Raman Activ --		1.4554				2.2779			3.0303		
Depolar (P) --		0.7116				0.7500			0.7486		
Depolar (U) --		0.8315				0.8571			0.8562		
Atom AN		X	Y	Z		X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.11	0.00	0.04	0.00	0.25	0.00	0.06	0.00	
2	6	0.00	-0.09	0.06	0.03	-0.01	0.17	-0.01	0.05	0.18	
3	6	0.01	-0.09	0.07	0.01	-0.02	-0.08	-0.01	0.05	0.27	
4	1	0.00	-0.09	0.11	0.01	-0.04	-0.23	-0.02	0.06	0.47	
5	6	0.00	-0.08	0.00	0.01	0.00	-0.23	0.00	0.04	0.00	
6	1	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.48	0.00	0.04	0.00	

7	6	-0.01	-0.09	-0.07	0.01	0.02	-0.08	0.01	0.05	-0.27
8	8	0.21	-0.05	0.08	-0.05	0.18	-0.05	0.09	-0.13	0.03
9	1	0.35	0.17	0.16	0.02	0.25	-0.21	0.00	-0.22	0.20
10	8	0.07	-0.13	-0.13	-0.14	-0.20	-0.02	0.00	0.07	0.00
11	6	-0.09	0.08	0.02	0.05	-0.06	0.04	0.03	-0.03	0.05
12	8	-0.07	0.37	0.04	0.13	0.03	-0.02	0.15	-0.04	-0.06
13	6	0.00	-0.09	-0.06	0.03	0.01	0.17	0.01	0.05	-0.18
14	6	0.00	-0.13	0.00	-0.07	0.00	0.08	0.00	0.07	0.00
15	6	0.09	0.08	-0.02	0.05	0.06	0.04	-0.03	-0.03	-0.05
16	8	-0.07	-0.13	0.13	-0.14	0.20	-0.02	0.00	0.07	0.00
17	1	0.00	-0.09	-0.11	0.01	0.04	-0.23	0.02	0.06	-0.48
18	8	0.07	0.37	-0.04	0.13	-0.03	-0.02	-0.15	-0.04	0.06
19	8	-0.21	-0.05	-0.08	-0.05	-0.18	-0.05	-0.09	-0.13	-0.03
20	1	-0.35	0.17	-0.16	0.02	-0.25	-0.21	0.00	-0.22	-0.20

		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies --		172.8208			179.6967			250.8685		
Red. masses --		6.1474			6.3499			4.6950		
Frc consts --		0.1082			0.1208			0.1741		
IR Inten --		7.8566			20.3580			0.0709		
Raman Activ --		1.6212			0.0026			3.2981		
Depolar (P) --		0.7449			0.7500			0.7500		
Depolar (U) --		0.8538			0.8571			0.8571		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.06	0.00	0.01	0.00	0.15	-0.15	0.00	0.10
2	6	0.00	0.05	-0.05	-0.01	-0.03	0.11	-0.08	0.13	0.09
3	6	0.00	0.05	-0.09	-0.03	-0.03	-0.03	0.09	0.14	0.01
4	1	0.00	0.05	-0.16	-0.03	-0.05	-0.11	0.16	0.26	-0.02
5	6	0.00	0.05	0.00	-0.04	0.00	-0.13	0.18	0.00	-0.05
6	1	0.00	0.05	0.00	-0.07	0.00	-0.29	0.32	0.00	-0.14
7	6	0.00	0.05	0.09	-0.03	0.03	-0.03	0.09	-0.14	0.01
8	8	-0.16	-0.20	0.11	-0.20	-0.14	0.10	0.01	0.02	0.01
9	1	-0.31	-0.40	0.18	-0.34	-0.35	0.11	0.25	0.35	-0.10
10	8	0.11	0.05	-0.24	0.18	-0.02	-0.19	0.01	0.12	-0.07
11	6	0.04	-0.02	-0.04	-0.03	0.02	0.07	-0.06	0.07	0.03
12	8	-0.02	0.04	0.01	0.05	-0.01	-0.01	0.00	-0.15	-0.04
13	6	0.00	0.05	0.05	-0.01	0.03	0.11	-0.08	-0.13	0.09
14	6	0.00	0.06	0.00	0.13	0.00	-0.07	-0.09	0.00	-0.01
15	6	-0.04	-0.02	0.04	-0.03	-0.02	0.07	-0.06	-0.07	0.03
16	8	-0.11	0.05	0.24	0.18	0.02	-0.18	0.01	-0.12	-0.07
17	1	0.00	0.05	0.16	-0.03	0.05	-0.11	0.16	-0.26	-0.02
18	8	0.02	0.04	-0.01	0.05	0.01	-0.01	0.00	0.15	-0.04
19	8	0.16	-0.20	-0.11	-0.20	0.14	0.10	0.01	-0.02	0.01
20	1	0.32	-0.40	-0.18	-0.34	0.35	0.11	0.25	-0.35	-0.10

		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies --		280.6779			339.8337			368.5589		
Red. masses --		9.8108			5.2317			10.5263		
Frc consts --		0.4554			0.3560			0.8424		
IR Inten --		0.5797			0.0492			1.8985		
Raman Activ --		4.3147			0.6420			0.0087		
Depolar (P) --		0.5359			0.2337			0.7500		
Depolar (U) --		0.6978			0.3789			0.8571		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.40
2	6	-0.10	-0.04	-0.03	0.02	0.01	0.10	-0.05	0.02	-0.04
3	6	-0.05	-0.05	-0.09	0.01	0.01	-0.26	0.03	0.02	-0.05
4	1	-0.01	0.02	-0.17	0.01	-0.01	-0.55	0.06	0.06	-0.21
5	6	0.00	-0.11	0.00	0.00	0.02	0.00	0.05	0.00	0.19
6	1	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.02	0.00	0.07	0.00	0.33

7	6	0.05	-0.05	0.09	-0.01	0.01	0.26	0.03	-0.02	-0.05
8	8	0.23	-0.12	0.00	0.11	-0.07	-0.08	0.11	-0.08	-0.09
9	1	0.37	0.08	0.04	0.04	-0.11	0.11	0.14	0.01	0.08
10	8	0.02	0.29	0.01	-0.01	0.01	0.02	0.13	-0.28	-0.01
11	6	-0.15	-0.12	0.00	0.06	0.00	0.14	-0.09	0.04	-0.15
12	8	-0.23	-0.10	0.07	0.20	0.04	0.02	-0.24	-0.08	-0.04
13	6	0.10	-0.04	0.03	-0.02	0.01	-0.10	-0.05	-0.02	-0.04
14	6	0.00	0.25	0.00	0.00	0.01	0.00	0.14	0.00	0.24
15	6	0.15	-0.12	0.00	-0.06	0.00	-0.14	-0.09	-0.04	-0.15
16	8	-0.02	0.29	-0.01	0.01	0.01	-0.02	0.13	0.28	-0.01
17	1	0.01	0.02	0.17	-0.01	-0.01	0.55	0.06	-0.06	-0.21
18	8	0.23	-0.10	-0.07	-0.20	0.04	-0.02	-0.24	0.08	-0.04
19	8	-0.23	-0.12	0.00	-0.11	-0.07	0.08	0.11	0.08	-0.09
20	1	-0.37	0.08	-0.04	-0.04	-0.11	-0.11	0.14	-0.01	0.08

		13		14		15				
		A		A		A				
Frequencies --		372.9349		398.2893		483.2768				
Red. masses --		6.3347		5.9428		1.4901				
Frc consts --		0.5191		0.5554		0.2050				
IR Inten --		3.0463		3.1098		63.9376				
Raman Activ --		0.3561		5.0904		0.3263				
Depolar (P) --		0.7500		0.2022		0.7500				
Depolar (U) --		0.8571		0.3364		0.8571				

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.08	0.00	-0.18	0.00	0.06	0.00	0.02	0.00	-0.08
2	6	0.04	-0.05	-0.06	-0.04	0.14	0.04	-0.01	-0.01	-0.03
3	6	0.23	-0.03	0.01	0.00	0.17	-0.04	0.00	-0.01	0.00
4	1	0.28	0.07	0.11	0.01	0.19	-0.09	-0.01	-0.02	0.05
5	6	0.25	0.00	-0.02	0.00	0.19	0.00	-0.01	0.00	0.00
6	1	0.19	0.00	0.02	0.00	0.20	0.00	-0.03	0.00	0.04
7	6	0.23	0.03	0.01	0.00	0.17	0.04	0.00	0.01	0.00
8	8	-0.18	0.12	-0.01	0.12	-0.03	0.02	-0.05	-0.03	0.04
9	1	-0.37	-0.17	-0.09	-0.16	-0.40	0.24	0.38	0.56	-0.16
10	8	0.00	-0.06	0.05	-0.03	-0.19	-0.01	0.02	-0.05	0.01
11	6	-0.06	-0.08	0.03	-0.13	0.09	0.04	-0.03	0.03	0.03
12	8	-0.13	-0.10	0.08	-0.13	-0.12	0.02	0.01	0.02	-0.01
13	6	0.04	0.05	-0.06	0.04	0.14	-0.04	-0.01	0.01	-0.03
14	6	0.07	0.00	-0.04	0.00	-0.13	0.00	0.06	0.00	-0.01
15	6	-0.06	0.08	0.03	0.13	0.09	-0.04	-0.03	-0.03	0.03
16	8	0.00	0.06	0.05	0.03	-0.19	0.01	0.02	0.05	0.01
17	1	0.28	-0.07	0.11	-0.01	0.19	0.09	-0.01	0.02	0.05
18	8	-0.13	0.10	0.08	0.13	-0.12	-0.02	0.01	-0.02	-0.01
19	8	-0.18	-0.12	-0.01	-0.12	-0.03	-0.02	-0.05	0.03	0.04
20	1	-0.37	0.17	-0.09	0.16	-0.40	-0.24	0.38	-0.56	-0.16

		16		17		18				
		A		A		A				
Frequencies --		485.5103		531.5817		571.8407				
Red. masses --		1.3870		4.1566		4.9356				
Frc consts --		0.1926		0.6920		0.9509				
IR Inten --		96.2767		0.9099		20.2317				
Raman Activ --		1.0209		0.1797		0.6298				
Depolar (P) --		0.4918		0.7500		0.7500				
Depolar (U) --		0.6593		0.8571		0.8571				

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.02	0.00	0.03	0.00	-0.10	-0.08	0.00	-0.19
2	6	-0.01	-0.04	0.00	-0.01	-0.02	0.12	-0.06	0.15	-0.07
3	6	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.03	0.22	-0.13	0.18	0.01
4	1	0.00	-0.04	0.01	-0.01	-0.04	0.28	-0.11	0.23	0.23
5	6	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.27	-0.03	0.00	-0.05
6	1	0.00	-0.07	0.00	-0.03	0.00	-0.73	0.23	0.00	0.08

7	6	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.03	0.22	-0.13	-0.18	0.01
8	8	0.02	0.05	-0.03	0.08	-0.05	-0.05	0.00	0.07	-0.01
9	1	-0.41	-0.55	0.10	0.06	-0.03	0.11	-0.27	-0.34	-0.02
10	8	0.00	0.03	0.01	0.00	-0.04	0.04	0.07	-0.15	0.04
11	6	-0.04	0.03	0.00	-0.04	0.02	-0.06	0.02	0.07	0.08
12	8	-0.01	0.03	-0.02	-0.08	-0.01	-0.04	0.08	-0.02	0.01
13	6	0.01	-0.04	0.00	-0.01	0.02	0.12	-0.06	-0.15	-0.07
14	6	0.00	0.02	0.00	0.07	0.00	-0.06	0.11	0.00	0.04
15	6	0.04	0.03	0.00	-0.04	-0.02	-0.06	0.02	-0.07	0.08
16	8	0.00	0.03	-0.01	0.00	0.04	0.04	0.07	0.15	0.04
17	1	0.00	-0.04	-0.01	-0.01	0.04	0.28	-0.11	-0.23	0.23
18	8	0.01	0.03	0.02	-0.08	0.01	-0.04	0.08	0.02	0.01
19	8	-0.02	0.05	0.03	0.08	0.05	-0.05	0.00	-0.07	-0.01
20	1	0.41	-0.55	-0.10	0.06	0.03	0.11	-0.27	0.34	-0.02

		19		20		21				
		A		A		A				
Frequencies --		647.0405		660.3370		684.1683				
Red. masses --		5.3789		4.3745		5.8317				
Frc consts --		1.3268		1.1239		1.6083				
IR Inten --		0.6527		141.1826		0.2017				
Raman Activ --		1.2128		0.8279		9.8004				
Depolar (P) --		0.5851		0.7500		0.0474				
Depolar (U) --		0.7382		0.8571		0.0905				

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.01	0.00	0.12	0.00	0.05	0.00	0.21	0.00
2	6	-0.06	-0.01	0.34	0.14	0.06	0.02	-0.14	0.05	-0.09
3	6	-0.02	-0.04	-0.04	-0.08	0.05	0.02	-0.15	0.06	0.00
4	1	0.01	0.01	-0.38	-0.14	-0.06	-0.07	-0.06	0.23	0.11
5	6	0.00	-0.10	0.00	-0.07	0.00	-0.01	0.00	-0.12	0.00
6	1	0.00	-0.10	0.00	0.04	0.00	-0.12	0.00	-0.12	0.00
7	6	0.02	-0.04	0.04	-0.08	-0.05	0.02	0.15	0.06	0.00
8	8	-0.13	0.01	0.04	-0.07	-0.06	-0.13	-0.01	-0.05	-0.14
9	1	0.06	0.20	-0.34	0.08	0.04	-0.57	0.03	-0.07	-0.47
10	8	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.03	0.00	-0.10	-0.11	-0.04
11	6	-0.13	0.07	-0.02	0.13	0.08	-0.01	-0.08	-0.15	-0.02
12	8	-0.06	-0.01	-0.11	-0.06	-0.09	0.15	0.04	0.11	-0.11
13	6	0.06	-0.01	-0.34	0.14	-0.06	0.02	0.14	0.05	0.09
14	6	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.10	0.00
15	6	0.13	0.07	0.02	0.13	-0.08	-0.01	0.08	-0.15	0.02
16	8	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.10	-0.11	0.04
17	1	-0.01	0.01	0.38	-0.14	0.06	-0.07	0.06	0.23	-0.11
18	8	0.06	-0.01	0.11	-0.06	0.09	0.15	-0.04	0.11	0.11
19	8	0.13	0.01	-0.04	-0.07	0.06	-0.13	0.01	-0.05	0.14
20	1	-0.06	0.20	0.34	0.08	-0.04	-0.57	-0.03	-0.07	0.47

		22		23		24				
		A		A		A				
Frequencies --		713.4706		755.3530		756.2336				
Red. masses --		3.2409		3.8886		5.7220				
Frc consts --		0.9720		1.3072		1.9280				
IR Inten --		17.7895		71.3189		38.6994				
Raman Activ --		0.1798		10.1870		17.9019				
Depolar (P) --		0.7500		0.7500		0.0177				
Depolar (U) --		0.8571		0.8571		0.0348				

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.00	0.12	0.02	0.00	0.02	0.00	-0.16	0.00
2	6	0.01	-0.01	-0.16	0.00	-0.06	0.00	0.03	-0.05	-0.04
3	6	0.01	0.00	0.08	0.05	-0.14	-0.04	0.12	0.04	0.00
4	1	0.00	0.03	0.60	0.01	-0.18	0.35	0.04	-0.09	0.03
5	6	0.02	0.00	-0.18	-0.04	0.00	-0.06	0.00	0.32	0.00
6	1	0.00	0.00	0.25	-0.32	0.00	0.49	0.00	0.32	0.00



7	6	0.01	0.00	0.08	0.05	0.14	-0.04	-0.12	0.04	0.00
8	8	-0.03	-0.01	0.02	0.05	0.03	-0.06	-0.01	-0.08	-0.14
9	1	0.03	0.07	-0.05	-0.08	-0.17	-0.12	0.04	-0.08	-0.49
10	8	0.02	0.02	-0.07	-0.01	0.00	-0.01	0.13	0.07	0.06
11	6	0.05	-0.07	-0.03	-0.09	0.24	0.12	-0.13	-0.07	-0.02
12	8	0.01	0.02	0.03	0.03	-0.07	-0.02	-0.02	0.05	-0.13
13	6	0.01	0.01	-0.16	0.00	0.06	0.00	-0.03	-0.05	0.04
14	6	-0.12	0.00	0.21	-0.04	0.00	0.02	0.00	-0.15	0.00
15	6	0.05	0.07	-0.03	-0.09	-0.24	0.12	0.13	-0.07	0.02
16	8	0.02	-0.02	-0.07	-0.01	0.00	-0.01	-0.13	0.07	-0.06
17	1	0.00	-0.03	0.60	0.01	0.18	0.35	-0.04	-0.09	-0.03
18	8	0.01	-0.02	0.03	0.03	0.07	-0.02	0.02	0.05	0.13
19	8	-0.03	0.01	0.02	0.05	-0.03	-0.06	0.01	-0.08	0.14
20	1	0.03	-0.07	-0.05	-0.08	0.17	-0.12	-0.04	-0.09	0.49

25				26				27				
A				A				A				
Frequencies --	765.7123				802.9427				836.1162			
Red. masses --	7.4742				1.9307				9.2668			
Frc consts --	2.5819				0.7334				3.8169			
IR Inten --	33.4063				23.1462				60.2118			
Raman Activ --	5.0691				1.5225				6.4126			
Depolar (P) --	0.3316				0.7500				0.1392			
Depolar (U) --	0.4980				0.8571				0.2444			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z		
1	6	0.00	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.06	0.00	-0.06	0.00		
2	6	-0.06	0.01	-0.19	0.01	0.02	0.08	0.08	-0.09	-0.03		
3	6	-0.03	-0.05	-0.02	-0.02	0.03	-0.07	0.24	-0.11	0.01		
4	1	0.03	0.08	0.32	-0.02	0.05	0.40	0.12	-0.34	0.00		
5	6	0.00	-0.18	0.00	0.01	0.00	-0.08	0.00	0.24	0.00		
6	1	0.00	-0.18	0.00	0.05	0.00	0.77	0.00	0.23	0.00		
7	6	0.03	-0.05	0.02	-0.02	-0.03	-0.07	-0.24	-0.11	-0.01		
8	8	-0.05	-0.11	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.01	-0.03	-0.01		
9	1	0.18	0.24	0.01	0.02	0.03	0.05	0.05	0.04	-0.09		
10	8	0.04	0.03	0.01	-0.02	0.01	0.04	-0.29	-0.06	-0.14		
11	6	-0.17	0.33	0.20	0.01	-0.05	-0.04	-0.07	0.07	0.04		
12	8	0.08	-0.07	-0.08	-0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.04		
13	6	0.06	0.01	0.19	0.01	-0.02	0.08	-0.08	-0.09	0.03		
14	6	0.00	-0.05	0.00	0.07	0.00	-0.15	0.00	0.43	0.00		
15	6	0.17	0.33	-0.20	0.01	0.05	-0.04	0.07	0.07	-0.04		
16	8	-0.04	0.03	-0.01	-0.02	-0.01	0.04	0.29	-0.06	0.14		
17	1	-0.03	0.08	-0.32	-0.02	-0.05	0.40	-0.12	-0.34	0.00		
18	8	-0.08	-0.07	0.08	-0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.04		
19	8	0.05	-0.11	0.01	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.03	0.01		
20	1	-0.18	0.24	-0.01	0.02	-0.03	0.05	-0.05	0.04	0.09		

28				29				30				
A				A				A				
Frequencies --	856.5647				912.1283				934.3767			
Red. masses --	9.0805				6.6700				1.4255			
Frc consts --	3.9253				3.2696				0.7332			
IR Inten --	9.5871				4.7119				0.2116			
Raman Activ --	0.9087				0.6796				0.3289			
Depolar (P) --	0.7500				0.7500				0.6311			
Depolar (U) --	0.8571				0.8571				0.7738			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z		
1	6	0.00	0.00	0.44	0.33	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00		
2	6	-0.02	0.00	-0.31	0.26	0.06	-0.02	0.00	0.00	0.05		
3	6	-0.01	0.01	0.13	-0.09	0.11	0.01	0.02	0.00	-0.12		
4	1	0.00	0.03	-0.10	-0.19	-0.07	-0.04	0.01	0.03	0.69		
5	6	0.01	0.00	-0.03	-0.03	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.00		
6	1	0.05	0.00	-0.49	0.36	0.00	0.09	0.00	0.01	0.00		

7	6	-0.01	-0.01	0.13	-0.09	-0.11	0.01	-0.02	0.00	0.12
8	8	-0.01	0.05	0.04	-0.02	0.11	0.13	0.00	0.01	0.01
9	1	-0.05	-0.03	-0.05	-0.07	0.08	0.37	-0.01	0.00	-0.01
10	8	-0.06	0.01	0.11	-0.01	0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.03	0.07	0.05	-0.13	0.08	-0.02	0.00	-0.01	-0.01
12	8	0.04	0.00	-0.01	-0.09	0.00	-0.14	-0.01	0.00	0.00
13	6	-0.02	0.00	-0.31	0.26	-0.06	-0.02	0.00	0.00	-0.05
14	6	0.20	0.00	-0.45	-0.07	0.00	0.07	0.00	0.00	0.00
15	6	-0.03	-0.07	0.05	-0.13	-0.08	-0.02	0.00	-0.01	0.01
16	8	-0.06	-0.01	0.11	-0.01	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	-0.03	-0.10	-0.19	0.07	-0.04	-0.01	0.03	-0.69
18	8	0.04	0.00	-0.01	-0.09	0.00	-0.14	0.01	0.00	0.00
19	8	-0.01	-0.05	0.04	-0.02	-0.11	0.13	0.00	0.01	-0.01
20	1	-0.05	0.03	-0.05	-0.07	-0.08	0.37	0.01	0.00	0.01

		31			32			33		
		A			A			A		
Frequencies --		980.0617			1093.8620			1129.8806		
Red. masses --		1.3278			3.2547			9.2957		
Frc consts --		0.7514			2.2945			6.9920		
IR Inten --		1.2252			2.2527			59.2358		
Raman Activ --		0.0809			28.4781			1.6411		
Depolar (P) --		0.7500			0.0499			0.5155		
Depolar (U) --		0.8571			0.0951			0.6803		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.18	0.00	0.00	-0.26	0.00
2	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.06	0.00	0.29	0.13	0.04
3	6	0.00	0.00	0.08	0.25	-0.05	0.02	-0.03	0.11	-0.01
4	1	0.01	-0.03	-0.51	0.50	0.36	-0.04	0.04	0.21	0.03
5	6	0.01	0.00	-0.12	0.00	-0.13	0.00	0.00	-0.27	0.00
6	1	-0.02	0.00	0.67	0.00	-0.16	0.00	0.00	-0.28	0.00
7	6	0.00	0.00	0.08	-0.25	-0.05	-0.02	0.03	0.11	0.01
8	8	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.02	0.04	-0.12	-0.22
9	1	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.02	0.09	0.07	0.24
10	8	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.02	0.02	-0.08	0.03	-0.04
11	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	-0.03	0.12	0.12	-0.19
12	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.00	-0.09
13	6	-0.01	0.00	-0.01	0.03	0.06	0.00	-0.29	0.13	-0.04
14	6	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.02	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.03	-0.12	0.12	0.19
16	8	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.02	-0.02	0.08	0.03	0.04
17	1	0.01	0.03	-0.51	-0.50	0.36	0.04	-0.04	0.21	-0.03
18	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.11	0.00	0.09
19	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.02	-0.04	-0.12	0.22
20	1	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	-0.09	0.07	-0.24

		34			35			36		
		A			A			A		
Frequencies --		1158.6981			1180.4602			1201.9547		
Red. masses --		1.8622			2.1585			1.6115		
Frc consts --		1.4730			1.7722			1.3717		
IR Inten --		197.7005			6.3102			247.7359		
Raman Activ --		5.4119			4.8932			0.4576		
Depolar (P) --		0.7500			0.3487			0.7500		
Depolar (U) --		0.8571			0.5171			0.8571		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	0.00	0.01	0.00	0.22	0.00	-0.05	0.00	-0.01
2	6	-0.03	-0.07	-0.01	0.02	0.04	0.01	-0.03	0.01	0.01
3	6	-0.06	-0.01	0.00	0.00	-0.09	-0.01	-0.01	-0.06	0.00
4	1	-0.13	-0.12	-0.01	-0.28	-0.58	0.04	-0.19	-0.37	0.02
5	6	0.08	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.06	0.00	0.00
6	1	0.88	0.00	0.02	0.00	0.04	0.00	0.56	0.00	0.01

7	6	-0.06	0.01	0.00	0.00	-0.09	0.01	-0.01	0.06	0.00
8	8	0.01	-0.04	-0.09	0.00	-0.03	-0.06	0.01	0.03	0.08
9	1	0.03	0.06	0.20	0.02	0.06	0.19	-0.02	-0.12	-0.36
10	8	0.00	0.01	-0.01	0.04	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.06	-0.04	0.08	0.03	0.04	-0.04	0.05	0.03	-0.06
12	8	0.03	0.00	0.03	-0.03	0.00	-0.02	-0.02	0.00	-0.02
13	6	-0.03	0.07	-0.01	-0.02	0.04	-0.01	-0.03	-0.01	0.01
14	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.01	0.00	0.00
15	6	-0.06	0.04	0.08	-0.03	0.04	0.04	0.05	-0.03	-0.06
16	8	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.13	0.12	-0.01	0.28	-0.58	-0.04	-0.19	0.37	0.02
18	8	0.03	0.00	0.03	0.03	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.02
19	8	0.01	0.04	-0.09	0.00	-0.03	0.06	0.01	-0.03	0.08
20	1	0.03	-0.06	0.20	-0.02	0.06	-0.19	-0.02	0.12	-0.36

37

38

39

A

A

A

Frequencies --	1249.9782	1254.6831	1329.5143
Red. masses --	1.7376	1.5981	6.4143
Frc consts --	1.5996	1.4823	6.6802
IR Inten --	45.3489	71.9387	1.0246
Raman Activ --	14.6617	1.6171	0.1776
Depolar (P) --	0.1223	0.7500	0.7500
Depolar (U) --	0.2180	0.8571	0.8571

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.03	0.00	0.06	0.00	0.00	0.36	0.00	0.00
2	6	0.12	0.07	-0.01	-0.02	-0.13	0.01	-0.16	0.23	0.00
3	6	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.00	-0.14	-0.21	0.00
4	1	-0.10	-0.21	0.01	0.22	0.50	-0.01	0.17	0.35	-0.02
5	6	0.00	-0.07	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.25	0.00	0.01
6	1	0.00	-0.08	0.00	0.21	0.00	0.02	-0.38	0.00	-0.02
7	6	-0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.03	0.00	-0.14	0.21	0.00
8	8	0.03	0.00	0.07	0.03	0.00	0.04	0.01	-0.01	0.00
9	1	0.00	-0.20	-0.61	0.01	-0.12	-0.38	-0.01	-0.07	-0.16
10	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01
11	6	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.05	0.02
12	8	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.00
13	6	-0.12	0.07	0.01	-0.02	0.13	0.01	-0.16	-0.23	0.00
14	6	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02
15	6	0.02	0.00	-0.02	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.05	0.02
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01
17	1	0.10	-0.21	-0.01	0.22	-0.50	-0.01	0.17	-0.35	-0.02
18	8	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.00
19	8	-0.03	0.00	-0.07	0.03	0.00	0.04	0.01	0.01	0.00
20	1	0.00	-0.20	0.61	0.01	0.12	-0.38	-0.01	0.07	-0.16

40

41

42

A

A

A

Frequencies --	1376.2439	1379.5972	1407.9687
Red. masses --	2.2125	9.7059	3.6549
Frc consts --	2.4690	10.8840	4.2689
IR Inten --	99.8047	169.3887	198.6204
Raman Activ --	1.7676	15.0445	15.1656
Depolar (P) --	0.7500	0.1311	0.0622
Depolar (U) --	0.8571	0.2318	0.1172

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	-0.01	0.00
2	6	-0.03	-0.02	0.01	0.11	0.04	0.00	0.08	0.09	-0.01
3	6	-0.03	-0.06	0.00	0.01	0.06	0.00	0.05	0.04	0.00
4	1	0.15	0.26	-0.01	-0.05	-0.06	0.01	-0.11	-0.26	0.01
5	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.09	0.00
6	1	0.30	0.00	0.01	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.10	0.00

7	6	-0.03	0.06	0.00	-0.01	0.06	0.00	-0.05	0.04	0.00
8	8	-0.05	0.04	0.01	-0.03	0.02	0.01	-0.05	0.05	0.02
9	1	-0.03	0.17	0.53	0.00	0.14	0.35	-0.04	0.16	0.52
10	8	0.00	0.00	0.00	0.28	-0.19	0.14	-0.07	0.05	-0.03
11	6	0.10	0.12	-0.12	-0.08	-0.09	0.09	-0.12	-0.16	0.15
12	8	0.01	-0.02	0.04	-0.01	0.01	-0.04	-0.02	0.03	-0.05
13	6	-0.03	0.02	0.01	-0.11	0.04	0.00	-0.08	0.09	0.01
14	6	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.57	0.00	0.00	-0.14	0.00
15	6	0.10	-0.12	-0.12	0.08	-0.09	-0.09	0.12	-0.16	-0.15
16	8	0.00	0.00	0.00	-0.28	-0.19	-0.14	0.07	0.05	0.03
17	1	0.15	-0.26	-0.01	0.05	-0.06	-0.01	0.11	-0.26	-0.01
18	8	0.01	0.02	0.04	0.01	0.01	0.04	0.02	0.03	0.05
19	8	-0.05	-0.04	0.01	0.03	0.02	-0.01	0.05	0.05	-0.02
20	1	-0.03	-0.17	0.53	0.00	0.14	-0.35	0.04	0.16	-0.52

43

44

45

A

A

A

Frequencies --	1478.0701	1503.5741	1655.1204
Red. masses --	3.8986	2.7869	7.8144
Frc consts --	5.0182	3.7121	12.6126
IR Inten --	1.0955	19.4600	14.5200
Raman Activ --	1.8337	0.0011	11.7233
Depolar (P) --	0.3600	0.7500	0.7500
Depolar (U) --	0.5294	0.8571	0.8571

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.24	0.00	0.11	0.00	0.00	-0.38	0.00	-0.01
2	6	0.23	-0.15	0.01	-0.09	-0.13	0.01	0.27	-0.06	0.00
3	6	-0.11	-0.05	0.00	-0.04	0.13	0.00	-0.24	-0.12	-0.01
4	1	0.22	0.55	-0.01	-0.31	-0.30	0.00	-0.01	0.32	-0.01
5	6	0.00	0.09	0.00	0.21	0.00	0.01	0.41	0.00	0.01
6	1	0.00	0.12	0.00	-0.67	0.00	-0.02	-0.43	0.00	-0.02
7	6	0.11	-0.05	0.00	-0.04	-0.13	0.00	-0.24	0.12	-0.01
8	8	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01
9	1	-0.02	0.01	0.08	0.00	0.03	0.09	0.01	0.01	-0.02
10	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.03	-0.03	0.02
11	6	-0.04	0.00	0.05	0.04	0.05	-0.04	-0.01	-0.01	0.05
12	8	-0.02	0.00	-0.03	0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.00	-0.03
13	6	-0.23	-0.15	-0.01	-0.09	0.13	0.01	0.27	0.06	0.00
14	6	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.06	0.00	-0.05
15	6	0.04	0.00	-0.05	0.04	-0.05	-0.04	-0.01	0.01	0.05
16	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.03	0.03	0.02
17	1	-0.22	0.55	0.01	-0.31	0.30	0.00	-0.01	-0.31	-0.01
18	8	0.02	0.00	0.03	0.01	0.01	0.02	-0.02	0.00	-0.03
19	8	0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01
20	1	0.02	0.01	-0.08	0.00	-0.03	0.09	0.01	-0.01	-0.02

46

47

48

A

A

A

Frequencies --	1659.3615	1746.9636	1826.4354
Red. masses --	6.1093	12.7077	10.3134
Frc consts --	9.9111	22.8499	20.2703
IR Inten --	2.9921	625.9244	833.2033
Raman Activ --	24.8404	5.7289	0.0626
Depolar (P) --	0.6920	0.7500	0.7497
Depolar (U) --	0.8180	0.8571	0.8569

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.15	0.00	-0.10	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00
2	6	0.00	-0.29	0.01	0.05	0.00	0.00	-0.07	-0.02	-0.01
3	6	0.12	0.32	0.00	-0.03	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00
4	1	-0.29	-0.40	0.00	0.01	0.06	0.00	0.02	-0.01	-0.01
5	6	0.00	-0.17	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
6	1	0.00	-0.20	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.04	0.00	0.01



7	6	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	8	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.02	0.01	-0.03	0.02	-0.01
9	1	0.00	0.00	0.00	-0.59	0.40	-0.09	0.57	-0.39	0.09
10	8	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	8	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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.43	0.24	0.02	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	0.03	0.02	0.01	0.04	0.02	0.01
20	1	0.00	0.00	0.00	-0.57	-0.39	-0.09	-0.59	-0.40	-0.09

## HEM-xH2O

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 --		23.3572			44.0834			55.0620		
Red. masses --		11.7221			6.2124			9.8660		
Frc consts --		0.0038			0.0071			0.0176		
IR Inten --		0.1256			6.4946			0.9012		
Raman Activ --		0.4832			0.4008			0.8601		
Depolar (P) --		0.6074			0.6776			0.7480		
Depolar (U) --		0.7557			0.8078			0.8558		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.02	0.06	0.01	-0.04	0.04	0.01	0.03	-0.03
2	6	0.01	0.01	0.04	-0.01	-0.03	0.05	0.02	0.02	-0.04
3	6	-0.02	0.01	0.03	0.03	-0.03	-0.03	-0.01	0.02	-0.16
4	6	0.00	0.04	0.06	0.01	-0.04	0.07	0.01	0.06	0.15
5	6	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.01	-0.07
6	6	0.03	0.02	0.08	-0.06	-0.05	0.12	-0.01	0.01	-0.08
7	6	-0.02	0.01	-0.01	0.03	0.00	-0.09	-0.01	0.01	-0.27
8	1	-0.02	0.02	0.04	0.04	-0.04	-0.04	-0.01	0.03	-0.17
9	8	-0.01	0.17	0.14	0.01	-0.02	0.08	0.11	0.23	0.37
10	8	0.00	-0.12	-0.08	0.02	-0.05	0.05	-0.11	-0.13	0.05
11	6	-0.01	0.00	-0.03	0.01	0.01	-0.09	0.00	0.00	-0.19
12	6	0.00	0.01	-0.06	-0.03	0.02	-0.02	0.05	-0.03	0.11
13	8	0.28	0.14	0.30	-0.17	-0.02	0.10	0.01	-0.01	-0.09
14	8	-0.19	-0.10	-0.13	-0.02	-0.11	0.17	-0.07	-0.01	-0.14
15	1	-0.03	0.00	-0.03	0.05	0.01	-0.15	-0.02	0.01	-0.38
16	1	-0.02	-0.11	-0.16	0.04	0.01	0.03	-0.08	-0.09	0.06
17	1	-0.01	-0.02	-0.08	0.01	0.03	-0.14	0.00	0.00	-0.22
18	8	-0.18	0.14	-0.31	-0.04	0.04	-0.03	0.20	-0.07	0.32
19	8	0.26	-0.18	0.21	-0.05	0.02	-0.03	-0.10	-0.02	0.05
20	1	0.19	-0.14	0.18	-0.07	0.03	-0.04	-0.02	-0.06	0.19
21	8	-0.14	-0.12	-0.23	0.22	0.24	-0.32	-0.09	-0.08	-0.08
22	1	-0.15	-0.09	-0.21	0.08	0.14	-0.09	-0.07	-0.03	-0.11
23	1	-0.17	-0.07	-0.19	0.59	-0.02	-0.44	-0.14	-0.12	-0.13
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		81.0612			111.9226			135.3788		
Red. masses --		10.2675			9.0248			8.3322		
Frc consts --		0.0398			0.0666			0.0900		
IR Inten --		3.3734			1.2731			5.5422		

Raman Activ --	0.3214	1.3653	1.5253
Depolar (P) --	0.7324	0.5759	0.7500
Depolar (U) --	0.8455	0.7309	0.8571

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.06	0.02	0.00	-0.04	-0.04	-0.03	0.03	0.20
2	6	0.03	0.05	0.05	0.03	-0.06	-0.04	-0.04	0.03	0.23
3	6	-0.02	0.05	0.02	-0.01	-0.04	0.00	-0.04	0.03	-0.01
4	6	0.01	0.09	-0.06	0.01	0.12	-0.06	-0.03	-0.02	0.05
5	6	0.03	0.03	0.02	0.02	-0.06	0.00	-0.04	0.02	0.08
6	6	-0.08	0.01	0.15	0.03	-0.07	-0.01	0.04	0.07	0.11
7	6	-0.02	0.02	0.05	-0.01	-0.05	0.04	-0.05	0.02	-0.21
8	1	-0.04	0.07	0.01	-0.01	-0.04	-0.01	-0.04	0.03	-0.07
9	8	-0.05	0.19	-0.05	-0.06	0.40	0.08	-0.14	-0.06	-0.07
10	8	0.08	-0.01	-0.18	0.11	-0.01	-0.20	0.12	0.02	0.03
11	6	-0.01	0.00	0.03	0.01	-0.06	0.04	-0.05	0.03	-0.16
12	6	0.11	-0.04	-0.06	-0.09	0.03	0.00	-0.02	0.00	0.02
13	8	-0.18	0.14	0.23	-0.11	-0.09	-0.09	0.06	-0.13	-0.06
14	8	-0.12	-0.20	0.15	0.15	-0.06	0.11	0.10	0.34	0.13
15	1	-0.04	0.01	0.06	-0.02	-0.05	0.08	-0.05	0.03	-0.44
16	1	0.06	0.01	-0.25	0.20	0.16	-0.23	0.11	0.07	-0.06
17	1	-0.01	-0.01	0.02	0.01	-0.08	0.08	-0.06	0.04	-0.35
18	8	0.20	-0.28	0.03	-0.15	0.21	-0.05	-0.04	-0.05	-0.02
19	8	0.10	0.18	-0.29	-0.18	-0.07	0.07	0.04	0.05	0.00
20	1	0.22	0.08	-0.37	-0.33	0.04	0.06	0.07	0.02	-0.06
21	8	-0.07	-0.22	-0.01	0.21	-0.19	0.10	0.05	-0.31	-0.15
22	1	-0.12	-0.22	0.08	0.19	-0.19	0.15	0.01	-0.08	-0.07
23	1	-0.04	-0.06	0.12	0.18	0.02	0.26	-0.04	-0.26	-0.13

7  
A

8  
A

9  
A

Frequencies --	158.1831	164.1456	169.2964
Red. masses --	5.5672	7.6690	7.4004
Frc consts --	0.0821	0.1217	0.1250
IR Inten --	3.9327	5.6761	2.8746
Raman Activ --	1.4863	2.6172	1.0911
Depolar (P) --	0.7467	0.7500	0.6908
Depolar (U) --	0.8550	0.8571	0.8171

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.06	-0.04	-0.01	-0.02	0.09	0.06	-0.04	0.19
2	6	0.02	-0.07	0.14	0.01	-0.03	-0.05	0.05	-0.04	0.12
3	6	0.02	-0.05	-0.23	-0.02	-0.02	0.19	0.06	-0.04	0.16
4	6	0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	0.04	0.07	0.06	0.05
5	6	0.02	-0.05	0.22	0.00	-0.04	-0.16	0.06	-0.02	-0.04
6	6	0.05	-0.06	0.06	0.11	0.02	0.03	-0.06	-0.09	0.00
7	6	0.03	-0.04	-0.11	-0.02	-0.04	0.03	0.06	-0.02	-0.06
8	1	0.03	-0.07	-0.45	-0.02	-0.02	0.34	0.07	-0.04	0.22
9	8	0.02	0.07	0.04	-0.07	-0.05	-0.04	-0.11	0.09	-0.09
10	8	0.02	0.01	0.00	0.06	0.01	0.02	0.28	0.12	0.00
11	6	0.04	-0.04	0.15	-0.01	-0.04	-0.17	0.05	-0.02	-0.18
12	6	-0.05	0.02	0.04	-0.08	0.01	-0.08	0.04	-0.01	-0.01
13	8	0.17	-0.12	0.05	0.30	0.13	0.21	-0.11	-0.17	-0.09
14	8	-0.04	0.00	-0.05	0.02	-0.03	-0.05	-0.12	-0.08	-0.06
15	1	0.04	-0.03	-0.24	-0.04	-0.04	0.07	0.06	-0.02	-0.15
16	1	-0.01	-0.04	-0.01	0.06	0.03	-0.02	0.11	-0.07	-0.17
17	1	0.04	-0.04	0.22	-0.01	-0.05	-0.28	0.05	-0.01	-0.37
18	8	-0.11	-0.03	-0.06	0.05	0.07	0.11	0.04	0.06	0.00
19	8	-0.08	0.19	-0.14	-0.35	0.01	-0.19	0.00	-0.07	0.04
20	1	-0.22	0.26	-0.40	-0.50	0.13	-0.16	0.00	-0.06	0.10
21	8	-0.09	0.11	0.04	0.05	-0.02	0.01	-0.26	0.18	0.05
22	1	-0.06	0.07	-0.03	0.08	-0.01	-0.03	-0.23	0.09	-0.03
23	1	-0.13	0.13	0.05	-0.04	0.08	0.06	-0.30	0.29	0.12

	10	11	12	
	A	A	A	
Frequencies --	218.7295		235.3750	273.1174
Red. masses --	5.9932		6.2415	5.9586
Frc consts --	0.1689		0.2037	0.2619
IR Inten --	11.3615		37.2179	0.3104
Raman Activ --	1.0542		0.8971	0.4350
Depolar (P) --	0.7361		0.7479	0.6699
Depolar (U) --	0.8480		0.8558	0.8023
Atom AN	X Y Z	X Y Z	X Y Z	
1 6	0.04 0.03 -0.09	0.03 -0.01 -0.06	-0.02 -0.19 -0.13	
2 6	0.07 0.01 -0.05	-0.01 0.01 -0.03	-0.16 -0.08 -0.15	
3 6	-0.03 0.00 -0.08	0.03 -0.02 0.01	0.16 -0.13 -0.04	
4 6	0.07 0.11 0.02	0.04 -0.07 -0.06	-0.01 -0.06 -0.01	
5 6	0.06 -0.08 -0.01	0.00 -0.02 -0.05	-0.16 0.07 -0.12	
6 6	0.03 0.02 0.03	0.05 0.08 0.09	-0.08 -0.03 -0.02	
7 6	-0.04 -0.08 0.05	0.03 -0.03 0.06	0.19 0.05 0.06	
8 1	-0.09 0.04 -0.10	0.03 -0.01 0.03	0.28 -0.22 0.00	
9 8	0.12 -0.01 -0.01	0.05 0.05 0.03	-0.08 0.12 0.06	
10 8	0.04 0.29 0.21	-0.01 -0.20 -0.16	0.11 0.13 0.10	
11 6	0.01 -0.11 0.09	0.01 -0.02 -0.01	0.02 0.16 0.00	
12 6	0.02 -0.05 -0.02	-0.01 -0.04 -0.03	-0.12 0.02 -0.03	
13 8	-0.07 0.05 0.01	0.00 0.03 0.02	0.07 -0.01 0.06	
14 8	0.06 -0.02 0.07	0.21 0.19 0.22	0.01 0.08 0.04	
15 1	-0.08 -0.10 0.13	0.03 -0.03 0.13	0.33 0.11 0.18	
16 1	-0.02 0.18 0.27	-0.23 -0.53 -0.25	0.13 0.17 0.12	
17 1	0.01 -0.16 0.20	0.01 0.00 0.00	0.03 0.32 0.06	
18 8	-0.01 0.05 -0.04	0.01 -0.01 0.00	-0.05 -0.17 0.05	
19 8	-0.10 -0.09 -0.03	-0.06 -0.08 -0.01	0.03 0.01 0.02	
20 1	-0.25 0.02 -0.05	-0.10 -0.04 0.02	0.30 -0.16 0.17	
21 8	-0.18 -0.14 -0.17	-0.29 0.15 -0.03	-0.02 -0.03 -0.03	
22 1	-0.24 0.02 -0.07	-0.42 0.01 0.12	-0.05 0.04 0.03	
23 1	-0.08 -0.39 -0.36	0.07 -0.05 -0.10	-0.03 -0.01 -0.02	

	13	14	15	
	A	A	A	
Frequencies --	292.7045		338.9078	345.8926
Red. masses --	6.3701		3.3129	2.2297
Frc consts --	0.3216		0.2242	0.1572
IR Inten --	2.5740		43.5063	37.5194
Raman Activ --	1.6770		0.5800	2.1074
Depolar (P) --	0.5825		0.6513	0.0820
Depolar (U) --	0.7362		0.7888	0.1516
Atom AN	X Y Z	X Y Z	X Y Z	
1 6	0.08 0.02 0.03	0.00 -0.01 0.08	0.02 0.02 -0.05	
2 6	-0.02 0.08 0.03	0.00 0.01 -0.11	0.00 0.01 0.04	
3 6	0.04 0.00 -0.02	-0.02 -0.01 0.01	0.01 0.01 0.11	
4 6	0.14 -0.03 0.02	0.00 -0.03 0.08	0.05 0.04 -0.08	
5 6	-0.05 -0.06 0.07	-0.01 -0.01 0.07	-0.02 -0.01 0.05	
6 6	-0.09 0.16 -0.04	0.04 0.04 -0.12	-0.01 -0.01 0.02	
7 6	0.02 -0.06 -0.05	-0.02 -0.01 -0.11	0.01 0.00 0.01	
8 1	-0.02 0.04 -0.06	-0.03 -0.01 0.01	0.00 0.02 0.22	
9 8	0.18 -0.04 0.04	-0.12 -0.01 0.00	0.13 0.03 -0.02	
10 8	0.21 -0.06 -0.03	0.12 -0.03 0.04	-0.05 0.04 -0.04	
11 6	-0.03 -0.05 0.04	-0.02 -0.02 0.05	-0.01 0.01 -0.11	
12 6	-0.07 -0.12 0.02	-0.02 0.01 0.06	-0.04 -0.02 0.04	
13 8	-0.13 0.22 0.00	-0.01 0.17 -0.04	0.03 -0.04 0.00	
14 8	-0.13 0.15 -0.08	0.11 -0.10 -0.04	-0.06 0.01 -0.03	
15 1	0.01 -0.06 -0.11	-0.02 -0.01 -0.25	0.01 0.00 0.02	
16 1	0.25 0.05 -0.12	-0.06 -0.26 -0.06	-0.04 -0.01 0.10	
17 1	-0.02 0.01 0.05	-0.02 -0.03 0.11	-0.01 0.04 -0.26	



18	8	-0.12	-0.16	-0.05	-0.06	-0.03	0.00	-0.08	-0.08	0.00
19	8	-0.11	-0.12	0.01	0.03	0.07	0.03	-0.01	0.02	0.02
20	1	-0.23	-0.04	-0.05	0.01	0.07	-0.08	-0.04	0.03	-0.05
21	8	0.09	0.02	0.03	-0.05	0.02	0.03	0.00	0.01	0.05
22	1	0.19	0.08	-0.11	-0.19	-0.17	0.24	-0.10	-0.06	0.23
23	1	-0.30	0.46	0.30	0.54	-0.45	-0.21	0.52	-0.59	-0.31
		16			17			18		
		A			A			A		
Frequencies --		358.3918			386.3949			414.4478		
Red. masses --		2.8667			5.7351			6.0334		
Frc consts --		0.2169			0.5045			0.6106		
IR Inten --		56.3762			13.7352			11.1621		
Raman Activ --		0.5343			1.6719			6.6212		
Depolar (P) --		0.7385			0.5756			0.1056		
Depolar (U) --		0.8496			0.7306			0.1910		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	-0.06	0.00	0.06	0.04	-0.02	0.16	0.10
2	6	0.00	-0.02	-0.08	0.07	0.02	0.06	-0.01	0.08	0.02
3	6	-0.05	-0.02	0.13	0.19	0.11	0.06	-0.05	0.19	-0.08
4	6	0.02	0.01	-0.03	-0.11	0.04	-0.01	0.05	0.09	0.08
5	6	-0.02	0.00	0.06	0.07	-0.05	0.11	-0.08	0.11	-0.09
6	6	0.04	-0.03	-0.03	0.09	0.03	-0.02	0.07	-0.08	0.01
7	6	-0.05	-0.02	-0.04	0.21	0.08	-0.04	-0.06	0.20	0.01
8	1	-0.06	-0.01	0.30	0.27	0.05	0.07	-0.06	0.20	-0.21
9	8	0.10	-0.02	0.02	-0.15	0.04	-0.05	0.11	-0.07	0.00
10	8	-0.01	0.02	-0.01	-0.22	0.02	0.01	0.10	-0.01	-0.02
11	6	-0.05	-0.02	-0.10	0.22	0.04	-0.03	-0.04	0.16	0.08
12	6	-0.05	0.03	0.09	-0.02	-0.10	0.04	-0.12	0.00	-0.07
13	8	0.00	0.01	-0.01	-0.05	0.08	-0.03	0.10	-0.15	-0.05
14	8	0.12	-0.08	0.05	0.08	-0.08	-0.01	0.08	-0.18	0.04
15	1	-0.05	-0.02	-0.06	0.15	0.06	-0.13	-0.08	0.19	0.03
16	1	0.03	0.09	-0.03	-0.12	0.12	0.13	-0.06	-0.17	-0.22
17	1	-0.05	-0.04	-0.21	0.22	0.15	-0.13	-0.04	0.17	0.20
18	8	-0.09	-0.03	0.02	-0.09	-0.16	-0.06	-0.07	-0.17	-0.01
19	8	0.06	0.13	0.04	-0.09	-0.11	0.02	-0.10	-0.10	0.02
20	1	0.09	0.08	-0.12	-0.35	0.07	-0.10	0.08	-0.18	0.32
21	8	-0.03	-0.01	-0.07	-0.01	-0.01	-0.03	-0.02	-0.01	-0.03
22	1	0.06	0.08	-0.22	0.11	0.13	-0.21	-0.10	-0.21	0.07
23	1	-0.52	0.53	0.25	-0.39	0.11	-0.02	0.15	0.23	0.21
		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies --		475.2256			524.6552			537.6940		
Red. masses --		1.1465			1.4204			3.2047		
Frc consts --		0.1525			0.2304			0.5459		
IR Inten --		38.8947			74.0798			42.2589		
Raman Activ --		1.2640			0.9396			0.3841		
Depolar (P) --		0.5632			0.7306			0.6575		
Depolar (U) --		0.7206			0.8443			0.7933		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.00	0.03	0.01	-0.01	0.06	-0.02	-0.05	0.08
2	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.05	-0.07	-0.03	-0.06
3	6	-0.02	0.00	-0.01	0.02	-0.02	0.02	0.00	-0.06	0.15
4	6	0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.01	-0.05
5	6	-0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.04	0.01	-0.04	0.06	0.08
6	6	0.02	-0.01	0.01	0.02	0.02	-0.01	-0.06	-0.05	-0.04
7	6	-0.02	0.01	0.00	0.02	-0.04	-0.02	-0.01	0.05	-0.19
8	1	-0.02	0.01	-0.03	0.01	-0.02	-0.04	0.04	-0.09	0.19
9	8	0.00	0.01	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.08	0.00	0.00
10	8	0.02	-0.02	-0.02	-0.05	0.01	-0.02	-0.05	0.02	-0.06
11	6	-0.02	0.01	0.01	0.03	-0.04	0.03	-0.06	0.08	0.17

12	6	-0.02	0.01	-0.01	-0.06	0.01	-0.04	0.07	0.00	-0.05
13	8	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.04	0.00	0.03	-0.01	0.02
14	8	0.02	-0.02	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.01	0.03
15	1	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.04	-0.11	0.07	0.09	-0.51
16	1	0.05	-0.03	0.08	0.07	0.16	0.05	0.27	0.46	0.12
17	1	-0.02	0.00	0.04	0.03	-0.03	0.00	-0.05	0.10	0.22
18	8	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.03	0.02	0.09	0.03	-0.03
19	8	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.06	-0.02	-0.10	-0.02
20	1	0.09	-0.05	0.08	0.69	-0.42	0.48	-0.28	0.10	-0.04
21	8	0.01	0.02	0.05	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.00	-0.01
22	1	0.24	0.36	-0.31	-0.06	-0.01	0.08	-0.10	0.14	0.13
23	1	-0.50	-0.45	-0.47	0.08	0.05	0.06	0.02	-0.02	-0.01

22

23

24

A

A

A

Frequencies --	575.3289	593.2736	621.9502
Red. masses --	1.3997	4.7210	4.1030
Frc consts --	0.2730	0.9790	0.9351
IR Inten --	137.4525	7.2780	21.8910
Raman Activ --	2.7752	0.6239	0.7958
Depolar (P) --	0.5379	0.7375	0.7500
Depolar (U) --	0.6995	0.8489	0.8571

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	-0.01	0.05	-0.01	-0.11	0.01	0.06	-0.05	0.28
2	6	0.01	-0.01	0.03	-0.06	-0.02	0.26	-0.01	-0.03	0.05
3	6	-0.01	0.00	-0.07	-0.04	-0.14	-0.07	0.03	-0.12	-0.03
4	6	-0.03	0.00	0.02	0.01	-0.07	-0.09	0.07	0.13	-0.01
5	6	0.00	0.00	-0.05	-0.07	0.09	0.18	-0.04	0.01	-0.23
6	6	0.03	0.00	-0.01	0.06	0.03	-0.08	-0.01	0.00	-0.02
7	6	0.00	0.00	0.07	-0.02	0.03	0.15	0.04	-0.10	0.00
8	1	0.00	0.00	-0.16	0.00	-0.17	-0.36	0.01	-0.11	-0.32
9	8	0.00	-0.03	0.03	0.04	0.03	0.01	0.08	0.04	-0.09
10	8	0.01	-0.03	-0.05	-0.01	0.04	0.03	-0.13	0.04	-0.02
11	6	0.01	-0.01	-0.04	-0.15	0.12	-0.09	-0.03	-0.02	0.04
12	6	-0.02	0.00	0.01	0.06	0.02	-0.06	-0.09	0.05	-0.04
13	8	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.12	-0.05	-0.02	0.03	0.00
14	8	0.02	-0.02	-0.01	0.10	-0.10	-0.04	0.02	0.01	-0.01
15	1	0.00	-0.01	0.14	0.14	0.11	0.03	0.11	-0.07	-0.06
16	1	0.50	0.70	0.12	-0.17	-0.23	0.03	-0.35	-0.34	0.01
17	1	0.01	-0.01	-0.05	-0.16	0.17	-0.55	-0.02	0.01	0.22
18	8	-0.01	-0.01	0.01	0.09	0.02	-0.03	-0.03	-0.04	0.06
19	8	0.02	0.02	0.03	-0.03	-0.08	-0.02	0.07	0.05	0.07
20	1	-0.13	0.10	-0.15	-0.13	0.02	0.13	-0.29	0.24	-0.37
21	8	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01	-0.01
22	1	-0.15	0.20	0.21	0.03	-0.09	-0.07	0.05	-0.14	-0.09
23	1	0.07	-0.05	-0.03	-0.02	0.06	0.04	0.00	0.09	0.07

25

26

27

A

A

A

Frequencies --	670.7300	697.3731	725.5748
Red. masses --	4.3485	5.4917	5.9700
Frc consts --	1.1526	1.5736	1.8518
IR Inten --	119.3275	67.6311	3.6037
Raman Activ --	3.0987	2.1780	0.3877
Depolar (P) --	0.1638	0.5100	0.4055
Depolar (U) --	0.2815	0.6755	0.5770

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.08	0.05	0.02	0.19	0.08	-0.05	-0.04	-0.02	-0.15
2	6	-0.14	0.04	0.03	-0.01	0.22	-0.01	0.04	0.01	0.25
3	6	0.09	0.13	0.00	0.10	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.12
4	6	-0.05	-0.01	-0.02	0.15	-0.06	0.00	-0.06	-0.22	-0.17
5	6	-0.15	-0.11	0.03	-0.09	0.07	0.00	-0.01	0.00	-0.18

6	6	-0.03	0.03	-0.03	-0.02	0.12	0.03	0.23	0.12	0.16
7	6	0.07	-0.01	0.01	0.05	-0.20	-0.02	-0.03	0.01	-0.18
8	1	0.10	0.11	-0.08	-0.12	0.18	0.15	-0.02	0.01	0.44
9	8	0.05	-0.02	0.05	-0.10	0.11	-0.12	-0.01	0.03	0.08
10	8	0.04	0.05	-0.04	-0.07	-0.12	0.12	0.05	0.05	0.03
11	6	0.02	-0.01	0.01	-0.22	-0.01	0.01	0.01	-0.02	0.11
12	6	-0.09	-0.18	0.00	0.02	-0.03	0.03	-0.12	0.09	-0.13
13	8	0.05	0.00	-0.04	0.10	-0.06	-0.10	-0.06	0.03	-0.07
14	8	0.01	-0.07	0.04	-0.04	-0.12	0.08	-0.01	-0.06	-0.08
15	1	-0.03	-0.05	-0.08	0.15	-0.15	0.08	-0.05	0.00	0.09
16	1	-0.10	-0.11	-0.15	0.26	0.21	0.48	0.03	0.00	0.08
17	1	0.03	0.18	-0.09	-0.21	0.12	0.08	0.02	-0.08	0.53
18	8	-0.03	0.18	0.15	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.03	0.05
19	8	0.15	-0.08	-0.13	-0.01	0.00	-0.01	0.05	0.01	0.05
20	1	0.10	-0.15	-0.75	0.02	-0.02	-0.01	-0.14	0.11	-0.14
21	8	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.00
22	1	0.04	0.00	-0.05	-0.11	0.17	0.17	0.00	-0.08	-0.02
23	1	-0.05	-0.06	-0.06	-0.02	0.15	0.11	0.05	0.03	0.03

28

29

30

A

A

A

Frequencies --	762.6021	771.5174	788.0806
Red. masses --	2.3968	4.7758	5.5225
Frc consts --	0.8213	1.6749	2.0208
IR Inten --	53.6681	22.5366	14.3634
Raman Activ --	2.9389	15.9243	1.6622
Depolar (P) --	0.3966	0.0327	0.3062
Depolar (U) --	0.5680	0.0633	0.4689

Atom AN

X

Y

Z

X

Y

Z

X

Y

Z

1	6	0.02	-0.05	-0.04	0.05	-0.02	0.04	-0.05	-0.02	0.22
2	6	0.01	-0.03	0.05	0.08	-0.07	-0.03	-0.04	0.03	0.01
3	6	-0.02	-0.11	-0.04	-0.10	0.02	0.01	0.00	0.02	-0.02
4	6	0.02	0.15	0.12	0.17	-0.13	-0.11	-0.06	-0.22	-0.21
5	6	-0.01	0.03	0.00	0.05	-0.01	-0.03	0.03	0.01	-0.14
6	6	0.08	0.00	0.04	0.02	-0.11	-0.01	-0.08	0.04	-0.05
7	6	0.00	0.05	-0.08	-0.12	0.23	0.04	-0.02	0.05	-0.04
8	1	0.04	-0.14	0.44	-0.05	-0.01	-0.20	0.06	-0.02	-0.09
9	8	-0.01	-0.03	-0.04	-0.01	0.13	-0.12	0.05	0.03	0.08
10	8	-0.02	-0.03	-0.02	-0.02	-0.11	0.15	0.00	0.10	-0.02
11	6	-0.06	0.09	-0.04	0.06	0.06	0.01	0.01	0.01	-0.07
12	6	0.03	-0.10	0.09	-0.07	-0.09	0.04	0.22	-0.15	0.27
13	8	-0.03	0.01	0.00	-0.06	0.00	0.08	0.06	0.01	-0.04
14	8	0.01	0.01	-0.04	0.03	0.07	-0.07	-0.01	-0.04	0.06
15	1	0.18	0.11	0.60	-0.15	0.23	-0.18	-0.03	0.04	0.43
16	1	-0.01	0.03	-0.10	0.17	-0.01	0.53	-0.08	-0.09	0.10
17	1	-0.04	0.08	0.44	0.04	-0.09	-0.08	0.02	-0.08	0.56
18	8	-0.04	0.04	0.01	-0.07	0.04	0.08	-0.04	0.01	-0.11
19	8	0.00	-0.03	-0.06	0.05	-0.06	-0.08	-0.09	0.07	-0.02
20	1	0.11	-0.12	-0.13	0.13	-0.16	-0.35	0.17	-0.09	0.17
21	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
22	1	0.01	-0.03	-0.02	-0.08	0.07	0.11	0.02	-0.03	-0.02
23	1	0.02	-0.02	-0.01	0.04	0.14	0.11	-0.03	0.02	0.00

31

32

33

A

A

A

Frequencies --	809.1850	838.5643	858.5974
Red. masses --	2.7195	8.2293	6.5579
Frc consts --	1.0492	3.4095	2.8484
IR Inten --	22.1258	53.8884	4.3495
Raman Activ --	1.4374	6.1586	1.1012
Depolar (P) --	0.7147	0.1361	0.7461
Depolar (U) --	0.8336	0.2396	0.8546

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.03	-0.02	-0.03	-0.11	-0.05	0.02	0.02	-0.28
2	6	0.03	0.02	-0.10	0.02	-0.04	0.02	-0.01	-0.01	0.35
3	6	-0.01	-0.08	0.05	-0.16	-0.19	0.01	0.02	0.02	0.11
4	6	-0.03	0.02	0.02	0.05	0.08	0.06	0.01	0.10	0.10
5	6	0.00	0.03	-0.09	0.10	-0.05	0.01	0.02	0.02	-0.29
6	6	0.17	0.09	0.17	-0.17	0.35	0.00	-0.19	-0.11	-0.22
7	6	0.01	0.02	0.09	-0.09	0.21	0.01	-0.01	-0.01	0.01
8	1	0.02	-0.11	-0.39	0.04	-0.35	-0.01	-0.01	0.03	-0.14
9	8	-0.01	-0.03	0.02	0.01	0.00	-0.04	-0.03	-0.02	-0.02
10	8	0.00	0.02	-0.03	0.00	-0.04	0.01	0.02	-0.05	0.01
11	6	-0.06	0.05	0.06	0.25	0.00	0.00	0.01	0.00	0.12
12	6	0.06	-0.08	0.11	-0.07	0.02	-0.06	0.09	-0.08	0.15
13	8	-0.03	-0.03	-0.04	0.19	0.04	-0.24	0.04	0.06	0.04
14	8	-0.05	-0.01	-0.03	-0.16	-0.13	0.24	0.08	0.00	0.03
15	1	0.12	0.09	-0.71	-0.09	0.21	-0.03	-0.04	0.00	-0.64
16	1	-0.02	0.03	-0.10	-0.01	-0.07	0.01	0.02	0.02	-0.11
17	1	-0.07	0.08	-0.33	0.23	-0.25	-0.03	0.00	0.00	-0.17
18	8	-0.04	0.02	-0.02	-0.01	-0.02	0.03	-0.04	0.00	-0.04
19	8	-0.02	0.01	-0.03	0.02	-0.02	0.01	-0.03	0.05	0.00
20	1	0.08	-0.06	-0.05	-0.02	-0.01	-0.11	0.07	-0.03	-0.03
21	8	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.04	-0.10	-0.06	-0.07	0.25	0.16	-0.04	0.13	0.07
23	1	0.03	-0.02	0.00	-0.10	0.02	-0.01	-0.04	-0.02	-0.03

34

35

36

A

A

A

Frequencies --	924.7406	947.7576	982.0838
Red. masses --	6.6514	1.4193	1.0996
Frc consts --	3.3512	0.7511	0.6248
IR Inten --	14.1831	0.1794	212.3327
Raman Activ --	0.4551	0.2663	1.2660
Depolar (P) --	0.6660	0.7154	0.2499
Depolar (U) --	0.7995	0.8341	0.3998

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.24	0.04	0.01	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.01	-0.01
2	6	0.29	0.14	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01
3	6	-0.04	-0.13	-0.01	0.01	0.01	0.11	0.00	0.01	0.01
4	6	-0.13	-0.12	-0.03	0.00	0.02	0.02	0.02	-0.01	0.01
5	6	0.21	0.16	0.02	0.00	0.00	0.05	-0.01	-0.01	0.00
6	6	-0.14	-0.06	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01
7	6	-0.01	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01
8	1	-0.20	-0.01	0.04	0.03	-0.01	-0.64	0.01	0.00	-0.05
9	8	-0.08	-0.07	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02
10	8	-0.03	0.13	-0.12	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.01
11	6	-0.11	0.06	-0.01	-0.01	0.00	-0.13	0.01	-0.01	0.00
12	6	-0.14	0.01	-0.03	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
13	8	0.04	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
14	8	0.00	0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03
15	1	0.32	0.14	-0.10	0.00	0.00	-0.13	-0.04	0.00	0.04
16	1	-0.08	0.12	-0.22	0.01	0.00	-0.02	0.17	0.26	0.05
17	1	-0.13	-0.15	0.07	0.01	-0.07	0.73	0.01	-0.01	-0.02
18	8	-0.11	-0.02	0.11	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.05	-0.11	-0.07	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.09	-0.19	-0.33	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.01
21	8	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.02
22	1	0.09	-0.21	-0.15	-0.01	0.02	0.01	0.27	-0.74	-0.50
23	1	0.00	-0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.07	-0.05

37

38

39

A

A

A

Frequencies --	988.3143	1092.7331	1143.1877
----------------	----------	-----------	-----------

Red. masses --	1.3288	2.8110	7.8368
Frc consts --	0.7647	1.9776	6.0342
IR Inten --	1.2576	12.3398	60.2942
Raman Activ --	0.1033	31.3201	0.1926
Depolar (P) --	0.7498	0.0578	0.3888
Depolar (U) --	0.8570	0.1092	0.5599

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	0.02	0.00	-0.05	0.00	0.28	0.02	-0.02
2	6	-0.01	-0.01	0.02	0.06	-0.13	0.00	-0.12	0.29	0.00
3	6	0.00	0.01	-0.10	0.20	0.12	-0.01	0.01	-0.14	0.00
4	6	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.02	0.10	-0.08	0.10
5	6	-0.01	0.00	0.01	0.05	-0.04	-0.01	-0.19	-0.22	0.02
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.01	-0.02	0.01
7	6	0.01	0.00	0.11	-0.06	0.11	0.00	-0.10	0.23	0.01
8	1	-0.01	0.02	0.61	0.63	-0.18	0.05	0.26	-0.31	-0.01
9	8	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.04	0.06
10	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.06	0.11	-0.13
11	6	0.01	0.00	-0.07	-0.23	-0.05	0.01	0.08	-0.09	-0.01
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.16	-0.13
13	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.03	-0.04	-0.07	0.08
14	8	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.03	0.08	-0.01	-0.09
15	1	-0.02	0.01	-0.64	-0.07	0.13	0.00	-0.04	0.27	0.00
16	1	0.01	0.01	0.02	-0.02	-0.01	-0.01	-0.07	-0.04	0.09
17	1	0.02	-0.03	0.42	-0.29	-0.55	-0.06	0.05	-0.34	0.00
18	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.11	0.03	-0.06
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.07	0.14	0.16
20	1	-0.01	0.01	0.01	0.03	-0.01	-0.03	0.14	-0.06	-0.17
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01
22	1	0.02	-0.06	-0.04	0.00	0.01	0.01	-0.03	0.04	0.03
23	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02

40

41

42

A

A

A

Frequencies --	1170.7083	1185.8448	1209.2535
Red. masses --	1.7511	2.2051	1.6843
Frc consts --	1.4140	1.8270	1.4511
IR Inten --	99.0806	29.2824	127.8603
Raman Activ --	3.2400	12.0701	5.6055
Depolar (P) --	0.7488	0.2304	0.3295
Depolar (U) --	0.8563	0.3745	0.4957

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	0.03	0.00	0.11	-0.03	-0.01	-0.05	0.05	0.01
2	6	0.06	-0.03	0.00	0.07	-0.18	0.00	0.05	0.05	-0.01
3	6	-0.06	0.01	0.00	0.00	0.06	0.00	0.01	-0.05	-0.01
4	6	-0.05	0.02	-0.05	0.05	-0.04	0.04	-0.07	0.03	-0.06
5	6	0.00	-0.07	0.00	-0.02	-0.08	0.00	0.06	0.00	0.01
6	6	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
7	6	0.09	0.03	0.00	-0.04	-0.01	0.00	-0.03	-0.04	0.00
8	1	-0.30	0.19	-0.01	-0.36	0.34	-0.03	0.45	-0.39	0.02
9	8	0.02	0.01	-0.01	-0.04	-0.02	0.03	0.02	0.01	-0.02
10	8	0.02	-0.04	0.05	-0.03	0.05	-0.06	0.03	-0.05	0.06
11	6	-0.06	-0.01	0.00	-0.03	0.09	0.00	-0.02	0.04	0.00
12	6	-0.01	-0.07	-0.06	0.00	-0.05	-0.03	-0.02	-0.05	-0.05
13	8	0.01	0.01	0.00	0.01	0.03	-0.03	0.00	0.00	0.01
14	8	-0.01	0.01	0.02	-0.03	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00
15	1	0.79	0.34	0.00	-0.27	-0.11	0.00	-0.34	-0.18	-0.01
16	1	0.02	0.03	-0.07	-0.03	-0.05	0.10	0.02	0.07	-0.15
17	1	-0.07	-0.08	0.00	0.02	0.73	0.07	0.02	0.45	0.04
18	8	0.04	0.01	-0.02	0.03	0.01	-0.02	0.03	0.00	-0.02
19	8	-0.04	0.06	0.08	-0.02	0.04	0.05	-0.05	0.03	0.07
20	1	0.12	-0.10	-0.19	0.08	-0.06	-0.12	0.19	-0.21	-0.35

21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01
23	1	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.02	-0.02
		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies --		1248.7550			1284.7217			1326.0940		
Red. masses --		1.6586			1.9124			7.5200		
Frc consts --		1.5239			1.8597			7.7914		
IR Inten --		69.2520			224.2532			7.4497		
Raman Activ --		9.8707			8.8980			2.7859		
Depolar (P) --		0.1788			0.1351			0.7476		
Depolar (U) --		0.3034			0.2380			0.8556		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.07	0.00	-0.16	0.05	-0.02	0.04	0.35	0.00
2	6	-0.07	-0.02	0.00	0.03	0.02	0.00	-0.34	-0.14	0.00
3	6	0.02	0.03	0.00	-0.06	0.02	0.00	0.21	-0.17	-0.01
4	6	0.02	0.00	0.02	0.11	-0.04	0.08	0.00	-0.03	-0.02
5	6	0.03	0.16	0.02	0.05	0.01	0.00	0.28	-0.17	-0.01
6	6	0.01	0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.02	0.02	0.03
7	6	0.02	-0.04	0.00	0.03	-0.05	0.00	-0.24	-0.12	0.01
8	1	-0.25	0.23	-0.01	0.28	-0.25	0.00	-0.17	0.11	0.00
9	8	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.02	-0.02	0.00	0.02
10	8	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.05	-0.11	0.01	0.00	0.00
11	6	0.04	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.04	0.27	0.01
12	6	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.05	0.00
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01
14	8	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.02
15	1	-0.19	-0.13	0.01	0.26	0.05	-0.01	0.45	0.19	-0.02
16	1	-0.01	-0.03	0.05	0.10	-0.28	0.75	0.04	0.01	0.07
17	1	0.01	-0.50	-0.04	0.00	0.16	0.01	-0.01	-0.34	-0.03
18	8	0.03	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.01
19	8	-0.06	0.00	0.06	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00
20	1	0.27	-0.34	-0.57	0.06	-0.08	-0.12	0.04	-0.04	-0.06
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.05	-0.03	0.00	-0.01	-0.01
23	1	0.00	0.01	0.01	0.02	0.07	0.06	0.01	0.00	0.01
		46			47			48		
		A			A			A		
Frequencies --		1392.9636			1394.6359			1430.1191		
Red. masses --		7.4099			2.2593			2.6216		
Frc consts --		8.4711			2.5891			3.1591		
IR Inten --		204.6828			142.4347			195.4763		
Raman Activ --		8.5925			7.2362			18.3737		
Depolar (P) --		0.2269			0.1743			0.0435		
Depolar (U) --		0.3699			0.2969			0.0834		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.10	-0.07	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.07	-0.04	0.00
2	6	0.04	-0.06	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.01	0.02	0.00
3	6	0.01	0.04	0.00	-0.03	0.05	0.00	0.06	-0.03	0.00
4	6	0.04	-0.02	0.02	0.08	-0.07	0.04	-0.18	0.15	-0.09
5	6	0.14	0.05	0.00	-0.01	-0.06	-0.01	-0.02	-0.08	-0.01
6	6	-0.27	0.40	0.06	-0.05	0.07	0.02	-0.06	0.08	0.01
7	6	0.02	-0.03	0.00	-0.03	0.01	0.00	-0.01	0.07	0.00
8	1	-0.14	0.14	0.01	0.13	-0.07	0.00	-0.20	0.17	0.00
9	8	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.02	0.01	-0.03	0.03
10	8	-0.02	0.00	0.01	-0.04	0.02	0.02	0.07	-0.05	0.00
11	6	-0.04	0.07	0.01	-0.01	-0.08	0.00	-0.03	-0.04	0.00
12	6	-0.02	-0.19	-0.10	0.02	0.21	0.11	0.01	0.14	0.07
13	8	-0.05	-0.19	0.17	-0.01	-0.03	0.02	-0.01	-0.04	0.04
14	8	0.23	-0.07	-0.21	0.04	-0.02	-0.04	0.05	-0.01	-0.04

15	1	-0.11	-0.09	0.00	0.28	0.16	-0.01	-0.11	0.03	0.00
16	1	0.01	0.14	-0.22	-0.09	0.23	-0.56	0.16	-0.29	0.75
17	1	-0.04	0.02	-0.01	0.03	0.31	0.02	-0.02	0.14	0.01
18	8	-0.04	0.02	0.04	0.03	-0.03	-0.03	0.02	-0.02	-0.02
19	8	0.03	0.06	0.01	-0.03	-0.07	-0.02	-0.01	-0.04	-0.01
20	1	-0.21	0.29	0.46	0.18	-0.27	-0.43	0.09	-0.14	-0.22
21	8	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
22	1	-0.02	-0.07	-0.02	-0.02	0.03	0.03	0.02	-0.07	-0.06
23	1	-0.04	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.04	0.03	0.05	0.04

	49 A	50 A	51 A
Frequencies --	1471.9108	1507.7199	1645.1571
Red. masses --	4.0322	2.8423	7.3551
Frc consts --	5.1471	3.8068	11.7288
IR Inten --	14.0555	21.8650	10.1564
Raman Activ --	4.8163	0.6270	18.8633
Depolar (P) --	0.1933	0.5394	0.7398
Depolar (U) --	0.3240	0.7008	0.8505

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.15	-0.22	0.00	-0.13	0.10	0.00	0.20	0.14	0.00
2	6	-0.10	0.24	0.01	0.11	0.03	0.00	-0.33	-0.13	0.00
3	6	0.14	-0.03	0.00	0.02	-0.14	0.00	-0.26	0.01	0.01
4	6	0.05	-0.01	0.05	0.06	-0.05	0.03	-0.02	0.01	-0.03
5	6	0.26	-0.07	-0.01	-0.05	-0.17	-0.01	0.26	0.04	0.00
6	6	0.05	-0.08	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.05
7	6	-0.04	0.10	0.00	0.18	0.07	0.00	0.38	0.17	-0.01
8	1	-0.46	0.43	0.00	-0.34	0.10	0.00	0.08	-0.28	0.00
9	8	0.02	0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.02
10	8	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.08	-0.08	0.00	-0.08	0.13	0.01	-0.17	-0.20	0.00
12	6	-0.01	-0.01	-0.04	0.01	0.08	0.04	0.01	-0.01	-0.03
13	8	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.02	-0.02
14	8	-0.02	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01
15	1	-0.09	0.10	0.00	-0.61	-0.29	0.01	-0.46	-0.20	0.01
16	1	-0.04	0.02	-0.12	-0.02	0.06	-0.13	0.01	0.00	0.03
17	1	-0.04	0.54	0.03	-0.15	-0.44	-0.02	-0.16	0.26	0.02
18	8	-0.03	-0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	0.02
19	8	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.02	0.06	0.04	-0.05	-0.09	0.01	0.00	0.02
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	0.02	0.01	-0.01	0.01	0.02	0.01	0.00	-0.03
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.01

	52 A	53 A	54 A
Frequencies --	1664.5125	1696.1064	1729.9781
Red. masses --	6.5067	1.0938	10.6006
Frc consts --	10.6215	1.8539	18.6923
IR Inten --	9.3714	40.5394	556.0511
Raman Activ --	32.6496	0.5858	12.2737
Depolar (P) --	0.7477	0.6102	0.7417
Depolar (U) --	0.8556	0.7580	0.8517

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.13	-0.29	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
2	6	-0.07	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.03	-0.01
3	6	-0.24	0.26	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
4	6	-0.04	0.04	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.01
5	6	0.12	-0.27	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00
6	6	0.01	-0.02	0.00	0.02	0.01	-0.02	-0.41	-0.31	0.58
7	6	0.06	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
8	1	0.42	-0.23	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00





3	6	-0.03	-0.04	0.00	-0.02	-0.02	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	0.01	0.00	-0.01
7	6	0.02	-0.02	0.00	0.03	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00
8	1	0.37	0.50	-0.01	0.20	0.27	0.00	0.00	0.01	0.00
9	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
11	6	-0.06	0.01	0.00	0.05	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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
15	1	-0.13	0.28	0.01	-0.29	0.65	0.02	0.00	0.00	0.00
16	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.06	-0.04
17	1	0.71	-0.06	-0.02	-0.60	0.05	0.02	-0.01	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	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00	0.03
22	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.83	0.04	-0.53
23	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03	0.05

		61			62			63		
		A			A			A		
Frequencies --		3548.9336			3863.6176			3940.0062		
Red. masses --		1.0662			1.0642			1.0648		
Frc consts --		7.9120			9.3600			9.7388		
IR Inten --		807.8973			72.5934			37.6174		
Raman Activ --		101.7664			141.6030			46.8750		
Depolar (P) --		0.2257			0.2582			0.1830		
Depolar (U) --		0.3683			0.4104			0.3094		
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	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	8	-0.05	0.03	0.02	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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	8	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	1	0.81	-0.49	-0.27	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
17	1	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	0.04	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	-0.58	-0.80	0.12	0.00	0.00	0.00
21	8	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.05
22	1	0.13	-0.01	0.08	0.00	0.00	0.00	0.04	0.02	0.00
23	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.62	0.76

HEM H2O

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 --			21.7495			39.2740			59.6302		
Red. masses --			10.6412			6.9155			6.9831		
Frc consts --			0.0030			0.0063			0.0146		
IR Inten --			1.9610			1.3895			0.9815		
Raman Activ --			0.6445			0.1404			0.0999		
Depolar (P) --			0.7496			0.7495			0.7212		
Depolar (U) --			0.8569			0.8568			0.8380		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8		0.00	0.02	0.05	0.01	0.02	0.39	0.00	0.05	0.22
2	1		0.04	-0.19	0.11	-0.15	0.05	0.54	-0.11	-0.13	0.41
3	1		0.00	0.03	0.30	0.01	0.01	0.20	0.00	0.04	0.30
4	6		0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.12	0.00	-0.01	-0.02
5	6		0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.08	0.01	-0.01	0.02
6	6		0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.14	0.00	-0.01	0.06
7	6		0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.10	0.00	-0.02	-0.12
8	6		0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.07
9	6		0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.10	-0.01	-0.01	-0.03
10	6		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.01	0.00	0.17
11	1		0.00	0.00	-0.07	0.00	-0.01	-0.17	-0.01	-0.01	0.03
12	8		0.00	0.03	0.37	0.00	-0.01	-0.20	-0.01	0.00	0.05
13	8		0.00	-0.04	-0.37	-0.01	0.01	0.06	0.01	-0.03	-0.39
14	6		0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.16
15	6		0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.11	0.01	0.01	0.02
16	8		0.23	-0.04	-0.05	-0.06	-0.02	-0.11	-0.06	-0.04	-0.05
17	8		-0.21	0.04	0.00	0.07	0.01	-0.12	0.03	0.03	-0.06
18	1		0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.14	-0.01	0.00	0.25
19	1		0.00	-0.03	-0.29	-0.01	0.01	0.15	0.01	-0.02	-0.31
20	1		0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.21
21	8		0.02	0.07	-0.35	0.04	0.01	0.06	-0.02	-0.03	0.21
22	8		-0.04	-0.07	0.35	-0.03	-0.01	0.30	0.05	0.05	-0.27
23	1		-0.03	-0.05	0.28	-0.02	0.00	0.37	0.04	0.04	-0.27
24	1		-0.19	0.03	-0.01	0.07	0.01	-0.14	0.01	0.03	-0.09
			4			5			6		
			A			A			A		
Frequencies --			85.6143			90.7158			152.3458		
Red. masses --			8.1127			5.9929			8.5829		
Frc consts --			0.0350			0.0291			0.1174		
IR Inten --			3.5635			5.4212			2.8234		
Raman Activ --			1.5031			0.3454			1.7312		
Depolar (P) --			0.7459			0.7496			0.7480		
Depolar (U) --			0.8545			0.8569			0.8559		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8		0.07	-0.15	-0.09	-0.22	0.35	-0.05	0.03	-0.02	0.00
2	1		0.22	-0.25	-0.18	-0.20	0.53	-0.16	-0.01	0.07	0.00
3	1		0.14	-0.07	0.07	-0.40	0.17	0.03	0.05	-0.01	-0.15
4	6		0.01	0.04	0.04	-0.01	-0.10	0.02	0.01	-0.02	-0.10
5	6		0.00	0.02	0.04	0.02	-0.06	0.02	0.01	-0.02	-0.04
6	6		0.02	0.03	-0.08	-0.05	-0.09	-0.02	0.01	-0.02	-0.09
7	6		0.01	0.03	0.16	-0.02	-0.08	0.06	0.01	0.00	-0.08
8	6		0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.06
9	6		-0.04	0.02	-0.10	0.08	-0.07	-0.03	0.00	-0.01	-0.02
10	6		0.03	0.01	-0.19	-0.07	-0.05	-0.06	0.00	-0.01	0.02
11	1		0.03	0.04	-0.10	-0.07	-0.12	-0.01	0.00	-0.02	-0.13
12	8		0.04	0.04	0.32	-0.08	-0.07	0.09	-0.01	-0.01	-0.17
13	8		-0.01	0.01	0.06	0.03	-0.04	0.04	0.01	0.02	0.10
14	6		0.02	0.00	-0.13	-0.04	-0.01	-0.05	0.00	0.00	0.10

15	6	-0.01	-0.02	0.11	0.05	0.05	0.02	0.03	0.02	0.08
16	8	-0.08	-0.15	-0.20	0.11	-0.13	-0.06	0.36	-0.03	-0.04
17	8	-0.05	0.20	-0.20	0.09	-0.03	-0.05	-0.49	0.01	0.04
18	1	0.04	0.01	-0.31	-0.11	-0.04	-0.10	-0.01	-0.01	0.05
19	1	0.01	-0.02	0.06	-0.01	0.03	0.04	0.01	0.02	0.11
20	1	0.02	-0.01	-0.19	-0.06	0.03	-0.07	0.00	0.00	0.19
21	8	-0.03	-0.05	0.29	0.13	0.04	0.07	0.03	0.00	0.19
22	8	0.00	0.00	0.00	0.02	0.13	0.00	0.03	0.07	-0.07
23	1	-0.01	-0.02	0.10	0.05	0.17	0.02	0.04	0.07	-0.05
24	1	-0.08	0.18	-0.35	0.12	-0.04	-0.10	-0.60	0.03	0.08

		7		8		9				
		A		A		A				
Frequencies --		168.1038				169.9075				183.2099
Red. masses --		6.6738				7.7652				5.2673
Frc consts --		0.1111				0.1321				0.1042
IR Inten --		2.3987				0.9194				1.6729
Raman Activ --		1.5019				0.5646				0.9048
Depolar (P) --		0.7492				0.7391				0.7443
Depolar (U) --		0.8566				0.8500				0.8534

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.02	0.01	0.01	-0.20	-0.04	0.01	0.25	0.09	0.00
2	1	-0.11	0.01	0.15	-0.17	0.02	-0.05	0.02	-0.02	0.28
3	1	0.01	-0.01	-0.09	-0.25	-0.09	0.02	0.29	0.11	-0.14
4	6	0.01	-0.01	0.12	-0.03	0.06	-0.01	-0.04	-0.01	0.18
5	6	0.01	0.00	0.31	-0.01	0.08	0.03	-0.04	-0.01	0.07
6	6	0.00	-0.02	-0.15	-0.01	0.06	-0.05	-0.05	0.00	0.24
7	6	0.00	-0.02	-0.02	-0.02	0.01	-0.02	-0.03	0.02	0.00
8	6	0.01	0.00	0.26	-0.01	0.06	0.05	-0.05	-0.01	-0.10
9	6	-0.02	-0.01	0.16	0.16	0.06	0.00	0.03	-0.03	0.03
10	6	0.00	-0.01	-0.19	0.00	0.05	-0.03	-0.05	0.00	-0.02
11	1	0.00	-0.03	-0.36	0.00	0.07	-0.10	-0.05	-0.01	0.40
12	8	-0.01	-0.03	-0.15	0.03	0.00	-0.03	-0.05	0.00	-0.12
13	8	0.01	-0.01	-0.03	-0.06	-0.02	0.01	0.01	0.04	-0.10
14	6	0.00	0.00	0.05	0.01	0.06	0.04	-0.05	-0.01	-0.25
15	6	0.02	0.02	0.02	-0.11	-0.07	0.03	-0.06	-0.01	-0.01
16	8	-0.06	-0.23	0.04	0.36	0.03	-0.02	0.15	-0.09	0.00
17	8	-0.02	0.24	0.04	0.21	0.09	-0.01	0.02	0.02	0.01
18	1	-0.01	-0.02	-0.43	0.00	0.05	-0.06	-0.05	0.00	-0.07
19	1	0.01	-0.01	-0.08	-0.04	-0.06	0.02	-0.01	0.06	-0.17
20	1	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.05	0.05	-0.05	-0.01	-0.47
21	8	-0.01	0.06	-0.18	-0.30	-0.07	0.06	-0.04	-0.03	0.07
22	8	0.05	0.00	-0.07	-0.01	-0.24	-0.04	-0.08	0.01	0.05
23	1	0.05	0.02	-0.32	-0.12	-0.36	-0.05	-0.08	0.01	0.14
24	1	-0.07	0.21	-0.17	0.49	0.05	-0.07	0.13	0.00	-0.04

		10		11		12				
		A		A		A				
Frequencies --		187.0155				201.4397				257.6152
Red. masses --		5.1730				6.7406				1.1180
Frc consts --		0.1066				0.1612				0.0437
IR Inten --		1.0684				18.7280				128.5121
Raman Activ --		0.6379				0.2912				0.0926
Depolar (P) --		0.7195				0.4571				0.7114
Depolar (U) --		0.8369				0.6274				0.8314

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.32	0.12	-0.03	-0.12	-0.20	0.01	-0.03	0.00	0.05
2	1	0.35	0.10	-0.05	-0.12	-0.46	0.13	0.64	0.09	-0.65
3	1	0.38	0.18	-0.02	0.09	0.03	-0.02	0.10	0.14	0.34
4	6	-0.04	-0.03	-0.12	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.01	0.01
5	6	-0.05	-0.03	-0.03	-0.07	-0.05	0.03	-0.01	0.00	0.01
6	6	-0.06	-0.03	-0.19	0.05	0.02	-0.02	0.00	0.01	0.02

7	6	-0.04	0.02	0.01	-0.10	0.18	-0.01	0.00	0.01	-0.02
8	6	-0.07	0.00	0.09	-0.04	-0.10	0.03	-0.01	-0.01	0.00
9	6	0.02	-0.05	-0.02	0.02	-0.07	0.01	-0.01	-0.01	0.01
10	6	-0.07	-0.01	0.01	0.08	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	-0.07	-0.05	-0.32	0.09	0.07	-0.05	0.00	0.01	0.02
12	8	-0.04	0.02	0.10	-0.20	0.21	0.00	0.01	0.00	-0.03
13	8	0.00	0.05	0.08	-0.06	0.25	-0.01	-0.01	0.00	-0.02
14	6	-0.07	0.00	0.19	0.02	-0.11	0.03	0.00	-0.01	-0.02
15	6	-0.07	0.01	0.02	0.03	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00
16	8	0.05	-0.03	-0.01	0.13	-0.11	-0.01	0.01	-0.02	0.00
17	8	0.11	-0.10	-0.01	0.11	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.08	-0.01	0.03	0.14	-0.06	-0.02	0.01	0.00	0.00
19	1	-0.02	0.08	0.11	-0.06	0.27	-0.03	0.00	-0.02	0.03
20	1	-0.07	0.00	0.37	0.04	-0.16	0.04	0.00	-0.01	-0.04
21	8	-0.08	0.02	-0.03	0.19	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
22	8	-0.05	0.00	-0.05	-0.04	0.12	-0.02	-0.01	0.01	0.00
23	1	-0.06	0.01	-0.12	0.04	0.21	-0.06	-0.01	0.02	0.00
24	1	0.25	-0.11	0.01	0.36	-0.11	-0.02	0.02	0.00	-0.01

13				14				15				
A				A				A				
Frequencies --	285.5712				302.7144				358.5527			
Red. masses --	5.3863				9.7603				5.1087			
Frc consts --	0.2588				0.5270				0.3870			
IR Inten --	47.5487				1.5542				6.3156			
Raman Activ --	2.6586				2.0303				1.1682			
Depolar (P) --	0.7172				0.7326				0.2290			
Depolar (U) --	0.8353				0.8456				0.3726			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z		
1	8	0.04	0.07	-0.01	-0.11	-0.03	0.00	0.04	0.00	0.03		
2	1	-0.17	0.37	0.06	-0.23	0.02	0.10	0.04	0.34	-0.14		
3	1	-0.20	-0.19	-0.13	-0.21	-0.13	-0.05	-0.03	-0.09	-0.20		
4	6	-0.05	0.13	-0.01	0.12	0.06	0.04	-0.04	0.05	0.18		
5	6	-0.14	0.04	0.02	0.00	-0.08	0.01	-0.03	0.02	-0.01		
6	6	0.05	0.12	-0.03	0.11	0.08	0.03	-0.01	0.05	0.12		
7	6	0.01	0.02	0.00	0.18	0.09	0.01	-0.07	0.03	0.06		
8	6	-0.09	-0.12	0.01	-0.07	0.07	0.04	0.01	0.00	0.23		
9	6	-0.11	0.05	0.02	-0.03	-0.21	-0.02	-0.04	0.01	-0.15		
10	6	0.11	-0.02	0.01	0.07	0.13	-0.04	0.01	0.01	-0.20		
11	1	0.10	0.20	-0.06	0.07	0.03	0.03	0.01	0.07	0.15		
12	8	0.25	-0.03	0.00	0.28	0.07	-0.01	-0.02	0.01	-0.02		
13	8	-0.13	-0.14	0.00	0.14	0.04	-0.01	-0.13	-0.04	-0.05		
14	6	0.02	-0.13	0.03	0.00	0.07	-0.01	0.01	0.00	0.04		
15	6	-0.07	-0.09	-0.01	-0.13	0.14	0.02	0.06	0.01	0.11		
16	8	0.06	0.03	0.01	-0.05	-0.28	-0.05	0.01	0.14	-0.08		
17	8	0.02	0.06	0.00	-0.04	-0.33	0.02	-0.03	-0.21	-0.06		
18	1	0.24	-0.04	0.03	0.08	0.13	-0.11	0.04	0.00	-0.52		
19	1	-0.08	-0.27	0.04	0.16	0.02	-0.02	-0.10	-0.12	-0.01		
20	1	0.05	-0.22	0.05	0.04	-0.03	-0.04	0.01	-0.01	-0.01		
21	8	0.14	-0.10	-0.01	-0.25	0.15	0.00	0.03	0.04	-0.02		
22	8	-0.18	0.11	-0.02	-0.13	0.12	0.00	0.15	-0.06	-0.02		
23	1	-0.06	0.24	-0.03	-0.12	0.13	-0.02	0.09	-0.10	-0.28		
24	1	0.31	0.02	-0.05	-0.04	-0.30	0.19	0.06	-0.18	0.16		

16		17		18		
A		A		A		
Frequencies --	364.7360		386.1403		415.4099	
Red. masses --	1.3734		4.8129		6.8224	
Frc consts --	0.1076		0.4228		0.6937	
IR Inten --	68.3696		33.2210		3.6415	
Raman Activ --	0.5819		2.8792		3.2406	
Depolar (P) --	0.4206		0.1505		0.5889	

Depolar (U) --		0.5921			0.2617			0.7413		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.03	-0.05	0.05	-0.01	-0.08	0.05	0.06	0.05	-0.02
2	1	-0.05	0.70	-0.23	0.00	0.44	-0.20	0.06	-0.13	0.07
3	1	-0.09	-0.20	-0.56	0.02	-0.07	-0.48	0.03	0.02	0.22
4	6	0.00	0.00	-0.05	0.04	-0.09	0.09	-0.02	-0.03	-0.07
5	6	0.01	0.00	0.00	0.03	-0.02	-0.01	0.03	0.01	-0.02
6	6	0.00	0.00	-0.01	0.07	-0.10	0.03	0.24	-0.03	0.01
7	6	-0.02	0.02	-0.02	0.06	-0.08	0.04	-0.17	-0.05	-0.02
8	6	0.01	0.01	-0.04	-0.02	-0.03	0.07	0.04	0.05	-0.02
9	6	0.01	-0.02	0.03	0.05	0.06	-0.06	0.07	-0.02	0.02
10	6	-0.01	0.01	0.04	0.07	-0.08	-0.08	0.28	-0.03	0.04
11	1	-0.01	0.00	0.01	0.09	-0.08	0.01	0.33	0.09	0.05
12	8	-0.02	0.03	0.03	-0.11	-0.05	0.01	-0.19	-0.06	0.01
13	8	-0.04	0.01	-0.03	0.20	0.04	-0.05	-0.25	-0.14	0.03
14	6	0.00	0.02	-0.03	0.06	-0.06	0.06	0.26	0.00	-0.05
15	6	0.02	0.01	-0.01	-0.11	-0.02	0.02	-0.03	0.11	0.01
16	8	-0.01	-0.06	0.01	0.01	0.18	0.01	-0.02	-0.06	0.00
17	8	0.01	0.01	0.02	0.01	0.06	-0.05	0.01	0.00	0.02
18	1	-0.02	0.02	0.11	0.04	-0.08	-0.21	0.24	-0.02	0.10
19	1	-0.01	-0.04	0.20	0.16	0.16	0.10	-0.22	-0.23	-0.02
20	1	0.00	0.02	-0.03	0.07	-0.09	0.08	0.31	-0.12	-0.07
21	8	0.00	0.01	0.01	-0.09	-0.01	-0.02	-0.16	0.13	0.00
22	8	0.04	-0.02	0.01	-0.21	0.13	-0.01	-0.01	0.10	0.01
23	1	0.01	-0.05	0.04	-0.08	0.28	-0.05	-0.02	0.10	0.02
24	1	-0.01	0.01	0.00	-0.11	0.07	-0.06	-0.21	0.02	0.04

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies --		451.8998			510.2872			534.6194		
Red. masses --		3.9234			1.9306			7.1356		
Frc consts --		0.4721			0.2962			1.2016		
IR Inten --		4.9023			39.4496			38.7950		
Raman Activ --		0.7993			1.2566			4.8504		
Depolar (P) --		0.4561			0.7233			0.2002		
Depolar (U) --		0.6265			0.8395			0.3337		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01
2	1	0.04	0.06	-0.05	-0.01	0.01	0.01	0.03	-0.05	-0.01
3	1	0.02	0.01	-0.04	-0.05	-0.05	0.06	0.13	0.13	-0.12
4	6	0.00	0.02	0.28	0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.12	-0.08
5	6	0.03	0.02	0.02	0.07	-0.01	0.00	0.02	0.15	0.05
6	6	0.01	0.02	-0.14	-0.02	-0.04	0.03	0.01	0.21	0.00
7	6	-0.02	0.00	0.14	-0.01	0.06	-0.02	0.01	-0.16	-0.03
8	6	0.02	0.04	-0.22	0.03	0.02	0.04	0.03	0.13	0.10
9	6	0.03	-0.01	-0.01	0.14	-0.02	-0.01	0.00	0.04	-0.01
10	6	0.01	0.05	-0.03	-0.04	0.00	-0.02	0.04	0.25	0.03
11	1	0.01	0.01	-0.41	-0.05	-0.07	0.05	0.01	0.22	0.02
12	8	-0.04	-0.01	-0.06	0.05	0.06	0.00	-0.22	-0.12	0.03
13	8	-0.04	-0.03	-0.05	-0.09	0.01	0.00	0.13	-0.08	0.02
14	6	0.02	0.06	0.17	-0.01	0.04	0.01	0.05	0.20	-0.05
15	6	0.01	0.00	-0.16	-0.02	-0.07	0.01	-0.05	-0.14	0.03
16	8	-0.01	-0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.11	-0.10
17	8	-0.01	-0.04	0.01	0.06	-0.01	0.00	-0.01	-0.11	0.07
18	1	-0.01	0.05	-0.09	-0.08	0.01	-0.06	0.04	0.25	0.04
19	1	-0.03	-0.06	-0.15	-0.05	-0.07	0.01	0.07	0.06	0.06
20	1	0.02	0.07	0.45	-0.03	0.09	-0.02	0.06	0.20	-0.19
21	8	0.03	-0.05	0.04	0.03	-0.07	-0.01	0.17	-0.16	-0.02
22	8	-0.03	-0.01	0.00	-0.08	0.01	-0.01	-0.14	-0.05	-0.01
23	1	-0.06	-0.08	0.53	0.00	0.10	-0.07	-0.02	0.11	-0.37
24	1	-0.10	-0.02	0.07	-0.92	0.11	0.10	0.06	-0.08	0.33

	22	23	24	
	A	A	A	
Frequencies --	582.1818	584.2399	595.6869	
Red. masses --	1.9802	1.7888	1.4133	
Frc consts --	0.3954	0.3598	0.2955	
IR Inten --	43.2998	21.5761	218.2129	
Raman Activ --	1.3828	1.8297	4.2806	
Depolar (P) --	0.7446	0.4352	0.4183	
Depolar (U) --	0.8536	0.6064	0.5899	
Atom AN	X Y Z	X Y Z	X Y Z	
1 8	-0.03 0.00 0.02	0.04 -0.01 -0.01	-0.04 0.01 0.01	
2 1	0.03 -0.08 -0.01	-0.04 0.13 -0.01	0.03 -0.12 0.01	
3 1	0.26 0.28 -0.28	-0.35 -0.38 0.36	0.33 0.37 -0.34	
4 6	-0.03 0.04 0.07	0.03 -0.04 0.06	0.01 -0.03 0.02	
5 6	-0.06 0.01 0.07	0.05 0.00 0.09	0.04 -0.01 -0.06	
6 6	-0.01 0.05 -0.11	0.00 -0.07 -0.09	0.01 -0.04 0.01	
7 6	0.00 -0.02 0.04	0.00 0.03 0.01	-0.01 0.02 0.02	
8 6	-0.04 -0.04 -0.03	0.04 0.02 0.00	0.03 0.02 -0.06	
9 6	-0.01 0.01 -0.03	0.01 0.02 -0.04	0.02 -0.01 0.02	
10 6	0.02 -0.02 0.12	-0.02 -0.01 0.10	-0.01 0.00 -0.03	
11 1	0.02 0.08 -0.30	-0.02 -0.10 -0.26	-0.01 -0.06 0.06	
12 8	0.01 -0.04 0.00	0.00 0.04 -0.02	0.05 0.01 0.00	
13 8	0.03 -0.01 -0.01	-0.03 0.02 0.00	-0.05 -0.01 -0.01	
14 6	-0.02 -0.07 -0.08	0.02 0.04 -0.07	0.02 0.04 0.03	
15 6	0.01 0.03 0.03	0.00 -0.02 0.01	0.00 -0.02 0.02	
16 8	0.02 0.03 -0.02	-0.01 0.04 -0.02	-0.02 -0.02 0.02	
17 8	0.05 -0.04 -0.03	-0.05 -0.03 -0.02	-0.03 0.02 0.01	
18 1	0.09 -0.03 0.22	-0.09 0.00 0.15	-0.06 0.01 -0.02	
19 1	-0.01 0.10 -0.01	0.03 -0.12 -0.07	-0.07 0.04 0.02	
20 1	-0.01 -0.11 -0.19	0.00 0.08 -0.22	0.01 0.07 0.14	
21 8	-0.02 0.04 0.01	-0.01 -0.03 0.00	0.00 -0.02 0.01	
22 8	0.05 -0.01 0.03	-0.03 0.01 0.03	-0.02 0.00 0.04	
23 1	0.04 0.01 -0.41	0.06 0.15 -0.41	0.08 0.16 -0.64	
24 1	-0.54 0.04 0.09	0.37 -0.07 0.02	0.31 -0.02 -0.07	

	25	26	27	
	A	A	A	
Frequencies --	596.4792	650.5803	676.2064	
Red. masses --	1.6517	4.5969	4.8299	
Frc consts --	0.3462	1.1464	1.3012	
IR Inten --	104.2863	46.3312	111.0115	
Raman Activ --	2.2073	1.5969	5.6544	
Depolar (P) --	0.7221	0.4556	0.0647	
Depolar (U) --	0.8387	0.6260	0.1216	
Atom AN	X Y Z	X Y Z	X Y Z	
1 8	0.04 -0.01 -0.01	0.00 0.00 0.00	0.00 -0.01 0.00	
2 1	-0.03 0.13 -0.01	0.00 -0.01 0.00	0.00 0.05 -0.02	
3 1	-0.32 -0.37 0.34	0.03 0.04 -0.03	-0.10 -0.11 0.07	
4 6	-0.01 0.03 0.01	0.05 -0.06 0.02	-0.14 -0.07 0.00	
5 6	-0.04 -0.01 -0.10	-0.04 -0.14 0.02	-0.07 0.09 0.01	
6 6	0.00 0.05 0.03	0.13 -0.05 -0.02	0.02 -0.15 0.02	
7 6	0.01 -0.02 0.03	0.01 0.01 0.00	-0.09 -0.03 -0.01	
8 6	-0.04 -0.02 -0.09	-0.13 0.06 0.04	-0.07 0.10 -0.03	
9 6	-0.02 -0.02 0.03	0.00 -0.17 0.00	0.02 0.12 -0.01	
10 6	0.01 0.02 -0.06	0.05 0.19 0.03	0.03 -0.14 -0.02	
11 1	0.01 0.06 0.12	0.06 -0.15 -0.09	0.12 -0.04 0.04	
12 8	-0.05 -0.01 -0.02	-0.01 0.01 0.00	0.14 -0.08 0.01	
13 8	0.05 0.00 -0.01	-0.02 -0.02 0.00	0.03 0.14 -0.01	
14 6	-0.03 -0.03 0.05	-0.03 0.09 -0.03	0.14 0.05 0.01	
15 6	-0.01 0.02 0.03	-0.12 0.08 0.01	-0.12 0.10 0.00	
16 8	0.01 -0.03 0.03	0.02 0.10 0.15	-0.02 -0.05 -0.12	

17	8	0.03	0.03	0.01	-0.02	0.02	-0.15	0.01	-0.01	0.10
18	1	0.06	0.01	-0.03	-0.05	0.20	0.01	-0.16	-0.12	-0.01
19	1	0.07	-0.05	-0.06	-0.01	-0.05	0.00	-0.04	0.31	0.02
20	1	-0.01	-0.07	0.24	0.03	-0.07	-0.11	0.15	0.04	0.06
21	8	0.01	0.03	0.01	0.17	0.06	0.03	0.15	0.09	0.03
22	8	0.02	-0.02	0.04	-0.05	-0.14	-0.04	-0.05	-0.12	-0.03
23	1	0.04	0.04	-0.64	-0.32	-0.43	-0.02	-0.33	-0.42	-0.15
24	1	-0.25	0.06	-0.05	-0.03	-0.04	-0.57	-0.01	0.04	0.42

28

29

30

A

A

A

Frequencies --	730.1326	747.6678	767.6829
Red. masses --	5.6082	4.5371	5.3482
Frc consts --	1.7615	1.4943	1.8570
IR Inten --	29.9748	27.7035	30.3879
Raman Activ --	0.8547	19.8487	0.9986
Depolar (P) --	0.1366	0.0252	0.2068
Depolar (U) --	0.2403	0.0491	0.3427

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
2	1	0.02	0.04	-0.03	0.00	-0.08	0.03	-0.01	0.04	0.00
3	1	0.00	-0.01	-0.03	0.13	0.15	-0.10	-0.08	-0.09	0.07
4	6	0.01	0.01	0.04	0.14	0.01	-0.01	-0.06	0.09	0.04
5	6	0.02	0.01	-0.29	0.06	-0.02	0.05	0.03	0.02	-0.03
6	6	-0.02	0.00	-0.13	0.00	-0.01	0.02	-0.08	0.17	0.01
7	6	0.01	0.04	0.33	0.16	0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08
8	6	0.00	0.00	0.11	-0.04	-0.06	-0.03	-0.02	-0.05	0.01
9	6	0.09	0.01	0.02	0.09	0.11	-0.04	0.47	-0.10	-0.03
10	6	-0.01	-0.01	0.07	-0.02	-0.05	-0.01	0.03	-0.03	0.04
11	1	-0.02	0.00	0.10	-0.07	-0.10	0.00	-0.01	0.26	-0.23
12	8	-0.01	0.01	-0.09	-0.11	0.17	0.00	0.03	-0.08	0.03
13	8	0.00	-0.02	-0.06	0.00	-0.19	0.03	0.00	0.08	0.01
14	6	0.00	-0.01	-0.14	-0.11	-0.12	0.02	-0.05	-0.11	0.02
15	6	-0.05	-0.04	0.30	-0.08	0.10	-0.02	0.00	0.04	-0.03
16	8	-0.03	-0.06	-0.01	-0.03	0.00	-0.12	-0.12	0.01	0.05
17	8	-0.02	0.05	0.07	-0.01	0.02	0.11	-0.13	0.02	-0.01
18	1	0.00	-0.01	0.49	0.10	-0.07	-0.05	0.27	-0.07	-0.27
19	1	0.02	-0.09	-0.32	0.11	-0.46	0.02	-0.05	0.20	0.08
20	1	-0.01	0.01	0.04	-0.10	-0.17	0.03	-0.05	-0.14	-0.21
21	8	0.03	0.03	-0.09	0.07	0.10	0.04	0.01	0.02	0.02
22	8	-0.02	0.00	-0.11	-0.06	-0.08	-0.01	-0.01	-0.01	0.01
23	1	-0.10	-0.13	0.42	-0.27	-0.31	-0.13	-0.04	-0.05	-0.04
24	1	0.14	0.03	0.04	0.16	0.04	0.41	0.42	-0.06	-0.17

31

32

33

A

A

A

Frequencies --	787.9756	806.5394	809.5489
Red. masses --	1.7313	6.4568	5.4793
Frc consts --	0.6334	2.4747	2.1157
IR Inten --	60.8168	7.4905	3.2008
Raman Activ --	0.2061	0.6072	1.3710
Depolar (P) --	0.7500	0.5311	0.4279
Depolar (U) --	0.8571	0.6938	0.5994

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
2	1	0.00	0.01	0.00	-0.02	-0.04	0.03	0.00	0.03	-0.02
3	1	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.04	-0.04	-0.04	0.02
4	6	0.00	0.00	-0.04	0.02	-0.04	0.24	0.04	-0.11	-0.06
5	6	0.00	0.00	0.18	-0.01	-0.04	-0.04	-0.03	-0.12	0.00
6	6	0.00	0.01	-0.02	0.07	-0.04	0.02	0.21	-0.09	0.00
7	6	-0.01	-0.01	0.02	-0.02	-0.04	-0.38	-0.08	-0.03	0.12
8	6	-0.01	-0.01	-0.06	-0.04	-0.03	-0.19	-0.11	-0.08	0.06

9	6	0.06	-0.01	-0.03	-0.01	0.05	-0.01	0.07	0.13	-0.04
10	6	0.01	0.01	-0.11	0.01	0.12	0.02	0.05	0.29	0.00
11	1	0.00	0.02	0.46	0.01	-0.14	-0.41	0.06	-0.29	0.07
12	8	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.10	0.05	-0.09	-0.02
13	8	0.00	0.01	-0.01	-0.02	0.03	0.06	-0.04	0.09	-0.03
14	6	-0.01	-0.01	-0.04	-0.06	0.01	-0.03	-0.22	-0.04	0.01
15	6	0.00	-0.01	0.05	-0.02	-0.10	0.39	0.06	-0.02	-0.13
16	8	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.02	0.02	-0.13
17	8	-0.02	-0.03	-0.03	0.01	0.02	0.05	0.01	0.06	0.13
18	1	0.02	0.02	0.65	-0.02	0.13	-0.09	0.05	0.29	-0.06
19	1	-0.01	0.03	-0.01	-0.03	0.09	0.37	-0.09	0.18	-0.08
20	1	-0.01	-0.02	0.54	-0.03	-0.07	0.26	-0.12	-0.31	-0.12
21	8	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.11	-0.04	-0.06	0.02
22	8	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.04	-0.09	0.07	0.03	0.05
23	1	0.01	0.01	0.03	0.05	0.02	0.26	0.17	0.15	-0.02
24	1	0.04	-0.03	0.01	0.00	0.04	0.14	0.10	0.09	0.44

34				35				36				
A				A				A				
Frequencies --	864.6483				910.8725				929.2615			
Red. masses --	3.5403				5.9223				1.1690			
Frc consts --	1.5595				2.8951				0.5948			
IR Inten --	1.2989				18.6974				139.4543			
Raman Activ --	0.6053				3.8827				0.4488			
Depolar (P) --	0.6666				0.7434				0.6523			
Depolar (U) --	0.8000				0.8528				0.7895			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z		
1	8	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.03		
2	1	0.01	0.03	-0.02	0.00	-0.03	0.02	0.02	0.13	-0.07		
3	1	0.00	0.00	-0.02	-0.04	-0.04	0.08	0.02	0.01	-0.13		
4	6	-0.01	-0.01	-0.21	0.22	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00		
5	6	0.00	0.01	0.18	0.28	-0.04	0.01	0.02	0.00	0.00		
6	6	0.00	0.00	0.09	-0.05	0.12	0.00	0.00	0.01	0.01		
7	6	0.00	0.02	0.18	-0.09	-0.08	0.04	-0.01	-0.01	-0.06		
8	6	-0.01	0.00	-0.22	0.23	-0.09	-0.02	0.02	-0.01	0.00		
9	6	0.02	0.00	-0.01	-0.19	0.03	0.02	-0.01	0.00	0.00		
10	6	0.00	0.01	0.05	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01		
11	1	0.00	-0.01	-0.24	-0.16	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01		
12	8	0.00	0.00	-0.04	0.01	-0.15	0.00	0.00	-0.02	0.03		
13	8	0.01	0.00	-0.02	-0.13	0.15	-0.04	-0.01	0.03	0.06		
14	6	0.00	0.01	0.11	-0.10	-0.10	0.01	-0.01	-0.01	0.00		
15	6	-0.02	-0.04	0.19	-0.02	0.08	0.04	0.00	0.01	0.00		
16	8	0.00	0.02	0.00	0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00		
17	8	-0.01	-0.02	-0.03	0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00		
18	1	-0.01	-0.01	-0.75	0.34	-0.03	-0.02	0.03	0.00	0.02		
19	1	0.01	-0.03	-0.22	-0.20	0.32	0.37	0.00	-0.08	-0.97		
20	1	0.00	0.00	-0.30	-0.16	0.05	-0.03	-0.01	0.00	0.02		
21	8	0.00	0.01	-0.05	0.02	0.11	0.02	0.00	0.01	0.00		
22	8	0.02	0.01	-0.04	-0.16	-0.07	-0.04	-0.01	-0.01	0.00		
23	1	0.01	-0.01	0.06	-0.29	-0.22	-0.07	-0.02	-0.01	-0.01		
24	1	0.01	-0.02	0.02	-0.03	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00		

37				38				39				
A				A				A				
Frequencies --	984.4402				1026.6729				1095.5690			
Red. masses --	1.4039				1.3585				4.2668			
Frc consts --	0.8016				0.8437				3.0174			
IR Inten --	0.2146				1.0517				47.4473			
Raman Activ --	0.0296				0.0499				23.9898			
Depolar (P) --	0.3700				0.5038				0.1006			
Depolar (U) --	0.5402				0.6700				0.1828			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z		



1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.02	-0.09	0.05	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.24	-0.02
6	6	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.12	0.25	-0.12	0.01
7	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.01	0.00
8	6	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.09	0.03	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.05	0.08
10	6	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.12	-0.01	-0.07	0.00
11	1	0.00	0.01	0.57	0.00	0.02	0.67	0.55	0.25	-0.01
12	8	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.04	0.00
14	6	0.00	0.00	0.14	0.00	0.00	-0.06	-0.27	-0.04	0.00
15	6	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.06	0.01	0.01
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.07
17	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.06	-0.12
18	1	0.00	0.00	0.20	0.00	-0.01	-0.63	-0.03	-0.09	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.01
20	1	-0.01	0.01	-0.77	0.00	-0.01	0.34	-0.45	0.36	0.00
21	8	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00
22	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.04	-0.01
23	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.06	0.01
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.05	-0.02

40

41

42

A

A

A

Frequencies --	1151.5350	1164.9419	1199.2483
Red. masses --	2.5728	4.9639	1.4345
Frc consts --	2.0101	3.9690	1.2156
IR Inten --	54.2140	86.4685	90.1978
Raman Activ --	2.1168	4.9828	5.1184
Depolar (P) --	0.0568	0.2015	0.5074
Depolar (U) --	0.1076	0.3354	0.6732

Atom AN

X

Y

Z

X

Y

Z

X

Y

Z

1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
3	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.10	-0.04	0.01	-0.19	-0.07	0.00	-0.09	-0.04	0.00
5	6	0.01	0.13	-0.02	-0.07	-0.16	0.02	0.03	-0.01	0.00
6	6	-0.08	-0.06	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.05	-0.03	0.00
7	6	-0.03	0.02	0.00	-0.07	0.05	0.00	-0.05	0.02	0.00
8	6	0.07	-0.06	0.00	0.16	-0.12	-0.01	0.02	0.00	0.00
9	6	0.02	0.08	0.07	-0.01	-0.09	-0.09	-0.02	-0.01	-0.01
10	6	0.02	0.16	0.00	-0.02	0.09	0.00	0.09	0.02	0.00
11	1	-0.41	-0.48	0.01	0.29	0.44	-0.01	-0.19	-0.20	0.01
12	8	0.01	0.04	0.00	0.03	0.06	0.00	0.02	0.03	0.00
13	8	0.04	-0.03	0.00	0.08	-0.07	0.01	0.04	-0.04	0.00
14	6	0.07	-0.09	0.01	0.05	0.02	0.00	-0.04	0.04	0.00
15	6	0.06	0.01	0.00	0.23	0.05	0.03	-0.03	0.00	0.00
16	8	0.00	-0.04	0.05	0.00	0.05	-0.06	0.00	0.01	-0.01
17	8	-0.02	-0.04	-0.11	0.02	0.05	0.14	0.00	0.00	0.02
18	1	0.01	0.17	0.00	-0.23	0.13	0.00	0.82	-0.08	0.00
19	1	0.02	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.01
20	1	0.27	-0.57	-0.01	-0.04	0.28	0.00	-0.18	0.38	0.01
21	8	0.00	0.05	0.01	-0.02	0.12	0.02	0.00	-0.02	0.00
22	8	-0.05	-0.03	-0.01	-0.18	-0.14	-0.05	0.02	0.02	0.01
23	1	0.03	0.06	0.02	0.26	0.35	0.09	-0.11	-0.11	-0.04
24	1	0.01	-0.01	0.16	-0.03	0.01	-0.22	0.00	-0.01	-0.06

43

44

45

A

A

A

Frequencies --	1223.1585	1231.2894	1252.5771
Red. masses --	1.9104	1.7795	1.7619
Frc consts --	1.6840	1.5895	1.6287
IR Inten --	327.2955	177.4466	1.7580
Raman Activ --	14.4886	7.2092	0.4402
Depolar (P) --	0.2701	0.0786	0.7160
Depolar (U) --	0.4253	0.1457	0.8345

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.06	0.00	0.00	0.02	0.05	0.00	0.05	0.12	0.00
5	6	0.05	0.04	0.01	0.00	0.14	0.02	-0.12	0.00	0.00
6	6	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.05	0.00	0.05	-0.02	0.00
7	6	-0.05	0.02	0.00	0.03	-0.01	0.00	0.04	-0.02	0.00
8	6	0.11	-0.11	0.00	-0.01	0.05	0.00	0.01	-0.14	0.00
9	6	0.00	-0.03	-0.02	-0.01	-0.07	-0.05	0.04	0.00	0.00
10	6	-0.03	0.07	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
11	1	0.14	0.17	0.00	-0.19	-0.34	0.01	-0.32	-0.53	0.01
12	8	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.00
13	8	0.03	-0.03	0.00	-0.02	0.02	0.00	-0.02	0.02	0.00
14	6	0.01	-0.03	0.00	-0.03	-0.04	0.00	0.06	0.02	0.00
15	6	-0.09	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.05	0.01	0.00
16	8	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.02	-0.06	-0.01	0.00	0.01
17	8	0.00	0.00	0.05	0.01	-0.02	0.13	-0.01	0.00	-0.01
18	1	-0.41	0.13	-0.01	0.05	-0.02	0.00	-0.22	0.03	-0.01
19	1	0.00	0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.02	0.00
20	1	0.02	-0.04	0.02	0.04	-0.22	0.00	-0.19	0.66	0.00
21	8	-0.01	-0.04	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00
22	8	0.05	0.11	0.03	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.00
23	1	-0.54	-0.55	-0.16	0.12	0.13	0.04	-0.12	-0.12	-0.04
24	1	-0.03	-0.04	-0.26	-0.10	-0.13	-0.82	0.00	0.02	0.08

	46	47	48
	A	A	A

Frequencies --	1313.8896	1341.3875	1385.3437
Red. masses --	3.4570	5.5469	2.4375
Frc consts --	3.5161	5.8805	2.7562
IR Inten --	290.4599	127.7007	93.8642
Raman Activ --	21.6411	25.5062	5.9275
Depolar (P) --	0.1412	0.4668	0.1185
Depolar (U) --	0.2474	0.6365	0.2119

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	0.02	-0.07	0.01	-0.02	0.06	-0.01	0.00	0.01	0.00
3	1	0.03	0.05	-0.06	-0.02	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.07	-0.21	0.00	0.19	-0.15	0.00	-0.03	0.09	0.00
5	6	-0.15	0.06	0.00	-0.24	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00
6	6	0.02	0.05	0.00	0.15	0.18	0.00	0.02	-0.04	0.00
7	6	0.25	-0.06	0.01	-0.21	0.04	-0.01	0.02	0.00	0.00
8	6	0.10	0.05	0.00	0.15	0.24	0.00	0.00	0.10	0.00
9	6	0.02	0.01	0.01	0.03	-0.02	-0.01	-0.04	-0.17	-0.12
10	6	-0.06	0.07	0.00	-0.21	-0.02	0.00	0.01	-0.05	0.00
11	1	0.13	0.20	-0.01	-0.26	-0.37	0.01	-0.07	-0.17	0.00
12	8	-0.02	-0.04	0.00	0.04	0.06	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
13	8	-0.11	0.14	-0.01	0.07	-0.11	0.01	0.00	0.01	0.00
14	6	0.03	-0.07	0.00	0.06	-0.19	0.00	-0.06	0.03	0.00
15	6	0.04	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.19	0.01	0.03
16	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.04
17	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.07	0.02
18	1	0.37	0.02	0.00	0.17	-0.08	0.00	0.09	-0.07	0.00

19	1	0.24	-0.61	0.09	-0.23	0.52	-0.07	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.06	0.17	0.00	-0.04	0.07	0.01	0.12	-0.43	0.00
21	8	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	-0.04	-0.01	-0.03	-0.05	-0.01
22	8	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.06	0.04	0.00
23	1	-0.24	-0.22	-0.07	-0.09	-0.07	-0.02	-0.41	-0.37	-0.11
24	1	-0.02	-0.01	-0.05	-0.01	0.02	0.07	0.07	0.13	0.54

49

50

51

A

A

A

Frequencies --	1393.7735	1474.7242	1506.0820
----------------	-----------	-----------	-----------

Red. masses --	2.9930	1.5411	2.5369
----------------	--------	--------	--------

Frc consts --	3.4256	1.9747	3.3904
---------------	--------	--------	--------

IR Inten --	93.4967	32.0490	10.5286
-------------	---------	---------	---------

Raman Activ --	10.2949	2.8087	0.4914
----------------	---------	--------	--------

Depolar (P) --	0.3860	0.7469	0.6945
----------------	--------	--------	--------

Depolar (U) --	0.5570	0.8551	0.8197
----------------	--------	--------	--------

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	0.00	0.02	0.00	-0.04	0.12	-0.01	-0.01	0.03	0.00
3	1	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	-0.02	0.10	0.00	0.00	0.02
4	6	0.07	-0.01	0.00	0.01	-0.03	0.00	-0.10	-0.12	0.00
5	6	-0.02	-0.08	0.00	-0.02	0.05	0.00	0.11	0.00	0.00
6	6	-0.03	0.01	0.00	-0.03	-0.05	0.00	-0.01	0.13	0.00
7	6	-0.03	0.00	0.00	0.13	-0.08	0.01	0.05	-0.03	0.00
8	6	-0.12	0.03	0.00	-0.01	-0.04	0.00	-0.09	0.12	0.00
9	6	0.04	0.20	0.13	0.00	-0.02	-0.02	-0.03	-0.01	0.00
10	6	0.01	-0.04	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.18	-0.02	0.00
11	1	0.06	0.12	0.00	0.15	0.19	0.00	-0.31	-0.22	0.00
12	8	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.06	-0.01	0.01	0.04	0.00
13	8	0.00	-0.02	0.00	-0.06	-0.04	0.00	-0.02	-0.01	0.00
14	6	0.01	0.06	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.04	-0.13	0.00
15	6	0.25	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01	0.01
16	8	-0.01	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
17	8	-0.01	-0.08	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.09	-0.05	0.00	0.14	0.02	0.00	-0.69	0.10	0.00
19	1	-0.07	0.14	-0.02	-0.42	0.81	-0.11	-0.08	0.16	-0.02
20	1	0.08	-0.10	0.00	0.01	0.03	0.00	-0.26	0.36	0.00
21	8	-0.04	-0.04	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.01
22	8	-0.07	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
23	1	-0.45	-0.41	-0.12	0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.03	-0.01
24	1	-0.08	-0.14	-0.59	0.00	0.01	0.05	0.01	0.00	0.01

52

53

54

A

A

A

Frequencies --	1516.3480	1622.7208	1657.9637
----------------	-----------	-----------	-----------

Red. masses --	4.5152	1.1008	7.2488
----------------	--------	--------	--------

Frc consts --	6.1168	1.7079	11.7399
---------------	--------	--------	---------

IR Inten --	13.3307	136.1542	70.1285
-------------	---------	----------	---------

Raman Activ --	14.4089	12.1743	42.4548
----------------	---------	---------	---------

Depolar (P) --	0.3591	0.6449	0.7448
----------------	--------	--------	--------

Depolar (U) --	0.5284	0.7841	0.8538
----------------	--------	--------	--------

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.04	0.00	-0.01	0.00
2	1	0.01	-0.04	0.00	-0.37	0.54	0.09	-0.03	0.05	0.01
3	1	0.01	0.01	-0.04	0.37	0.40	0.51	0.04	0.04	0.04
4	6	0.23	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.24	-0.08	0.00
5	6	0.03	0.26	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.34	0.04	0.00
6	6	-0.12	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.26	-0.08	0.00
7	6	-0.16	0.05	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.06	0.00	0.00
8	6	-0.24	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.26	0.03	0.00
9	6	-0.02	-0.11	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00
10	6	0.00	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.41	-0.05	0.00

11	1	0.26	0.44	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.30	-0.01
12	8	0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.01	0.01	0.00
13	8	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.11	-0.10	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.22	0.13	0.00
15	6	0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.02	0.00
16	8	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
17	8	0.00	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.05	0.12	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.50	0.08	0.00
19	1	0.15	-0.29	0.04	0.02	-0.07	0.00	0.02	-0.06	0.01
20	1	-0.12	0.50	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.09	-0.26	0.00
21	8	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
22	8	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.05	-0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.01
24	1	0.02	0.04	0.15	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00

55

56

57

A

A

A

Frequencies --	1665.2671	1814.3088	1851.9212
Red. masses --	6.5834	7.2789	10.5397
Frc consts --	10.7564	14.1168	21.2972
IR Inten --	7.0804	208.4408	360.4421
Raman Activ --	16.8914	48.8726	45.8119
Depolar (P) --	0.7183	0.2853	0.2876
Depolar (U) --	0.8360	0.4440	0.4467

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
2	1	-0.03	0.04	0.01	0.09	-0.13	-0.03	0.01	-0.01	0.00
3	1	0.03	0.04	0.03	-0.16	-0.22	-0.11	-0.02	-0.02	-0.01
4	6	0.01	-0.30	0.01	-0.03	-0.09	0.00	-0.01	-0.03	0.00
5	6	0.02	0.19	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.01	0.06	-0.01
6	6	0.16	0.30	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.01	0.01	0.00
7	6	-0.03	-0.04	0.00	0.17	0.58	-0.05	0.03	0.09	-0.01
8	6	-0.07	-0.29	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.10	0.00
9	6	-0.01	-0.03	-0.04	0.01	-0.01	0.03	0.00	-0.14	0.24
10	6	-0.02	-0.18	0.00	0.03	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00
11	1	-0.32	-0.32	0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00
12	8	0.02	0.05	0.00	-0.09	-0.34	0.03	-0.01	-0.05	0.00
13	8	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.07	0.01	0.00	-0.01	0.00
14	6	-0.09	0.35	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.01	0.02	0.00
15	6	0.01	-0.03	-0.01	0.00	-0.10	-0.02	-0.03	0.67	0.12
16	8	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.09	-0.16
17	8	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03
18	1	-0.03	-0.22	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00
19	1	0.02	-0.04	0.00	-0.30	0.52	-0.06	-0.05	0.07	-0.01
20	1	0.23	-0.42	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.04	-0.02	0.00
21	8	-0.01	0.04	0.01	0.00	0.06	0.01	0.00	-0.42	-0.08
22	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.06	-0.01
23	1	0.00	-0.01	0.00	-0.04	-0.04	-0.01	0.30	0.29	0.09
24	1	0.00	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.14

58

59

60

A

A

A

Frequencies --	1866.7975	3215.5293	3238.4079
Red. masses --	10.7597	1.0893	1.0928
Frc consts --	22.0925	6.6360	6.7522
IR Inten --	449.1747	4.7027	0.8067
Raman Activ --	41.3596	76.7417	66.9736
Depolar (P) --	0.0595	0.5263	0.4722
Depolar (U) --	0.1122	0.6897	0.6415

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

3	1	0.01	0.02	0.02	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	0.00	0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.02	0.00	-0.06	0.05	0.00
7	6	-0.03	-0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	-0.38	0.58	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.08	0.00	0.01	0.02	0.00
11	1	0.00	-0.01	0.00	0.25	-0.19	0.00	0.70	-0.53	0.01
12	8	0.01	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	8	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.00
15	6	0.02	-0.27	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	8	-0.01	0.23	-0.38	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	8	-0.01	0.02	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.01	0.00	0.00	0.12	0.90	-0.02	-0.03	-0.17	0.00
19	1	0.05	-0.07	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.25	-0.10	0.00	0.40	0.16	0.00
21	8	0.00	0.17	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	8	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.12	-0.12	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.05	0.07	0.39	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

61

62

63

A

A

A

Frequencies --	3244.2487	3455.4462	3764.8722
----------------	-----------	-----------	-----------

Red. masses --	1.0961	1.0674	1.0550
----------------	--------	--------	--------

Frc consts --	6.7972	7.5091	8.8106
---------------	--------	--------	--------

IR Inten --	1.9560	1046.3991	266.7669
-------------	--------	-----------	----------

Raman Activ --	160.5245	202.9629	103.8981
----------------	----------	----------	----------

Depolar (P) --	0.1201	0.2479	0.1674
----------------	--------	--------	--------

Depolar (U) --	0.2145	0.3973	0.2868
----------------	--------	--------	--------

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04	0.01
2	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.02	-0.19	-0.06	-0.17
3	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.07	0.00	0.70	-0.65	0.05
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	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	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	1	-0.28	0.21	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	8	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00
14	6	-0.07	-0.03	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	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	0.05	0.36	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	0.91	0.39	-0.04	0.09	0.04	0.00
20	1	0.80	0.32	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	8	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	-0.01	0.00

64

65

66

A

A

A

Frequencies --	3843.0819	3850.7727	3970.9454
----------------	-----------	-----------	-----------

Red. masses --	1.0642	1.0648	1.0735
----------------	--------	--------	--------

Frc consts --	9.2601	9.3025	9.9735
IR Inten --	100.2021	124.7358	125.3352
Raman Activ --	120.9480	133.8817	68.3900
Depolar (P) --	0.2779	0.2384	0.3001
Depolar (U) --	0.4350	0.3850	0.4617
Atom AN	X	Y	Z
1 8	0.00	0.00	0.00
2 1	0.00	0.00	0.00
3 1	0.00	0.00	0.00
4 6	0.00	0.00	0.00
5 6	0.00	0.00	0.00
6 6	0.00	0.00	0.00
7 6	0.00	0.00	0.00
8 6	0.00	0.00	0.00
9 6	0.00	0.00	0.00
10 6	0.00	0.00	0.00
11 1	0.00	0.00	0.00
12 8	0.00	0.00	0.00
13 8	0.00	0.00	0.00
14 6	0.00	0.00	0.00
15 6	0.00	0.00	0.00
16 8	0.00	0.00	0.00
17 8	0.01	0.06	-0.01
18 1	0.00	0.00	0.00
19 1	0.00	0.00	0.00
20 1	0.00	0.00	0.00
21 8	0.00	0.00	0.00
22 8	0.00	0.00	0.00
23 1	-0.03	0.03	0.00
24 1	-0.10	-0.98	0.13

## PYRHEM H2O

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 --	18.3350	25.5591	37.1620
Red. masses --	6.6994	8.1349	7.2656
Frc consts --	0.0013	0.0031	0.0059
IR Inten --	1.8844	2.0622	0.8942
Raman Activ --	1.4893	1.2673	2.0050
Depolar (P) --	0.7499	0.7344	0.7443
Depolar (U) --	0.8571	0.8469	0.8534
Atom AN	X	Y	Z
1 6	-0.05	0.01	0.00
2 6	0.00	0.05	0.00
3 6	-0.05	-0.06	0.01
4 6	-0.12	0.04	-0.02
5 6	0.07	0.02	0.01
6 6	0.00	0.12	-0.02
7 6	0.01	-0.09	0.02
8 1	-0.10	-0.09	0.00
9 8	-0.12	0.09	0.00
10 8	-0.17	0.02	-0.04
11 6	0.07	-0.06	0.02
12 6	0.13	0.05	0.02
13 8	0.00	0.13	-0.02

14	8	0.00	0.13	-0.02	0.03	-0.02	0.01	-0.03	-0.13	0.03
15	1	0.01	-0.15	0.03	0.02	0.03	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04
16	1	-0.21	0.04	-0.05	0.10	-0.01	0.19	-0.01	-0.05	0.21
17	1	0.11	-0.08	0.04	0.02	0.04	-0.10	0.00	-0.02	-0.05
18	8	0.14	0.11	0.01	0.00	0.02	0.03	-0.05	-0.01	0.24
19	8	0.18	0.01	0.03	0.06	0.07	-0.21	0.08	0.03	-0.18
20	1	0.22	0.04	0.03	0.05	0.06	-0.21	0.07	0.03	-0.12
21	8	-0.06	0.11	-0.01	-0.39	-0.37	0.00	0.31	0.07	-0.06
22	1	-0.03	0.12	-0.03	-0.23	-0.28	0.03	0.23	0.02	-0.09
23	7	0.00	-0.07	0.00	0.01	0.05	0.03	-0.01	0.12	-0.05
24	1	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.09	0.02	0.00	0.21	-0.05
25	7	0.00	-0.02	-0.01	0.03	-0.02	0.04	-0.03	-0.11	-0.01
26	1	0.00	0.11	-0.02	0.03	-0.02	0.02	-0.02	-0.14	0.02
27	6	0.00	-0.17	0.01	0.04	-0.08	0.07	-0.05	-0.21	-0.02
28	1	-0.01	-0.16	0.01	0.05	-0.13	0.08	-0.07	-0.40	0.00
29	6	0.00	-0.32	0.03	0.02	-0.05	0.08	-0.03	-0.04	-0.07
30	1	0.00	-0.46	0.04	0.03	-0.08	0.09	-0.03	-0.06	-0.09
31	6	0.01	-0.25	0.02	0.01	0.03	0.05	0.00	0.17	-0.09
32	1	0.01	-0.31	0.03	0.00	0.07	0.05	0.02	0.35	-0.12
33	1	-0.09	0.11	0.00	-0.34	-0.26	-0.12	0.14	-0.03	0.11

4                      5                      6  
A                      A                      A

Frequencies --    47.0392                      50.9376                      59.1803  
Red. masses --    6.4150                      7.5464                      4.9898  
Frc consts --    0.0084                      0.0115                      0.0103  
IR Inten --    5.5976                      3.4451                      0.5078  
Raman Activ --    3.2536                      0.1783                      2.4845  
Depolar (P) --    0.7475                      0.7021                      0.7494  
Depolar (U) --    0.8555                      0.8250                      0.8568

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	0.04	0.01	-0.01	-0.07	-0.01	0.01	0.01
2	6	-0.01	-0.01	-0.04	0.00	-0.01	-0.07	-0.01	0.01	0.03
3	6	0.00	-0.02	0.22	0.01	0.01	-0.12	-0.01	0.00	-0.01
4	6	0.00	-0.01	-0.06	0.01	-0.01	0.04	-0.01	0.01	-0.01
5	6	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.05	-0.01	0.01	0.02
6	6	-0.01	0.01	-0.09	0.00	0.01	-0.06	-0.01	0.01	0.04
7	6	-0.01	-0.02	0.32	0.00	0.01	-0.16	-0.01	0.00	-0.02
8	1	0.00	-0.02	0.30	0.01	0.01	-0.12	-0.02	0.00	-0.02
9	8	-0.06	-0.02	-0.20	-0.08	0.08	-0.11	-0.05	0.02	-0.08
10	8	0.07	0.00	0.03	0.12	-0.13	0.36	0.02	0.00	0.05
11	6	-0.02	-0.02	0.20	-0.01	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.01
12	6	-0.01	0.00	-0.09	-0.01	-0.02	0.06	0.00	0.01	0.04
13	8	-0.02	0.02	-0.08	-0.02	0.03	-0.06	-0.01	0.03	0.03
14	8	0.01	0.02	-0.08	0.01	0.03	-0.06	-0.01	-0.01	0.04
15	1	-0.01	-0.03	0.47	0.00	0.02	-0.22	-0.01	0.00	-0.03
16	1	0.07	0.00	-0.05	0.10	-0.12	0.43	0.01	0.00	0.03
17	1	-0.02	-0.02	0.26	-0.01	0.01	-0.08	0.00	0.00	-0.02
18	8	0.02	-0.01	-0.20	0.03	0.04	-0.09	-0.03	0.00	0.16
19	8	-0.05	0.00	-0.05	-0.07	-0.09	0.38	0.05	0.03	-0.09
20	1	-0.04	0.00	-0.13	-0.06	-0.08	0.43	0.04	0.03	-0.07
21	8	0.14	0.01	-0.19	0.02	0.05	-0.09	0.14	-0.13	-0.08
22	1	0.13	-0.01	-0.23	0.04	0.04	-0.15	0.10	-0.10	0.04
23	7	-0.04	0.01	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.02
24	1	-0.07	0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.02	0.02	-0.25	0.05
25	7	0.01	0.03	0.04	0.01	0.06	-0.01	-0.03	0.16	-0.03
26	1	0.00	0.02	-0.05	0.01	0.05	-0.04	-0.01	0.07	0.02
27	6	0.03	0.02	0.09	0.02	0.04	0.01	-0.04	0.28	-0.08
28	1	0.08	0.03	0.09	0.04	0.07	0.01	-0.07	0.53	-0.12
29	6	-0.01	0.00	0.14	0.00	-0.03	0.04	-0.02	0.03	-0.06
30	1	0.00	-0.01	0.18	0.00	-0.05	0.06	-0.02	0.05	-0.09

31	6	-0.06	-0.01	0.11	-0.02	-0.05	0.03	0.01	-0.26	0.00
32	1	-0.10	-0.02	0.12	-0.04	-0.09	0.04	0.04	-0.50	0.03
33	1	0.01	-0.05	-0.09	-0.08	-0.01	0.01	0.03	-0.08	-0.09
		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies --		80.2923				89.0854			113.8383	
Red. masses --		7.6674				6.0257			7.1191	
Frc consts --		0.0291				0.0282			0.0544	
IR Inten --		3.1125				0.5650			0.5590	
Raman Activ --		0.6107				2.0937			0.2363	
Depolar (P) --		0.6984				0.7494			0.7482	
Depolar (U) --		0.8224				0.8568			0.8560	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	-0.02	-0.05	-0.02	0.03	0.00	0.04	0.01	0.00
2	6	0.01	-0.03	-0.05	0.00	0.05	-0.01	0.02	0.01	-0.01
3	6	0.03	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.04	0.01	0.00
4	6	0.04	-0.03	-0.07	-0.06	0.05	0.00	0.11	-0.02	0.04
5	6	0.00	-0.02	0.01	0.02	0.04	-0.01	0.05	0.00	-0.01
6	6	0.01	-0.04	-0.10	0.00	0.03	-0.01	0.00	0.02	-0.04
7	6	0.01	0.00	0.04	0.00	0.00	0.01	0.05	0.00	0.00
8	1	0.04	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.01	0.03	0.00	0.01
9	8	0.03	-0.03	-0.12	-0.08	0.09	-0.02	0.16	-0.10	0.11
10	8	0.09	-0.03	-0.01	-0.07	0.02	0.04	0.15	0.02	0.01
11	6	0.00	-0.02	0.05	0.02	0.01	0.00	0.05	0.00	0.00
12	6	-0.01	-0.03	0.09	0.04	0.05	-0.01	0.11	0.04	0.02
13	8	0.02	0.02	-0.12	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	-0.03
14	8	-0.01	-0.11	-0.10	0.00	0.02	0.00	-0.03	0.05	-0.05
15	1	0.01	0.00	0.07	0.00	-0.02	0.01	0.05	0.00	0.00
16	1	0.10	-0.04	-0.02	-0.10	0.04	0.04	0.22	-0.01	0.06
17	1	-0.01	-0.02	0.09	0.04	0.00	0.00	0.05	-0.01	0.00
18	8	-0.06	-0.05	0.30	0.05	0.07	-0.06	0.11	0.10	0.04
19	8	0.05	-0.01	-0.07	0.04	0.03	0.04	0.18	0.00	0.01
20	1	0.03	-0.02	0.02	0.06	0.04	0.03	0.22	0.03	0.03
21	8	-0.25	0.37	0.02	0.02	-0.04	-0.02	0.03	-0.06	-0.03
22	1	-0.23	0.20	-0.41	0.05	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.14
23	7	-0.03	-0.11	0.00	0.01	-0.34	0.05	-0.28	-0.03	-0.06
24	1	-0.06	-0.14	-0.05	0.02	-0.40	0.06	-0.33	-0.04	-0.13
25	7	0.05	-0.04	-0.02	0.01	-0.37	0.05	-0.19	-0.05	-0.07
26	1	-0.02	-0.09	-0.09	0.01	-0.14	0.02	-0.01	0.01	-0.09
27	6	0.08	0.08	0.04	0.01	-0.02	0.00	-0.15	-0.02	0.00
28	1	0.15	0.15	0.04	0.02	0.03	-0.01	-0.09	-0.02	0.01
29	6	0.02	0.09	0.10	0.01	0.27	-0.05	-0.23	0.03	0.06
30	1	0.03	0.17	0.16	0.01	0.60	-0.09	-0.22	0.06	0.13
31	6	-0.05	-0.04	0.07	0.01	0.06	-0.01	-0.31	0.02	0.01
32	1	-0.12	-0.07	0.10	0.01	0.16	-0.03	-0.38	0.04	0.03
33	1	-0.07	0.08	0.23	-0.05	-0.01	-0.02	0.06	0.06	-0.16
		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies --		119.7274				133.0046			152.6129	
Red. masses --		6.4523				6.9995			6.2847	
Frc consts --		0.0545				0.0730			0.0862	
IR Inten --		5.5793				8.7054			8.1280	
Raman Activ --		0.3566				0.4360			0.1315	
Depolar (P) --		0.5262				0.6842			0.6707	
Depolar (U) --		0.6896				0.8125			0.8029	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.02	-0.02	-0.04	0.00	0.05	-0.01	0.00	0.06
2	6	0.00	0.02	-0.10	-0.03	0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.15
3	6	-0.01	0.01	0.05	-0.04	0.00	0.04	-0.01	0.00	-0.05
4	6	-0.04	0.04	0.05	-0.02	-0.01	0.11	-0.02	0.00	-0.05



5	6	-0.01	0.02	-0.07	-0.03	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.10
6	6	0.01	0.00	-0.14	-0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.18
7	6	-0.01	0.01	0.06	-0.04	0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.07
8	1	0.00	0.00	0.11	-0.04	0.00	0.07	-0.01	0.01	-0.13
9	8	-0.01	0.09	0.17	0.03	-0.05	0.22	-0.08	-0.01	-0.19
10	8	-0.14	0.00	0.00	-0.07	0.01	0.03	0.05	0.02	0.00
11	6	-0.01	0.02	0.01	-0.03	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.01
12	6	-0.03	0.01	0.00	-0.03	0.01	0.05	0.01	0.00	0.00
13	8	0.01	0.10	-0.17	0.02	-0.16	0.01	-0.02	-0.04	0.20
14	8	0.02	-0.14	-0.12	-0.04	0.15	-0.04	-0.02	0.04	0.17
15	1	-0.01	0.01	0.13	-0.04	0.01	-0.05	0.00	0.01	-0.16
16	1	-0.16	0.02	0.07	-0.04	0.00	0.09	0.03	0.02	-0.11
17	1	-0.01	0.01	0.04	-0.03	0.01	-0.06	0.00	0.00	-0.04
18	8	-0.04	0.01	0.04	-0.06	0.02	0.15	0.03	-0.01	-0.09
19	8	-0.04	0.00	0.05	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.03
20	1	-0.06	-0.01	0.12	0.00	0.01	0.04	0.01	0.03	-0.14
21	8	0.10	-0.16	0.22	-0.03	-0.04	-0.42	0.01	0.05	0.07
22	1	0.14	-0.13	0.25	-0.04	0.07	-0.13	-0.04	-0.04	-0.08
23	7	-0.05	-0.02	-0.13	0.04	0.02	-0.08	-0.09	-0.02	-0.21
24	1	-0.11	-0.02	-0.23	0.01	-0.01	-0.13	-0.16	-0.04	-0.30
25	7	0.12	0.02	-0.16	0.13	-0.02	-0.09	0.11	-0.03	-0.24
26	1	0.01	-0.10	-0.15	-0.06	0.09	-0.08	-0.02	0.01	0.02
27	6	0.19	0.05	0.00	0.18	-0.03	0.01	0.20	-0.01	-0.04
28	1	0.33	0.08	0.01	0.26	-0.06	0.03	0.37	-0.02	-0.02
29	6	0.06	0.01	0.13	0.10	0.00	0.08	0.04	0.01	0.11
30	1	0.07	0.01	0.27	0.11	0.00	0.16	0.05	0.02	0.28
31	6	-0.09	-0.03	0.04	0.01	0.03	0.02	-0.15	0.00	-0.01
32	1	-0.24	-0.06	0.09	-0.07	0.06	0.04	-0.32	0.01	0.05
33	1	0.14	-0.11	0.15	-0.15	0.16	-0.56	0.03	-0.10	0.21

13

14

15

A

A

A

Frequencies --	162.6090	170.4141	179.4523
Red. masses --	7.1698	7.6017	5.4787
Frc consts --	0.1117	0.1301	0.1039
IR Inten --	2.7701	2.5910	0.5201
Raman Activ --	1.7756	0.6961	0.7754
Depolar (P) --	0.7491	0.7424	0.7168
Depolar (U) --	0.8565	0.8522	0.8350

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.09	0.03	-0.16	-0.11	0.00	-0.15	0.03	0.00	0.14
2	6	0.07	0.00	-0.04	-0.11	0.01	-0.11	0.03	0.01	-0.03
3	6	0.09	0.03	-0.16	-0.11	0.00	-0.08	0.03	-0.02	0.28
4	6	-0.01	0.09	-0.07	0.00	-0.06	-0.08	-0.03	0.03	0.00
5	6	0.05	0.00	0.10	-0.11	0.01	-0.01	0.02	0.02	-0.18
6	6	0.06	-0.09	-0.03	-0.10	0.00	-0.06	0.03	-0.07	-0.02
7	6	0.07	0.03	0.05	-0.11	-0.02	0.07	0.03	0.01	0.01
8	1	0.09	0.04	-0.28	-0.12	0.01	-0.09	0.03	-0.04	0.50
9	8	-0.05	0.29	-0.04	0.03	-0.16	-0.07	-0.09	0.05	-0.15
10	8	-0.13	-0.08	0.06	0.15	-0.03	0.05	-0.02	0.07	-0.05
11	6	0.05	0.00	0.20	-0.11	-0.02	0.10	0.02	0.04	-0.27
12	6	0.00	-0.03	0.05	-0.01	0.08	0.02	0.01	0.01	-0.02
13	8	0.06	-0.32	0.02	-0.13	-0.20	0.00	0.02	-0.24	0.02
14	8	0.07	0.10	-0.05	-0.04	0.20	-0.07	0.04	0.04	-0.03
15	1	0.07	0.04	0.11	-0.11	-0.03	0.16	0.03	0.02	0.04
16	1	-0.24	-0.01	0.16	0.26	-0.09	0.14	-0.07	0.09	-0.22
17	1	0.04	0.00	0.36	-0.10	-0.04	0.21	0.02	0.05	-0.47
18	8	-0.01	-0.12	0.07	-0.01	0.22	0.07	-0.03	0.04	0.12
19	8	-0.04	0.04	-0.07	0.14	0.00	-0.03	0.03	-0.04	0.08
20	1	-0.08	0.01	-0.12	0.23	0.07	-0.01	0.02	-0.04	0.25
21	8	0.01	-0.03	0.03	0.06	-0.05	0.22	0.02	0.00	0.07

22	1	0.07	0.11	0.27	0.11	0.03	0.38	0.08	0.01	0.02
23	7	-0.06	0.06	0.00	0.10	0.03	0.00	-0.02	0.04	0.00
24	1	-0.07	0.00	0.00	0.11	-0.01	0.03	-0.02	-0.01	0.01
25	7	-0.06	0.02	0.00	0.07	0.00	0.01	-0.02	0.02	0.00
26	1	0.09	0.05	-0.03	-0.05	0.13	-0.01	0.04	0.02	-0.01
27	6	-0.06	-0.03	0.01	0.07	-0.03	0.00	-0.03	-0.01	0.00
28	1	-0.06	-0.05	0.01	0.06	-0.05	0.00	-0.03	-0.03	0.00
29	6	-0.06	-0.03	0.01	0.09	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	0.00
30	1	-0.06	-0.07	0.01	0.09	-0.03	-0.03	-0.02	-0.05	0.00
31	6	-0.06	0.02	0.00	0.11	0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.00
32	1	-0.06	0.03	0.00	0.12	0.04	-0.02	-0.01	0.01	-0.01
33	1	-0.05	0.19	-0.17	0.05	0.08	0.09	-0.06	-0.03	0.13

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	199.5587	213.6309	228.2911
Red. masses --	2.2344	1.7702	6.9915
Frc consts --	0.0524	0.0476	0.2147
IR Inten --	27.4594	31.6942	19.1316
Raman Activ --	0.4247	0.4655	1.9438
Depolar (P) --	0.4392	0.5837	0.6914
Depolar (U) --	0.6103	0.7371	0.8175

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.03	-0.02	0.18
2	6	0.02	-0.01	-0.02	0.02	0.01	-0.05	0.00	0.00	0.20
3	6	0.01	-0.03	0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.03
4	6	0.01	-0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.04	-0.01	0.05
5	6	0.02	-0.02	-0.03	0.02	0.00	-0.04	0.02	-0.01	0.21
6	6	0.01	0.08	0.00	0.01	0.06	-0.01	0.02	0.04	-0.08
7	6	0.02	-0.03	0.01	0.01	-0.02	0.03	-0.01	-0.01	-0.18
8	1	0.01	-0.03	0.06	0.00	-0.02	0.02	-0.04	0.00	-0.15
9	8	0.01	-0.03	-0.04	0.02	-0.01	0.04	-0.08	-0.10	-0.07
10	8	0.03	-0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.03	0.06	0.00
11	6	0.02	-0.02	-0.03	0.02	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.01
12	6	-0.03	-0.05	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.07
13	8	-0.01	0.11	0.01	-0.04	0.03	0.03	0.26	-0.05	-0.21
14	8	0.04	0.15	0.00	0.06	0.15	0.01	-0.18	0.16	-0.21
15	1	0.02	-0.04	0.03	0.01	-0.03	0.07	-0.01	-0.01	-0.44
16	1	0.04	-0.03	-0.01	0.01	-0.02	0.02	0.02	0.05	-0.16
17	1	0.03	-0.01	-0.04	0.03	-0.01	0.02	0.03	0.00	-0.07
18	8	-0.04	-0.11	0.05	-0.03	-0.06	0.04	0.02	-0.08	-0.01
19	8	-0.08	-0.02	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.05	0.06	-0.03
20	1	-0.12	-0.05	0.03	-0.08	-0.03	0.04	-0.08	0.04	-0.19
21	8	0.01	-0.01	0.04	0.01	-0.02	0.01	0.06	-0.05	0.09
22	1	0.13	0.29	0.61	-0.07	-0.30	-0.59	-0.04	-0.16	-0.07
23	7	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.05
24	1	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.04
25	7	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.05
26	1	0.05	0.13	0.00	0.06	0.12	0.03	-0.19	0.11	-0.22
27	6	0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.05
28	1	0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.05
29	6	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.03
30	1	0.00	0.04	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.02	0.02
31	6	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.02	0.04
32	1	-0.03	0.02	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.02	0.04
33	1	-0.18	0.47	-0.35	0.20	-0.50	0.42	0.11	-0.22	0.24

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	279.3894	306.5745	322.7540
Red. masses --	6.3331	2.5196	1.7798
Frc consts --	0.2913	0.1395	0.1092

IR Inten	--	3.8274		1.8379		1.5651
Raman Activ	--	0.8482		1.5572		1.4850
Depolar (P)	--	0.7495		0.7080		0.4994
Depolar (U)	--	0.8568		0.8290		0.6661

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.15	-0.09	0.06	0.01	-0.05	0.01	0.01	0.02	0.04
2	6	0.01	-0.17	0.09	0.05	-0.01	0.00	-0.03	-0.02	-0.01
3	6	0.14	0.06	0.04	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.03	-0.01
4	6	0.10	-0.06	-0.01	-0.03	-0.08	0.01	0.01	0.05	0.04
5	6	-0.15	-0.10	0.04	-0.01	0.04	0.02	-0.01	-0.04	0.02
6	6	0.01	-0.05	0.03	0.09	-0.01	-0.01	-0.05	-0.01	-0.03
7	6	-0.01	0.15	0.01	-0.03	0.02	-0.02	0.01	0.02	-0.03
8	1	0.26	0.13	0.03	0.05	0.02	-0.02	0.00	0.02	-0.03
9	8	0.05	0.14	-0.03	-0.03	-0.11	0.00	0.01	0.06	0.02
10	8	-0.09	-0.19	-0.06	-0.05	-0.10	-0.02	0.03	0.10	-0.01
11	6	-0.15	0.05	-0.01	-0.01	0.04	0.02	-0.02	-0.01	0.03
12	6	-0.11	-0.06	-0.01	-0.03	0.07	0.01	0.01	-0.06	0.00
13	8	0.04	0.12	-0.02	0.08	0.00	0.00	-0.08	0.00	-0.01
14	8	-0.03	0.14	-0.02	0.14	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.02
15	1	-0.02	0.31	-0.02	-0.03	0.03	-0.05	0.01	0.04	-0.08
16	1	-0.29	-0.08	-0.11	-0.08	-0.08	-0.01	0.06	0.08	-0.07
17	1	-0.25	0.10	-0.07	0.00	0.03	0.04	-0.05	0.00	0.05
18	8	-0.08	0.18	-0.02	-0.03	0.11	0.00	0.01	-0.06	-0.01
19	8	0.11	-0.19	-0.04	-0.04	0.09	0.00	0.05	-0.09	-0.01
20	1	0.28	-0.06	-0.08	-0.05	0.08	-0.03	0.10	-0.06	-0.02
21	8	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
22	1	-0.17	-0.11	-0.04	0.58	0.20	-0.18	0.60	0.18	-0.21
23	7	0.00	-0.03	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
24	1	0.00	0.02	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00
25	7	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
26	1	-0.04	0.17	-0.05	0.16	-0.01	0.05	-0.02	0.01	0.02
27	6	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00
28	1	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00
29	6	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00
30	1	0.00	0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
31	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00
32	1	0.00	0.02	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00
33	1	0.24	-0.08	0.00	-0.61	0.01	0.21	-0.63	-0.02	0.25

22  
A

23  
A

24  
A

Frequencies	--	377.5132		380.2575		406.5875
Red. masses	--	5.4231		4.5273		7.4407
Frc consts	--	0.4554		0.3857		0.7247
IR Inten	--	13.6809		37.6769		14.6823
Raman Activ	--	3.6100		0.2077		2.8652
Depolar (P)	--	0.1736		0.7495		0.7497
Depolar (U)	--	0.2958		0.8568		0.8569

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.00	0.08	-0.02	0.02	-0.14	-0.07	0.04	-0.04
2	6	0.04	0.00	-0.03	0.00	0.02	0.09	0.00	0.08	-0.02
3	6	-0.04	-0.02	-0.11	-0.04	-0.05	-0.10	-0.05	0.28	-0.05
4	6	-0.09	0.07	0.09	0.01	0.04	-0.06	-0.10	-0.08	0.00
5	6	-0.05	-0.01	-0.06	0.00	0.01	-0.16	0.07	0.05	-0.11
6	6	0.14	-0.01	-0.02	0.02	0.02	0.14	0.00	0.09	0.04
7	6	-0.07	-0.02	-0.02	-0.02	-0.09	0.17	-0.01	0.28	0.09
8	1	-0.04	0.00	-0.23	-0.08	-0.07	-0.16	0.05	0.34	-0.08
9	8	-0.11	-0.05	0.01	0.05	0.06	0.03	-0.09	-0.22	-0.02
10	8	0.05	0.24	0.04	0.04	0.02	0.00	-0.12	-0.10	0.02
11	6	-0.05	-0.02	0.12	0.01	-0.05	-0.07	0.04	0.27	0.03
12	6	-0.10	-0.06	-0.06	-0.05	0.00	-0.09	0.10	-0.09	-0.06



30	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
31	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
32	1	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
33	1	0.15	0.04	-0.10	0.57	0.13	-0.36	-0.09	-0.02	0.06
		28			29			30		
		A			A			A		
Frequencies --		553.9933				585.0921			599.3549	
Red. masses --		3.6821				1.4401			2.7931	
Frc consts --		0.6658				0.2905			0.5912	
IR Inten --		40.3853				116.5593			25.1692	
Raman Activ --		6.3673				0.6860			0.4074	
Depolar (P) --		0.2228				0.6648			0.7216	
Depolar (U) --		0.3645				0.7986			0.8383	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.09	-0.02	-0.12	0.03	-0.02	-0.04	-0.02	0.02	0.09
2	6	0.07	-0.05	0.00	0.01	-0.04	-0.02	0.00	0.02	0.21
3	6	0.17	0.00	-0.06	0.05	-0.01	0.06	-0.03	0.02	-0.10
4	6	-0.12	0.02	0.01	-0.05	0.01	-0.04	0.00	0.02	-0.04
5	6	0.04	-0.03	0.06	-0.01	-0.03	0.01	0.02	0.02	0.10
6	6	-0.01	-0.05	0.01	0.00	-0.04	0.02	0.00	-0.01	-0.08
7	6	0.16	0.02	0.09	0.02	0.03	-0.06	0.01	-0.02	0.15
8	1	0.19	0.02	-0.03	0.07	0.00	0.15	-0.06	0.03	-0.43
9	8	-0.11	-0.14	0.02	-0.03	-0.01	0.01	0.02	0.00	-0.01
10	8	-0.05	0.12	0.04	-0.02	0.04	-0.03	-0.02	-0.02	-0.01
11	6	0.07	0.02	-0.09	-0.02	-0.01	0.05	0.04	0.02	-0.11
12	6	-0.05	-0.03	0.08	0.02	0.00	-0.04	-0.01	0.01	-0.04
13	8	-0.07	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.11	-0.01	-0.03
14	8	-0.06	0.01	-0.04	-0.03	0.01	0.00	0.10	-0.01	-0.05
15	1	0.16	0.06	0.24	0.02	0.08	-0.13	0.01	-0.07	0.11
16	1	0.18	0.00	0.21	0.35	-0.13	0.55	0.11	-0.07	0.36
17	1	0.03	0.05	-0.19	-0.05	0.00	0.10	0.07	0.04	-0.44
18	8	-0.03	0.09	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.03	0.01	0.00
19	8	-0.05	-0.03	0.01	0.00	0.03	-0.04	0.01	-0.02	-0.03
20	1	0.11	0.07	-0.67	-0.23	-0.12	0.62	-0.08	-0.07	0.51
21	8	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
22	1	0.16	0.03	-0.09	0.02	0.00	-0.02	-0.09	-0.02	0.05
23	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
25	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
26	1	-0.07	0.02	-0.07	-0.03	0.02	-0.02	0.11	0.01	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	0.00	0.00	-0.01
29	6	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	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
33	1	0.15	0.03	-0.08	0.01	0.00	-0.01	-0.05	-0.01	0.03
		31			32			33		
		A			A			A		
Frequencies --		617.3343				627.6689			655.1367	
Red. masses --		1.4303				3.4666			4.6503	
Frc consts --		0.3212				0.8047			1.1760	
IR Inten --		15.5382				12.1212			129.4001	
Raman Activ --		3.7552				0.1964			0.2982	
Depolar (P) --		0.7326				0.7498			0.7215	
Depolar (U) --		0.8457				0.8570			0.8382	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.12	0.00
2	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.07	0.02
3	6	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.10	0.01

4	6	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.15	0.00
5	6	0.00	0.01	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.10	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01
7	6	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.05	0.01
8	1	-0.02	0.01	-0.12	0.01	0.00	0.00	-0.07	0.14	-0.01
9	8	0.01	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.16	0.08
10	8	-0.02	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.02	-0.07
11	6	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.13	0.12	0.01
12	6	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.13	-0.01
13	8	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00
14	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01
15	1	-0.02	0.00	-0.04	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.16	-0.03
16	1	0.33	-0.17	0.66	-0.01	0.00	-0.01	0.41	-0.20	-0.34
17	1	-0.02	-0.01	0.10	-0.01	0.00	0.00	0.07	0.15	-0.01
18	8	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.08	0.17	0.05
19	8	-0.01	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.14	-0.04	-0.04
20	1	0.16	0.11	-0.57	-0.01	0.00	0.02	-0.43	-0.27	-0.22
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.24	-0.04	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.11	0.02	0.00	0.01	0.00
25	7	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.01	0.00	0.00	0.00
26	1	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.02	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.35	0.05	0.00	0.01	0.00
29	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.24	-0.04	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.37	-0.06	0.00	0.00	0.00
31	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.27	0.04	0.00	0.00	0.00
32	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.71	0.11	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.04	0.01	-0.03

34

35

36

A

A

A

Frequencies --	671.9190	673.1302	735.1766
Red. masses --	5.1876	4.7117	6.1087
Frc consts --	1.3799	1.2579	1.9453
IR Inten --	0.6950	10.5498	34.7723
Raman Activ --	0.7358	5.0386	0.0776
Depolar (P) --	0.5418	0.1263	0.7089
Depolar (U) --	0.7028	0.2242	0.8297

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.03	0.00	0.04	-0.13	-0.02	0.04	-0.02	0.12
2	6	0.03	0.00	0.00	0.16	0.01	0.00	-0.01	0.06	-0.27
3	6	0.02	-0.03	-0.01	0.03	-0.12	-0.02	0.06	-0.03	-0.12
4	6	-0.01	-0.03	0.01	-0.07	-0.12	0.01	0.10	-0.07	0.22
5	6	0.00	0.02	0.01	0.03	0.14	0.02	-0.05	-0.02	0.09
6	6	0.02	0.02	0.00	0.09	0.00	0.01	-0.02	0.33	-0.02
7	6	-0.03	0.00	0.01	-0.15	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.09
8	1	0.05	-0.01	-0.01	0.18	-0.02	0.01	0.06	-0.03	-0.12
9	8	-0.02	0.02	0.01	-0.09	0.10	0.07	-0.05	0.04	-0.06
10	8	0.02	0.00	-0.01	0.11	-0.01	-0.06	-0.01	-0.01	-0.10
11	6	-0.01	0.02	0.00	0.02	0.12	0.01	-0.07	-0.05	-0.12
12	6	-0.02	0.02	0.01	-0.09	0.12	0.00	-0.05	-0.06	0.25
13	8	-0.01	0.01	0.02	-0.08	0.02	0.10	0.06	-0.07	0.03
14	8	-0.02	0.00	-0.02	-0.08	-0.02	-0.11	-0.05	-0.05	0.06
15	1	-0.03	0.02	0.01	-0.15	-0.01	0.01	-0.01	0.08	0.30
16	1	0.09	-0.04	-0.03	0.40	-0.19	-0.23	0.26	-0.14	0.34
17	1	0.02	0.00	-0.01	0.18	0.04	-0.01	-0.07	-0.05	-0.08
18	8	-0.02	-0.03	-0.01	-0.10	-0.12	-0.05	0.04	0.02	-0.07
19	8	0.03	0.01	0.00	0.12	0.03	0.04	0.00	-0.01	-0.09
20	1	0.07	0.05	0.05	0.43	0.26	0.16	-0.16	-0.11	0.33

21	8	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	0.05	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.00
23	7	0.00	0.25	-0.04	0.00	-0.05	0.01	0.00	-0.01	0.00
24	1	0.01	-0.17	0.03	0.02	0.04	0.02	0.01	-0.14	0.02
25	7	0.00	-0.37	0.06	-0.01	0.07	-0.01	0.00	0.03	-0.01
26	1	-0.01	-0.18	-0.03	-0.08	-0.02	-0.24	-0.05	-0.20	0.04
27	6	0.00	0.30	-0.05	0.00	-0.05	0.02	0.00	-0.02	0.00
28	1	0.00	0.70	-0.11	0.00	-0.13	0.03	0.00	-0.02	0.01
29	6	0.00	-0.18	0.03	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	-0.27	0.04	0.01	0.05	-0.01	0.00	0.04	0.00
31	6	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
32	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00
33	1	0.01	0.00	-0.01	0.04	0.02	-0.03	0.02	0.01	-0.01

37

38

39

A

A

A

Frequencies --	745.7333	766.0880	768.3737
Red. masses --	5.0787	2.5731	1.4034
Frc consts --	1.6641	0.8898	0.4882
IR Inten --	8.8557	62.8615	34.7169
Raman Activ --	17.4790	0.7763	0.2782
Depolar (P) --	0.0287	0.4559	0.3893
Depolar (U) --	0.0557	0.6263	0.5604

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	0.01	-0.03	0.04	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00
2	6	-0.14	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.04	0.00	0.00	-0.01
3	6	0.02	0.11	0.01	0.10	-0.03	0.04	-0.04	0.01	-0.01
4	6	-0.05	-0.13	0.06	-0.08	0.00	-0.10	0.03	0.00	0.04
5	6	-0.02	-0.01	0.03	-0.04	-0.02	0.01	0.02	0.01	-0.01
6	6	-0.16	-0.06	-0.01	-0.02	0.22	-0.04	0.01	-0.09	0.02
7	6	0.26	0.01	0.00	0.02	0.02	0.03	-0.01	-0.01	-0.01
8	1	-0.09	0.03	0.06	0.12	0.00	-0.21	-0.05	0.00	0.10
9	8	-0.11	0.06	0.05	-0.02	0.00	0.05	0.01	0.00	-0.02
10	8	0.08	-0.05	-0.07	0.04	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01
11	6	0.07	-0.08	-0.01	-0.09	-0.06	0.04	0.04	0.02	-0.01
12	6	-0.09	0.11	-0.02	0.05	0.02	-0.13	-0.02	-0.01	0.05
13	8	0.06	-0.01	-0.17	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.02	0.00
14	8	0.06	0.04	0.17	0.01	-0.04	0.02	0.00	0.02	-0.01
15	1	0.27	-0.03	0.04	0.02	0.22	-0.33	-0.01	-0.09	0.14
16	1	0.35	-0.21	-0.21	0.03	-0.02	-0.18	-0.02	0.01	0.07
17	1	-0.02	-0.03	0.00	-0.13	-0.01	-0.24	0.05	0.01	0.10
18	8	-0.12	-0.07	-0.04	0.01	-0.01	0.04	0.00	0.00	-0.02
19	8	0.10	0.07	0.04	-0.02	0.00	0.04	0.01	0.00	-0.01
20	1	0.37	0.28	0.17	0.00	0.00	-0.14	0.00	0.00	0.05
21	8	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.07	-0.01	0.03	-0.03	-0.01	0.02	0.01	0.00	-0.01
23	7	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.03	0.00
24	1	-0.01	0.00	-0.03	0.00	-0.28	0.04	0.00	-0.18	0.03
25	7	0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01	0.00	0.02	0.00
26	1	0.05	0.10	0.35	0.01	-0.10	0.04	0.00	0.06	-0.02
27	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.04	0.01
28	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.15	-0.02	0.00	0.24	-0.04
29	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.01	0.00	-0.09	0.01
30	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.56	-0.08	0.00	0.78	-0.11
31	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.06	0.01
32	1	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.29	-0.04	0.00	0.42	-0.07
33	1	-0.01	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01

40

41

42

A

A

A

Frequencies --	794.8206	809.1634	813.7251
Red. masses --	1.8306	5.8056	1.2235

Frc consts --	0.6814	2.2396	0.4773
IR Inten --	42.4888	12.4725	80.0501
Raman Activ --	0.9458	0.2163	0.1002
Depolar (P) --	0.6736	0.7432	0.6123
Depolar (U) --	0.8050	0.8527	0.7596

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	-0.02
2	6	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01	0.01
3	6	0.02	-0.01	-0.03	0.03	0.01	0.02	0.01	0.00	-0.01
4	6	0.00	-0.01	0.02	-0.18	0.06	-0.34	0.01	-0.01	0.04
5	6	-0.01	0.00	-0.04	-0.01	0.00	-0.20	0.00	0.00	0.02
6	6	-0.01	0.11	-0.04	0.01	0.02	0.00	0.00	0.03	-0.01
7	6	0.00	0.02	-0.11	0.08	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01
8	1	0.04	-0.05	0.50	0.00	0.02	-0.29	0.01	-0.01	0.07
9	8	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.00	0.11	-0.01	0.00	-0.01
10	8	0.00	0.00	-0.01	0.06	-0.04	0.07	0.00	0.00	-0.01
11	6	-0.02	-0.01	-0.03	-0.01	-0.02	-0.02	-0.01	-0.01	0.00
12	6	0.00	0.00	0.01	-0.10	-0.05	0.35	0.01	0.01	-0.04
13	8	-0.03	-0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.00
14	8	0.03	-0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
15	1	0.00	-0.01	0.64	0.08	0.05	0.04	-0.01	0.01	0.05
16	1	0.02	-0.01	0.00	-0.06	0.01	-0.26	0.02	-0.01	0.03
17	1	-0.04	-0.05	0.47	-0.06	-0.03	0.33	-0.01	-0.01	0.00
18	8	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.01
19	8	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	-0.08	-0.01	-0.01	0.01
20	1	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	0.21	0.00	0.00	-0.03
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
23	7	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00
24	1	-0.01	-0.15	0.02	0.00	0.46	-0.07	0.00	0.91	-0.14
25	7	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00
26	1	0.04	-0.04	0.03	0.01	-0.07	0.00	0.00	-0.09	0.01
27	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.04	-0.01
28	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.06	0.01
29	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00
30	1	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.07	-0.01	0.00	0.12	-0.02
31	6	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.05	0.01	0.00	-0.09	0.01
32	1	0.00	-0.05	0.01	0.00	0.16	-0.02	0.00	0.31	-0.05
33	1	-0.01	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00

	43	44	45
	A	A	A

Frequencies --	833.9881	865.2331	887.4566
Red. masses --	6.1752	3.8645	1.2025
Frc consts --	2.5306	1.7046	0.5580
IR Inten --	12.0325	1.2872	12.4111
Raman Activ --	4.9415	0.7337	0.2984
Depolar (P) --	0.0515	0.7401	0.7500
Depolar (U) --	0.0980	0.8507	0.8571

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.10	0.08	-0.01	0.00	0.00	0.22	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.20	0.00	-0.01	0.00
3	6	-0.12	0.22	0.02	0.01	0.01	-0.11	0.00	0.00	0.00
4	6	0.01	-0.04	0.05	-0.08	0.03	-0.17	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.09	-0.09	0.00	-0.01	0.00	0.22	0.00	0.00	0.00
6	6	0.25	0.01	0.04	0.01	-0.06	0.03	0.00	0.00	0.00
7	6	0.24	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00
8	1	-0.34	0.08	0.00	0.01	-0.03	0.29	0.00	0.00	0.00
9	8	-0.03	0.02	0.00	0.02	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00
10	8	0.01	-0.03	-0.03	0.03	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.09	-0.22	-0.02	-0.01	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.00



12	6	-0.01	0.03	-0.03	0.05	0.03	-0.19	0.00	0.00	0.00
13	8	0.00	0.05	0.24	0.02	0.02	0.01	0.00	0.01	0.00
14	8	0.01	-0.04	-0.26	-0.03	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
15	1	0.24	0.01	-0.01	0.00	-0.04	0.76	0.00	-0.01	0.01
16	1	0.07	-0.06	-0.03	-0.01	-0.01	-0.06	-0.01	0.00	0.00
17	1	-0.31	-0.12	-0.01	-0.02	-0.03	0.27	0.00	0.00	0.00
18	8	-0.03	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00
19	8	0.02	0.04	0.02	-0.02	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00
20	1	0.06	0.07	0.03	0.00	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.05	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	7	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00
24	1	0.02	-0.05	0.05	0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.38	0.06
25	7	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
26	1	0.03	-0.10	-0.50	-0.03	0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00
27	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.01
28	1	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.46	0.07
29	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.01
30	1	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.34	0.04
31	6	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.10	0.02
32	1	0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.01	0.70	-0.10
33	1	0.03	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00

46

47

48

A

A

A

Frequencies --	905.9519	921.9482	941.8188
Red. masses --	6.3828	1.3426	6.3162
Frc consts --	3.0865	0.6724	3.3010
IR Inten --	6.2833	9.2884	3.9464
Raman Activ --	3.9095	0.0956	5.2660
Depolar (P) --	0.7499	0.7430	0.7423
Depolar (U) --	0.8571	0.8525	0.8521

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	0.25	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.01	0.30	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.12	-0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.05	-0.06	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.07	0.25	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.01	-0.21	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
7	6	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	1	-0.03	-0.17	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	8	-0.12	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	8	0.09	-0.14	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.12	-0.09	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.08	-0.04	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	8	-0.02	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
14	8	0.01	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02
15	1	-0.02	0.36	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	0.27	-0.25	-0.19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.04	-0.16	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	8	0.12	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	-0.09	-0.16	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.26	-0.29	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	7	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.18	0.00	0.00
24	1	-0.01	-0.06	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04	0.23
25	7	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.15	0.01	0.05
26	1	0.01	0.10	-0.01	0.00	-0.06	0.01	0.01	0.00	-0.01
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.02	0.02	0.05	0.32
28	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.82	0.12	-0.12	0.04	0.31

29	6	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.10	0.01	0.42	-0.01	-0.04
30	1	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.42	-0.06	0.43	0.00	0.00
31	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.05	-0.01	-0.07	-0.05	-0.35
32	1	0.01	0.06	-0.01	0.01	-0.31	0.05	-0.28	-0.05	-0.30
33	1	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

49

50

51

A

A

A

Frequencies --	960.2324	983.1945	1023.8086
Red. masses --	3.1185	1.3973	1.3531
Frc consts --	1.6941	0.7958	0.8357
IR Inten --	38.0605	0.1171	1.7155
Raman Activ --	2.3770	0.0449	0.0413
Depolar (P) --	0.3528	0.2882	0.2550
Depolar (U) --	0.5216	0.4474	0.4063

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.01
2	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.13	0.00	-0.01	0.08
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.01
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-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	0.01	0.00	0.01	-0.12
8	1	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.05	0.73	-0.02	0.03	-0.45
9	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
10	8	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.11	0.00	-0.01	0.10
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.01
13	8	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	8	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.00	-0.06	0.66
16	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.05	-0.65	0.01	0.05	-0.57
18	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	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	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
21	8	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	7	-0.16	0.03	0.16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.33	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	7	0.20	0.02	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
27	6	0.11	-0.02	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	-0.27	-0.03	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	6	-0.02	-0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.05	0.06	0.56	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	6	-0.11	-0.02	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	0.44	-0.02	-0.29	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	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 --	1033.0952	1071.6360	1078.9726
Red. masses --	1.0870	1.3832	1.5098
Frc consts --	0.6835	0.9359	1.0356
IR Inten --	96.4999	11.4722	94.6032
Raman Activ --	0.2378	2.7042	1.3611
Depolar (P) --	0.6946	0.6495	0.7336
Depolar (U) --	0.8198	0.7875	0.8463

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	0.00	0.00

3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	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	0.01	0.00
6	6	0.00	0.03	-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	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00
9	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	8	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	-0.01	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	8	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
14	8	0.00	-0.06	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
15	1	0.00	0.00	-0.01	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	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	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	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	7	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.01	0.06	0.01	0.00	0.03
24	1	0.00	0.05	-0.01	-0.18	-0.01	-0.05	0.08	0.02	0.12
25	7	0.00	-0.03	0.01	0.02	-0.01	-0.04	-0.10	-0.02	-0.11
26	1	-0.02	0.98	-0.14	0.01	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
27	6	0.00	0.01	0.00	0.07	0.01	0.08	-0.02	0.00	0.02
28	1	0.00	-0.04	0.01	0.53	0.03	0.14	0.25	0.01	0.05
29	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.01	-0.06	-0.03	0.01	0.08
30	1	0.00	0.03	0.00	-0.13	-0.10	-0.68	0.01	0.08	0.58
31	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.07	-0.01	-0.04
32	1	0.00	0.01	0.00	0.37	-0.01	-0.10	0.69	-0.03	-0.23
33	1	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

55

A

56

A

57

A

Frequencies -- 1102.2668 1153.2260 1178.1302

Red. masses -- 3.9008 5.2867 1.8073

Frc consts -- 2.7924 4.1425 1.4780

IR Inten -- 28.4775 41.1193 65.5582

Raman Activ -- 25.4420 5.7932 16.1640

Depolar (P) -- 0.0767 0.0702 0.1362

Depolar (U) -- 0.1425 0.1312 0.2397

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.09	-0.01	-0.11	-0.22	0.00	0.00	0.01	0.00
2	6	0.21	0.01	0.01	0.04	-0.02	0.00	-0.04	0.00	0.00
3	6	-0.08	0.25	0.03	-0.06	-0.11	-0.02	0.02	0.01	0.00
4	6	0.01	-0.05	-0.03	0.06	-0.13	-0.05	0.00	0.00	0.00
5	6	0.04	0.10	0.01	-0.13	0.20	0.00	0.00	-0.01	0.00
6	6	0.01	-0.01	-0.04	0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.01
7	6	-0.08	-0.01	0.00	0.24	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00
8	1	0.35	0.54	0.02	-0.40	-0.35	0.00	0.11	0.07	0.00
9	8	0.02	0.00	-0.01	0.09	0.04	-0.04	0.00	0.00	0.00
10	8	-0.04	0.05	0.03	-0.10	0.11	0.08	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.06	-0.26	-0.03	-0.07	0.11	0.02	0.01	0.00	0.00
12	6	0.01	0.07	0.02	0.06	0.17	0.04	0.00	0.01	0.00
13	8	-0.04	-0.01	-0.06	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01
14	8	-0.05	0.01	0.09	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.03
15	1	-0.09	-0.05	0.00	0.26	0.03	0.00	-0.02	-0.04	0.00
16	1	0.05	-0.01	-0.03	0.13	-0.02	-0.08	0.01	-0.01	0.00
17	1	0.30	-0.45	-0.03	-0.34	0.27	0.00	0.07	-0.03	0.00
18	8	0.02	0.00	0.01	0.11	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00
19	8	-0.05	-0.06	-0.02	-0.11	-0.14	-0.06	-0.01	0.00	0.00

20	1	0.08	0.03	0.02	0.22	0.10	0.08	0.03	0.02	0.01
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
23	7	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.11	0.00	0.02
24	1	-0.01	0.00	0.00	0.04	0.01	0.06	0.36	0.06	0.35
25	7	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.07
26	1	-0.04	0.01	0.07	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.07
27	6	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.08	0.00	0.01
28	1	-0.01	0.00	-0.01	0.06	0.00	0.00	0.65	0.02	0.09
29	6	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.12	-0.01	-0.06
30	1	0.00	-0.01	-0.06	-0.01	0.00	0.00	-0.10	0.04	0.25
31	6	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.10	-0.02	-0.11
32	1	-0.08	0.00	0.03	-0.08	0.00	0.01	-0.38	-0.01	-0.05
33	1	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00

58

59

60

A

A

A

Frequencies --	1181.6654	1190.1389	1212.0644
Red. masses --	2.2735	1.8810	1.6135
Frc consts --	1.8704	1.5697	1.3966
IR Inten --	71.0474	232.7069	391.1369
Raman Activ --	1.8015	1.9928	9.1245
Depolar (P) --	0.4843	0.5419	0.6876
Depolar (U) --	0.6526	0.7029	0.8149

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.01	0.00	-0.04	-0.04	0.01	-0.04	-0.03	0.00
2	6	0.20	0.03	0.01	-0.09	0.06	0.00	0.00	-0.04	-0.01
3	6	-0.09	-0.02	-0.01	0.00	-0.04	-0.01	-0.02	-0.02	0.00
4	6	-0.01	0.01	0.01	0.03	-0.10	-0.04	-0.01	0.07	0.02
5	6	0.03	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.08	-0.06	0.00
6	6	0.05	-0.01	-0.05	-0.02	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.00
7	6	0.04	0.04	0.01	-0.02	0.07	0.01	-0.02	0.05	0.00
8	1	-0.61	-0.35	0.00	0.04	-0.03	0.01	-0.14	-0.10	-0.02
9	8	0.00	0.00	0.00	0.05	0.02	-0.02	-0.03	0.00	0.02
10	8	0.01	-0.01	-0.01	-0.08	0.06	0.06	0.07	-0.03	-0.04
11	6	-0.06	-0.02	0.00	0.06	-0.05	-0.01	0.02	-0.03	0.00
12	6	-0.03	-0.10	-0.02	-0.01	-0.05	-0.01	0.01	0.07	0.02
13	8	-0.04	-0.01	-0.05	0.02	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
14	8	-0.05	0.01	0.08	0.02	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00
15	1	0.02	0.41	0.03	-0.05	0.74	0.06	-0.05	0.65	0.06
16	1	0.00	-0.01	-0.01	0.26	-0.14	-0.17	-0.32	0.20	0.21
17	1	-0.28	0.08	0.01	0.41	-0.23	-0.01	0.12	-0.08	-0.02
18	8	-0.04	0.01	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.01
19	8	0.07	0.07	0.03	0.04	0.03	0.02	-0.08	-0.04	-0.03
20	1	-0.24	-0.16	-0.10	-0.16	-0.11	-0.07	0.40	0.32	0.16
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	7	0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
24	1	0.07	0.01	0.08	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
25	7	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	-0.05	0.02	0.04	0.02	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00
27	6	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
28	1	0.15	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	6	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	-0.01	0.01	0.06	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
31	6	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	-0.12	0.00	0.01	0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
33	1	0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00

61

62

63

A

A

A

Frequencies --	1217.1969	1237.2319	1263.3396
----------------	-----------	-----------	-----------

Red. masses --	3.9350	1.7320	1.7329
Frc consts --	3.4349	1.5621	1.6296
IR Inten --	48.0871	21.6943	1.0907
Raman Activ --	40.3397	23.8231	1.5723
Depolar (P) --	0.0625	0.1129	0.6621
Depolar (U) --	0.1177	0.2030	0.7967

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.02	0.00	0.09	0.12	0.01	0.13	0.01	0.00
2	6	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.11	-0.01
3	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.03	0.05	0.00
4	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.01	-0.02	0.04	0.00
5	6	0.01	-0.02	0.00	0.07	-0.10	-0.01	-0.14	0.02	0.00
6	6	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.03	0.00
7	6	-0.01	0.00	0.00	-0.07	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00
8	1	0.05	0.02	0.00	-0.27	-0.14	0.01	-0.54	-0.26	-0.01
9	8	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	0.01
10	8	-0.01	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.04	0.01	-0.02	-0.01
11	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.03	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.02	0.05	0.00
13	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
14	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
15	1	-0.02	0.02	0.00	-0.07	-0.08	-0.01	-0.01	-0.09	-0.02
16	1	0.04	-0.03	-0.03	0.51	-0.34	-0.34	0.05	-0.04	-0.03
17	1	0.04	-0.01	0.00	-0.19	0.09	-0.01	0.67	-0.27	-0.01
18	8	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.01	0.02	-0.02	0.00
19	8	-0.01	0.00	0.00	-0.07	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	0.00
20	1	0.04	0.03	0.02	0.41	0.33	0.17	-0.13	-0.11	-0.06
21	8	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	7	-0.07	0.04	0.28	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
24	1	0.02	0.07	0.44	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
25	7	-0.14	-0.03	-0.17	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
26	1	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.00
27	6	0.05	-0.04	-0.23	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
28	1	0.30	-0.03	-0.23	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
29	6	0.18	-0.01	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.21	-0.01	-0.05	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
31	6	0.00	0.02	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	-0.51	0.04	0.30	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	64	65	66
	A	A	A

Frequencies --	1319.6539	1335.3566	1367.0584
Red. masses --	1.6643	5.9516	4.6977
Frc consts --	1.7077	6.2528	5.1726
IR Inten --	30.6308	0.4660	299.2068
Raman Activ --	28.5263	10.6937	6.7020
Depolar (P) --	0.2087	0.7485	0.0712
Depolar (U) --	0.3453	0.8561	0.1329

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.25	-0.14	-0.02	-0.09	0.07	0.01
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33	0.02	-0.13	0.00	0.02
3	6	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.13	-0.01	0.03	-0.06	-0.01
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.01
5	6	0.01	0.00	0.00	-0.24	-0.16	-0.02	-0.10	-0.08	-0.01
6	6	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.04	0.01	0.36	-0.02	-0.21
7	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.23	0.02	0.02	0.01	0.00
8	1	-0.01	-0.01	0.00	0.19	0.11	-0.01	0.38	0.15	0.01
9	8	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.02	0.01	0.00	-0.01
10	8	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.00

11	6	0.00	0.00	0.00	0.19	-0.11	-0.01	0.06	0.05	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.05	-0.02	0.00	0.02	0.00
13	8	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.07	-0.01	-0.05
14	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.11	0.03	0.22
15	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.42	-0.04	0.02	0.06	0.01
16	1	-0.01	0.01	0.01	-0.23	0.18	0.15	0.06	-0.05	-0.04
17	1	-0.01	0.00	0.00	-0.24	0.11	-0.01	0.34	-0.08	0.00
18	8	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.01
19	8	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00
20	1	-0.01	-0.01	-0.01	0.27	0.25	0.11	0.01	0.01	0.00
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
22	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.06
23	7	0.05	0.01	0.07	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.01
24	1	0.40	0.08	0.51	0.01	0.01	0.02	-0.03	-0.01	-0.05
25	7	0.07	-0.02	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
26	1	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.05	0.01	-0.03	-0.08	-0.59
27	6	0.03	0.01	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04
28	1	-0.63	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.03
29	6	-0.05	0.01	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.02
30	1	-0.10	-0.04	-0.30	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.01	0.08
31	6	-0.11	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
32	1	0.09	-0.02	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.01
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.05	-0.05

67

68

69

A

A

A

Frequencies --	1388.1626	1400.9350	1414.9839
Red. masses --	2.5738	2.9427	2.9004
Frc consts --	2.9222	3.4028	3.4214
IR Inten --	248.8886	17.5980	65.8697
Raman Activ --	1.6944	19.3325	11.7977
Depolar (P) --	0.3804	0.1896	0.1498
Depolar (U) --	0.5511	0.3187	0.2606

Atom AN

X

Y

Z

X

Y

Z

X

Y

Z

1	6	0.01	-0.05	0.00	-0.09	-0.08	0.00	0.01	-0.02	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
3	6	-0.07	-0.04	0.00	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00
4	6	-0.04	0.18	0.06	-0.05	0.24	0.08	0.00	0.00	0.00
5	6	0.03	-0.07	0.00	-0.10	0.07	0.00	0.01	0.01	0.00
6	6	-0.01	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.02	-0.05	0.00	0.03
7	6	-0.01	0.04	0.00	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	1	0.19	0.12	0.00	0.29	0.17	0.00	-0.04	-0.02	0.00
9	8	0.03	-0.02	-0.02	0.05	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
10	8	-0.01	-0.06	-0.01	-0.02	-0.08	-0.01	0.00	0.00	0.00
11	6	0.07	-0.04	0.00	-0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00
12	6	0.03	0.24	0.05	-0.02	-0.18	-0.04	0.00	0.00	0.00
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
14	8	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.00
15	1	-0.02	0.17	0.02	0.09	0.06	0.01	0.00	-0.01	0.00
16	1	0.33	-0.26	-0.23	0.44	-0.34	-0.30	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.33	0.16	0.00	0.26	-0.11	0.00	-0.05	0.01	0.00
18	8	-0.04	-0.03	-0.02	0.05	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
19	8	0.03	-0.07	-0.01	-0.02	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.46	-0.41	-0.20	0.32	0.30	0.14	0.00	0.00	0.00
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
23	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.14
24	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.31	-0.05	-0.29
25	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.16	-0.02	-0.15
26	1	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.01	0.08	0.01	-0.03	-0.23
27	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.02	0.14

28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08	0.03	0.19
29	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.01	-0.06
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.06	0.06	0.39
31	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.01	-0.09
32	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.62	0.02	0.13
33	1	0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00

		70		71		72				
		A		A		A				
Frequencies --		1456.2150				1506.8138				1515.6774
Red. masses --		4.0610				2.5523				2.9778
Frc consts --		5.0738				3.4143				4.0305
IR Inten --		25.7346				6.4817				4.5594
Raman Activ --		35.3430				0.4034				10.8438
Depolar (P) --		0.6097				0.4183				0.2504
Depolar (U) --		0.7576				0.5899				0.4005

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.01	0.00	-0.11	-0.12	-0.01	0.12	-0.17	-0.02
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.10	0.01	-0.20	-0.02	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.01	0.00	0.03	0.09	0.01
4	6	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.05	0.02	-0.02	0.09	0.01
5	6	-0.01	-0.01	0.00	0.13	-0.06	0.00	0.07	0.20	0.02
6	6	0.03	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.04	0.01	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.19	0.02	-0.07	-0.03	0.00
8	1	0.03	0.01	0.00	-0.32	-0.33	-0.03	-0.33	-0.12	-0.01
9	8	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00
10	8	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
11	6	0.00	0.01	0.00	-0.12	-0.05	-0.01	0.08	-0.08	-0.01
12	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.09	-0.01
13	8	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.02
14	8	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01	0.04
15	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.67	-0.06	-0.10	0.09	0.01
16	1	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.03	-0.04	0.04	-0.03	-0.03
17	1	0.03	-0.01	0.00	0.31	-0.29	-0.02	-0.48	0.20	0.01
18	8	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	0.04	0.04	0.02
21	8	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	0.02	0.01	0.00
23	7	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02
24	1	0.13	0.04	0.28	0.01	0.00	0.01	0.07	0.01	0.09
25	7	0.12	0.01	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.03
26	1	-0.02	0.00	0.03	0.01	0.00	-0.08	0.05	-0.09	-0.62
27	6	-0.20	-0.03	-0.18	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02
28	1	0.49	-0.02	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.02
29	6	0.03	0.05	0.35	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
30	1	-0.06	-0.08	-0.55	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02
31	6	0.09	-0.03	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
32	1	-0.20	-0.02	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00

		73		74		75				
		A		A		A				
Frequencies --		1538.4662				1553.0064				1592.3007
Red. masses --		2.3482				1.8990				2.6438
Frc consts --		3.2746				2.6985				3.9494
IR Inten --		35.4002				33.4515				11.3114
Raman Activ --		10.5449				1.7861				6.2853
Depolar (P) --		0.7014				0.3137				0.6277
Depolar (U) --		0.8245				0.4776				0.7712
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.04	0.00	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.01	0.00

2	6	-0.05	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
3	6	0.02	0.02	0.00	0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00
4	6	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.02	0.04	0.00	0.01	0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00
6	6	0.05	-0.02	-0.09	0.08	-0.02	-0.10	-0.05	0.00	0.01
7	6	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
8	1	-0.08	-0.04	0.00	-0.08	-0.04	0.00	0.02	0.02	0.00
9	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.02	-0.02	0.00	0.03	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00
12	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
13	8	0.01	0.01	0.05	0.01	0.01	0.05	0.01	0.00	0.00
14	8	-0.04	0.00	-0.01	-0.05	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.01
15	1	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
16	1	0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.09	0.04	0.00	-0.09	0.04	0.00	0.03	-0.01	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	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.03	-0.02	-0.03	-0.03	-0.02	-0.03	0.01	0.01	0.02
23	7	0.17	0.01	0.08	-0.09	0.00	-0.02	0.08	0.01	0.09
24	1	-0.30	-0.09	-0.58	0.02	0.02	0.16	-0.39	-0.08	-0.54
25	7	0.00	-0.01	-0.04	-0.01	0.00	-0.02	-0.16	0.00	0.02
26	1	-0.03	0.08	0.58	-0.07	0.12	0.87	0.07	-0.05	-0.32
27	6	-0.09	0.00	-0.01	0.09	0.00	0.03	0.21	0.00	-0.03
28	1	0.10	0.00	0.01	-0.19	0.00	0.00	-0.38	-0.02	-0.12
29	6	0.08	0.01	0.04	-0.08	0.00	0.00	-0.10	0.02	0.13
30	1	0.07	-0.02	-0.14	-0.09	0.01	0.06	-0.16	-0.03	-0.20
31	6	-0.18	0.00	-0.03	0.14	0.00	-0.03	0.08	-0.02	-0.14
32	1	0.16	-0.02	-0.14	-0.21	0.01	0.08	-0.28	-0.01	-0.07
33	1	-0.02	0.04	-0.03	-0.03	0.04	-0.03	0.01	-0.02	0.02

76

77

78

A

A

A

Frequencies --	1660.3035	1666.4214	1669.8032
Red. masses --	7.4933	1.7771	1.9525
Frc consts --	12.1702	2.9076	3.2075
IR Inten --	63.8524	91.0739	63.0408
Raman Activ --	35.7473	13.9560	9.9870
Depolar (P) --	0.7492	0.6968	0.7163
Depolar (U) --	0.8566	0.8213	0.8347

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.26	0.02	-0.10	0.02	0.00	-0.12	0.02	0.00
2	6	0.00	-0.35	-0.03	0.06	-0.01	0.00	0.08	-0.01	0.00
3	6	-0.14	-0.26	-0.02	0.11	0.04	0.00	0.12	0.04	0.00
4	6	0.00	-0.06	0.00	-0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
5	6	0.08	0.27	0.02	-0.10	-0.01	0.00	-0.11	-0.01	0.00
6	6	0.00	0.04	-0.02	0.01	0.01	0.02	-0.03	0.00	0.02
7	6	0.00	0.41	0.04	-0.07	0.01	0.00	-0.07	0.02	0.00
8	1	0.34	0.01	0.00	-0.12	-0.11	-0.01	-0.13	-0.12	-0.01
9	8	0.00	0.01	0.00	0.02	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00
10	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.09	-0.22	-0.02	0.12	-0.05	0.00	0.14	-0.05	0.00
12	6	0.02	-0.06	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
13	8	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
14	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
15	1	0.05	-0.45	-0.05	-0.08	-0.01	0.00	-0.08	-0.02	0.00
16	1	-0.03	0.01	0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01
17	1	-0.27	-0.07	-0.01	-0.17	0.10	0.01	-0.19	0.11	0.01
18	8	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	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	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	8	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.05	0.03	-0.01	0.05
22	1	0.02	0.02	0.04	0.25	0.32	0.52	-0.24	-0.32	-0.51
23	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
25	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
26	1	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.01	0.05	0.00	-0.02	-0.08
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	6	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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.02	-0.03	0.02	0.31	-0.46	0.34	-0.30	0.46	-0.34

79

80

81

A

A

A

Frequencies --	1807.2590	1833.8714	1853.2079
----------------	-----------	-----------	-----------

Red. masses --	7.0440	10.1103	10.3695
----------------	--------	---------	---------

Frc consts --	13.5553	20.0332	20.9825
---------------	---------	---------	---------

IR Inten --	259.5250	180.3863	596.2173
-------------	----------	----------	----------

Raman Activ --	25.5500	32.1524	75.6214
----------------	---------	---------	---------

Depolar (P) --	0.2784	0.3705	0.1039
----------------	--------	--------	--------

Depolar (U) --	0.4355	0.5407	0.1882
----------------	--------	--------	--------

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.01	0.00	-0.08	-0.03	0.01	-0.04	-0.02	0.00
2	6	-0.07	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.03	0.01	0.00
3	6	-0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.00
4	6	-0.08	-0.02	0.03	0.60	0.18	-0.24	0.23	0.07	-0.09
5	6	0.02	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.10	0.02	-0.01
6	6	0.30	0.11	0.49	0.05	0.03	0.06	0.06	0.01	0.05
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.00
8	1	0.02	0.02	0.00	0.00	-0.04	0.00	-0.02	-0.02	0.00
9	8	0.05	0.01	-0.02	-0.37	-0.09	0.16	-0.14	-0.04	0.06
10	8	0.01	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.01
11	6	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.00
12	6	-0.03	0.00	-0.01	-0.26	0.03	-0.06	0.66	-0.10	0.15
13	8	-0.18	-0.06	-0.30	-0.03	-0.01	-0.04	-0.03	-0.01	-0.04
14	8	0.01	-0.01	-0.08	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01
15	1	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00
16	1	-0.04	0.02	0.03	0.31	-0.22	-0.21	0.12	-0.08	-0.08
17	1	0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.04	0.00
18	8	0.02	0.00	0.00	0.16	-0.02	0.04	-0.41	0.04	-0.10
19	8	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.06	-0.01	-0.02
20	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.12	-0.10	-0.05	0.31	0.26	0.13
21	8	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.05	-0.07	-0.11	0.03	0.03	0.06	0.02	0.02	0.03
23	7	0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.13	-0.04	-0.24	-0.02	0.01	-0.04	-0.02	-0.01	-0.03
25	7	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	-0.17	0.08	0.59	-0.03	0.05	0.09	-0.02	0.00	0.10
27	6	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	-0.06	0.09	-0.07	0.00	-0.08	0.06	0.01	-0.04	0.02

82

83

84

A

A

A



10	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.02	-0.05	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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	1	0.46	0.02	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	1	0.29	0.58	0.05	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	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	8	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	7	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	0.01
25	7	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	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
27	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.08	0.00	0.01	0.04
28	1	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.13	0.86	0.05	-0.06	-0.40
29	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.01	-0.05	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.44	-0.01	-0.05	0.56	-0.01	-0.05
31	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01	0.06
32	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.02	-0.15	-0.21	-0.10	-0.67
33	1	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 --	3298.5533	3507.5915	3842.8696
Red. masses --	1.1085	1.0863	1.0647
Frc consts --	7.1058	7.8744	9.2635
IR Inten --	0.0069	813.7683	128.5563
Raman Activ --	173.9057	159.2094	123.4045
Depolar (P) --	0.1205	0.2382	0.2482
Depolar (U) --	0.2151	0.3847	0.3977

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	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.05	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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	8	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	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.48	0.87	-0.05
17	1	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	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00
21	8	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	-0.01	0.00
23	7	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
24	1	0.01	0.00	-0.01	0.80	-0.09	-0.58	0.00	0.00	0.00
25	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	0.01	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

27	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.02	-0.03	-0.22	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	6	-0.07	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.69	-0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	6	-0.02	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	0.19	0.10	0.64	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01
		91			92			93		
		A			A			A		
Frequencies --		3851.3965			3865.3861			3933.6807		
Red. masses --		1.0648			1.0464			1.0801		
Frc consts --		9.3055			9.2117			9.8470		
IR Inten --		117.8240			82.7927			72.6648		
Raman Activ --		130.0299			68.8623			22.8479		
Depolar (P) --		0.2528			0.0790			0.7486		
Depolar (U) --		0.4035			0.1465			0.8562		
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	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	8	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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	8	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	1	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00
17	1	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	0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.58	0.81	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
21	8	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.04	0.00	0.07	0.02
22	1	0.00	0.01	0.00	-0.27	0.64	-0.22	0.27	-0.58	0.24
23	7	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	7	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	0.01	0.00	0.00	-0.01	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	6	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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	-0.01	0.00	-0.16	-0.49	-0.45	-0.19	-0.49	-0.50

# PYRHEMx2H2O

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 --	15.4329		26.9787		40.1672

Red. masses --	6.5240	6.5273	6.9554
Frc consts --	0.0009	0.0028	0.0066
IR Inten --	1.1870	1.1282	1.2141
Raman Activ --	1.4175	0.8241	1.5354
Depolar (P) --	0.7483	0.7482	0.7346
Depolar (U) --	0.8560	0.8560	0.8470

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	-0.17	0.10	0.00	-0.03	-0.05	0.14	0.05	-0.01	-0.02
2	1	-0.12	0.10	-0.02	-0.16	-0.08	0.17	-0.03	0.01	0.04
3	1	-0.19	0.15	-0.02	0.07	-0.08	0.23	0.07	-0.12	0.01
4	6	-0.04	0.02	0.02	0.03	0.01	-0.07	0.01	0.02	0.03
5	6	0.01	0.04	-0.01	0.03	0.02	-0.03	0.01	0.02	0.05
6	6	-0.04	-0.03	0.05	0.03	0.02	-0.08	0.01	0.01	0.01
7	6	-0.09	0.05	0.01	0.03	0.01	-0.07	0.01	0.01	0.00
8	6	0.06	0.01	0.00	0.02	0.03	0.03	0.01	0.02	0.01
9	6	0.01	0.09	-0.05	0.03	0.02	-0.03	0.01	0.00	0.06
10	6	0.01	-0.06	0.06	0.03	0.03	-0.03	0.01	0.01	-0.01
11	1	-0.08	-0.04	0.07	0.03	0.01	-0.11	0.01	0.01	0.01
12	8	-0.09	0.10	-0.01	0.06	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.03
13	8	-0.12	0.03	0.04	0.00	0.01	-0.16	0.02	0.02	0.01
14	6	0.06	-0.04	0.03	0.02	0.04	0.02	0.01	0.00	-0.02
15	6	0.11	0.03	-0.03	0.02	0.05	0.07	0.01	0.02	0.02
16	8	0.01	0.11	-0.06	0.02	0.05	-0.05	-0.01	-0.11	0.11
17	8	0.02	0.09	-0.06	0.03	-0.02	-0.02	0.03	0.09	0.00
18	1	0.01	-0.10	0.09	0.03	0.03	-0.04	0.01	0.00	-0.03
19	1	-0.14	0.05	0.03	0.00	0.01	-0.08	0.02	0.01	-0.01
20	1	0.09	-0.06	0.04	0.02	0.05	0.07	0.02	0.00	-0.05
21	8	0.13	0.07	-0.06	0.06	0.05	-0.04	-0.08	0.05	0.28
22	8	0.15	0.01	-0.03	-0.03	0.05	0.26	0.13	-0.01	-0.32
23	1	0.18	0.02	-0.05	-0.02	0.07	0.27	0.11	-0.02	-0.29
24	8	-0.02	0.10	-0.05	-0.36	-0.14	0.18	-0.22	0.00	0.11
25	1	0.01	0.10	-0.07	-0.21	-0.13	0.16	-0.14	0.00	0.12
26	7	0.00	-0.09	0.01	0.02	0.01	-0.06	-0.01	-0.12	0.02
27	1	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.04	-0.06	-0.03	-0.18	0.08
28	7	0.01	-0.05	-0.01	0.03	-0.02	-0.05	0.03	0.07	-0.07
29	1	0.02	0.07	-0.05	0.03	0.00	-0.03	0.03	0.10	-0.03
30	6	0.02	-0.18	0.05	0.04	-0.06	-0.04	0.04	0.13	-0.14
31	1	0.02	-0.18	0.04	0.05	-0.09	-0.03	0.08	0.27	-0.22
32	6	0.00	-0.31	0.10	0.03	-0.07	-0.05	0.01	-0.02	-0.10
33	1	0.00	-0.43	0.15	0.03	-0.10	-0.05	0.01	-0.01	-0.14
34	6	0.00	-0.24	0.08	0.01	-0.02	-0.06	-0.03	-0.18	0.00
35	1	-0.01	-0.30	0.10	0.00	-0.01	-0.07	-0.06	-0.32	0.06
36	1	0.02	0.07	-0.04	-0.45	-0.19	0.13	-0.33	0.01	0.07

		4		5		6	
		A		A		A	
Frequencies --	43.2738		55.0453		63.7116		
Red. masses --	5.7647		5.4946		5.4305		
Frc consts --	0.0064		0.0098		0.0130		
IR Inten --	1.4757		2.8424		2.6869		
Raman Activ --	2.4327		1.5344		1.8011		
Depolar (P) --	0.7394		0.7446		0.7216		
Depolar (U) --	0.8502		0.8536		0.8383		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.14	-0.07	-0.18	0.12	-0.08	0.05	0.21	-0.12	-0.10
2	1	0.05	-0.04	-0.11	0.12	-0.08	0.06	0.16	-0.07	-0.04
3	1	0.13	-0.25	-0.18	0.06	-0.18	0.00	0.11	-0.39	-0.18
4	6	0.00	0.01	0.06	-0.02	-0.01	-0.03	-0.04	0.00	-0.01
5	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.06	-0.02	0.02	-0.01
6	6	0.00	0.04	0.21	-0.02	-0.01	-0.02	-0.04	-0.04	-0.06
7	6	0.00	-0.01	-0.03	-0.03	0.00	0.00	-0.05	0.01	0.01

8	6	0.00	0.01	0.03	0.00	-0.01	-0.04	0.01	0.00	-0.01
9	6	0.00	0.00	-0.05	-0.01	0.01	-0.08	-0.02	0.04	-0.01
10	6	0.00	0.05	0.28	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	-0.06	-0.10
11	1	0.01	0.05	0.26	-0.03	-0.01	0.00	-0.06	-0.05	-0.07
12	8	-0.02	-0.04	-0.08	-0.07	0.02	-0.13	-0.09	0.01	-0.12
13	8	0.03	0.02	-0.05	0.02	-0.01	0.18	0.01	0.00	0.19
14	6	0.00	0.03	0.17	0.00	-0.01	-0.02	0.01	-0.04	-0.06
15	6	0.01	-0.03	-0.10	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.04	0.06
16	8	0.01	0.03	-0.05	0.00	0.00	-0.06	-0.02	0.04	-0.01
17	8	-0.01	-0.01	-0.03	-0.02	0.06	-0.09	-0.01	0.06	-0.03
18	1	0.00	0.08	0.40	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.09	-0.14
19	1	0.05	0.00	-0.11	0.03	-0.02	0.16	0.04	-0.02	0.13
20	1	0.00	0.04	0.20	0.00	-0.01	0.00	0.03	-0.06	-0.08
21	8	0.04	-0.07	-0.17	0.04	0.01	-0.10	0.02	0.11	0.14
22	8	-0.01	0.00	-0.13	-0.03	0.00	0.15	0.11	0.00	0.03
23	1	-0.01	-0.03	-0.22	-0.02	0.02	0.16	0.13	0.03	0.08
24	8	-0.19	-0.05	-0.01	0.08	-0.08	0.07	0.00	-0.04	0.07
25	1	-0.12	-0.07	0.03	-0.01	-0.07	0.05	-0.03	-0.05	0.09
26	7	0.02	0.05	0.02	0.01	-0.09	0.05	-0.03	0.15	-0.08
27	1	0.04	0.06	-0.01	0.02	-0.16	0.06	-0.02	0.21	-0.12
28	7	-0.02	0.02	0.03	-0.03	0.17	-0.08	-0.04	-0.04	0.01
29	1	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.12	-0.11	-0.01	0.02	-0.01
30	6	-0.03	0.00	0.08	-0.05	0.25	-0.07	-0.04	-0.18	0.09
31	1	-0.06	-0.02	0.10	-0.08	0.45	-0.16	-0.05	-0.33	0.16
32	6	0.00	0.02	0.11	-0.02	0.03	0.07	-0.04	-0.07	0.04
33	1	0.00	0.01	0.15	-0.02	0.04	0.11	-0.04	-0.13	0.08
34	6	0.03	0.05	0.07	0.02	-0.19	0.15	-0.03	0.14	-0.07
35	1	0.07	0.07	0.07	0.05	-0.39	0.26	-0.02	0.27	-0.13
36	1	-0.28	-0.01	-0.04	-0.02	-0.05	0.03	-0.13	0.02	0.03

7

8

9

A

A

A

Frequencies --	73.8558	89.5653	91.5869
Red. masses --	6.6719	6.3756	5.9916
Frc consts --	0.0214	0.0301	0.0296
IR Inten --	5.5975	2.1294	0.9515
Raman Activ --	0.8225	1.6054	1.3695
Depolar (P) --	0.7380	0.7417	0.7417
Depolar (U) --	0.8492	0.8517	0.8517

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	-0.09	-0.05	0.26	-0.07	0.18	0.02	-0.07	0.08	0.04
2	1	-0.05	-0.15	0.15	0.01	0.14	-0.05	-0.02	0.07	0.00
3	1	0.00	0.25	0.32	-0.11	0.30	-0.03	-0.04	0.22	0.06
4	6	-0.01	0.01	-0.08	0.04	0.00	0.01	0.04	-0.04	0.01
5	6	-0.01	0.01	-0.07	0.02	-0.02	-0.04	0.01	-0.05	0.01
6	6	-0.01	0.02	0.03	0.04	0.02	0.03	0.04	0.00	0.01
7	6	-0.01	0.00	-0.15	0.02	0.02	0.03	0.04	-0.04	0.01
8	6	0.00	0.03	0.03	0.00	-0.01	-0.04	-0.03	-0.03	0.01
9	6	-0.01	-0.02	-0.10	0.02	-0.05	-0.05	0.01	-0.05	0.00
10	6	-0.01	0.04	0.15	0.02	0.03	0.00	0.00	0.02	0.01
11	1	-0.01	0.02	0.03	0.05	0.04	0.07	0.07	0.02	0.01
12	8	-0.03	-0.01	-0.18	-0.05	0.07	-0.17	0.03	-0.03	-0.05
13	8	0.00	0.00	-0.14	0.05	-0.02	0.29	0.06	-0.05	0.07
14	6	0.00	0.04	0.14	0.00	0.02	-0.02	-0.03	0.01	0.00
15	6	0.01	0.05	0.06	-0.04	-0.01	0.01	-0.08	-0.06	0.03
16	8	-0.02	-0.09	-0.07	0.02	-0.13	-0.01	0.01	-0.07	0.02
17	8	0.00	0.02	-0.13	0.03	0.02	-0.09	0.02	0.02	-0.03
18	1	0.00	0.06	0.25	0.02	0.05	0.01	0.01	0.05	0.00
19	1	0.01	-0.01	-0.06	0.02	0.02	0.20	0.04	-0.03	0.04
20	1	0.00	0.06	0.23	-0.01	0.03	-0.02	-0.05	0.02	0.00
21	8	-0.04	0.08	0.19	-0.05	-0.03	0.03	-0.10	-0.10	0.07

22	8	0.08	0.02	-0.09	-0.07	0.01	0.06	-0.12	-0.03	-0.01
23	1	0.08	0.03	-0.05	-0.10	0.00	0.11	-0.16	-0.05	0.01
24	8	0.16	-0.16	-0.02	-0.19	0.04	-0.13	-0.04	0.05	-0.03
25	1	0.06	-0.13	-0.08	-0.05	0.04	-0.14	-0.01	0.05	-0.04
26	7	0.03	0.01	-0.02	0.08	-0.13	0.03	0.07	0.28	-0.16
27	1	0.06	-0.01	-0.07	0.11	-0.18	0.01	0.08	0.32	-0.19
28	7	-0.05	-0.05	0.00	0.03	-0.20	0.06	0.05	0.27	-0.15
29	1	0.00	-0.03	-0.10	0.02	-0.07	-0.04	0.02	0.12	-0.09
30	6	-0.08	-0.02	0.07	0.02	-0.05	0.03	0.03	-0.02	0.02
31	1	-0.15	-0.06	0.10	-0.02	-0.07	0.05	0.01	-0.08	0.05
32	6	-0.02	0.06	0.10	0.06	0.13	-0.02	0.05	-0.22	0.13
33	1	-0.02	0.10	0.15	0.06	0.28	-0.04	0.04	-0.47	0.28
34	6	0.06	0.07	0.03	0.10	0.07	-0.02	0.07	-0.02	0.02
35	1	0.13	0.13	0.03	0.15	0.16	-0.05	0.09	-0.07	0.05
36	1	0.21	-0.20	0.00	-0.39	0.01	-0.22	-0.10	0.04	-0.06

10

11

12

A

A

A

Frequencies --	117.0127	120.1911	131.3333
Red. masses --	6.2585	6.9908	5.5673
Frc consts --	0.0505	0.0595	0.0566
IR Inten --	7.9666	5.3090	1.7898
Raman Activ --	0.4540	0.1995	0.1267
Depolar (P) --	0.7494	0.7457	0.5928
Depolar (U) --	0.8567	0.8543	0.7443

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.02	-0.07	-0.10	0.06	0.15	0.04	-0.01	0.04	-0.07
2	1	-0.02	-0.08	-0.10	0.10	0.03	-0.08	-0.04	0.17	0.06
3	1	-0.08	-0.29	-0.18	0.08	0.37	0.05	0.00	-0.13	-0.04
4	6	-0.04	0.03	0.04	0.06	0.00	0.02	0.03	-0.02	-0.02
5	6	-0.02	0.02	-0.01	0.03	-0.02	-0.01	0.02	-0.03	-0.03
6	6	-0.04	0.02	0.04	0.06	0.01	0.01	0.03	-0.01	0.01
7	6	-0.06	0.05	0.12	0.11	-0.01	0.07	0.04	-0.01	0.02
8	6	-0.03	0.02	-0.03	0.04	-0.02	-0.01	0.02	-0.02	-0.01
9	6	-0.01	-0.01	-0.05	0.01	-0.03	-0.01	0.01	-0.01	-0.04
10	6	-0.04	0.01	-0.02	0.06	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.02
11	1	-0.04	0.03	0.08	0.06	0.01	0.03	0.03	-0.01	0.02
12	8	0.00	0.07	0.27	0.13	-0.04	0.12	0.07	0.00	0.11
13	8	-0.12	0.04	0.00	0.13	0.00	0.05	0.01	-0.02	-0.04
14	6	-0.03	0.01	-0.05	0.05	-0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.02
15	6	-0.04	0.04	0.04	0.08	0.01	0.02	0.01	-0.02	0.00
16	8	-0.03	0.05	-0.10	-0.01	0.00	-0.05	0.01	-0.06	-0.02
17	8	0.02	-0.12	-0.02	0.00	-0.10	0.01	0.00	0.05	-0.07
18	1	-0.04	0.00	-0.04	0.06	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.05
19	1	-0.12	0.04	0.03	0.13	0.01	0.03	0.00	-0.01	-0.03
20	1	-0.02	0.00	-0.07	0.04	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.04
21	8	-0.07	0.08	0.13	0.08	0.06	0.04	0.00	-0.03	0.01
22	8	0.00	0.02	0.01	0.14	-0.03	0.02	0.00	-0.02	0.02
23	1	-0.01	0.04	0.07	0.17	0.00	0.04	-0.01	-0.02	0.04
24	8	-0.04	-0.16	-0.15	-0.11	-0.10	-0.24	0.04	0.23	0.26
25	1	-0.01	-0.17	-0.13	-0.03	-0.11	-0.22	0.05	0.26	0.19
26	7	0.17	-0.05	-0.08	-0.18	0.03	-0.03	0.03	-0.09	-0.15
27	1	0.23	-0.08	-0.16	-0.17	0.03	-0.05	0.10	-0.14	-0.23
28	7	0.05	-0.02	-0.11	-0.21	0.06	-0.06	-0.14	-0.12	-0.16
29	1	0.01	-0.10	-0.09	0.03	-0.05	-0.01	0.01	0.00	-0.12
30	6	0.00	0.04	-0.01	-0.23	0.05	0.00	-0.22	-0.02	-0.01
31	1	-0.11	0.07	0.00	-0.26	0.07	-0.01	-0.38	-0.02	0.02
32	6	0.10	0.04	0.10	-0.20	0.00	0.05	-0.07	0.07	0.10
33	1	0.09	0.08	0.20	-0.21	-0.03	0.10	-0.08	0.16	0.23
34	6	0.22	-0.02	0.04	-0.17	-0.02	0.03	0.09	0.02	0.00
35	1	0.33	-0.04	0.09	-0.14	-0.05	0.06	0.25	0.05	0.03

36	1	0.24	-0.20	-0.04	-0.09	-0.11	-0.23	-0.19	0.20	0.16
		13			14			15		
		A			A			A		
Frequencies --		153.2835				165.0599			173.8999	
Red. masses --		7.3987				4.9749			5.4792	
Frc consts --		0.1024				0.0799			0.0976	
IR Inten --		8.6795				5.8052			1.5273	
Raman Activ --		0.3733				0.1210			2.5698	
Depolar (P) --		0.5922				0.7179			0.6983	
Depolar (U) --		0.7439				0.8358			0.8223	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	-0.04	0.05	-0.11	-0.14	-0.08	0.06	0.01	0.05
2	1	0.01	-0.14	-0.04	-0.15	-0.06	0.01	0.00	-0.04	0.04
3	1	0.01	0.10	0.05	-0.24	-0.50	-0.17	0.16	0.13	0.15
4	6	0.00	0.03	0.07	0.10	0.02	0.00	-0.02	0.04	0.17
5	6	0.02	0.06	0.20	0.10	0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.01
6	6	0.00	-0.01	-0.08	0.10	0.03	0.00	-0.02	0.04	0.26
7	6	-0.03	0.03	-0.04	0.01	0.08	0.02	-0.03	0.02	0.03
8	6	0.03	0.04	0.15	0.08	0.02	-0.02	0.00	-0.03	-0.16
9	6	0.02	0.07	0.22	0.08	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.02
10	6	0.01	-0.02	-0.10	0.09	0.04	0.00	-0.01	-0.02	0.00
11	1	-0.01	-0.04	-0.21	0.12	0.04	0.02	-0.03	0.07	0.45
12	8	-0.08	0.03	-0.17	0.02	0.21	0.03	-0.04	-0.06	0.00
13	8	-0.03	0.03	-0.03	-0.12	0.00	0.03	-0.01	0.08	-0.15
14	6	0.03	0.01	0.02	0.08	0.04	-0.01	0.00	-0.07	-0.26
15	6	0.02	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.06
16	8	0.02	0.07	0.22	0.06	-0.14	0.04	-0.01	-0.18	0.12
17	8	0.06	0.07	0.20	0.09	0.09	-0.08	0.01	0.15	-0.06
18	1	0.01	-0.06	-0.24	0.09	0.05	0.01	-0.01	-0.03	-0.01
19	1	-0.03	0.03	-0.05	-0.17	0.05	0.08	0.02	0.04	-0.17
20	1	0.03	0.00	-0.03	0.07	0.05	0.00	0.01	-0.12	-0.46
21	8	0.06	-0.10	-0.12	-0.01	-0.12	0.03	0.01	0.07	-0.05
22	8	-0.04	0.05	-0.05	-0.09	0.04	0.00	0.02	-0.03	0.11
23	1	-0.04	-0.01	-0.19	-0.16	0.00	0.03	0.04	0.02	0.21
24	8	0.00	-0.12	-0.12	0.01	-0.09	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03
25	1	-0.01	-0.16	-0.03	-0.02	-0.09	-0.01	-0.05	-0.03	-0.02
26	7	0.07	-0.07	-0.16	-0.10	0.04	0.03	0.01	0.02	-0.02
27	1	0.13	-0.11	-0.22	-0.12	0.03	0.06	0.01	-0.02	0.00
28	7	-0.09	-0.08	-0.18	-0.06	0.02	0.04	0.00	-0.01	-0.01
29	1	0.06	0.02	0.05	0.12	0.07	-0.04	0.00	0.10	-0.05
30	6	-0.16	-0.01	-0.03	-0.05	-0.01	0.02	0.00	-0.02	0.01
31	1	-0.29	0.00	-0.02	-0.02	-0.03	0.03	-0.01	-0.04	0.02
32	6	-0.03	0.03	0.08	-0.08	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01
33	1	-0.04	0.09	0.20	-0.08	-0.04	-0.03	0.00	-0.01	0.02
34	6	0.12	-0.01	-0.01	-0.12	0.02	0.00	0.01	0.02	-0.01
35	1	0.26	0.00	0.03	-0.15	0.03	-0.01	0.02	0.03	-0.01
36	1	0.02	-0.03	-0.09	0.35	-0.14	0.12	0.19	-0.02	0.05
		16			17			18		
		A			A			A		
Frequencies --		188.1315				195.6819			203.0733	
Red. masses --		7.3469				7.3975			1.2346	
Frc consts --		0.1532				0.1669			0.0300	
IR Inten --		1.5941				5.3482			80.6503	
Raman Activ --		0.4845				0.8121			0.5097	
Depolar (P) --		0.7453				0.4645			0.7038	
Depolar (U) --		0.8541				0.6344			0.8262	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	-0.09	-0.03	-0.04	-0.23	-0.14	-0.10	-0.01	-0.04	0.00
2	1	-0.03	-0.04	-0.07	-0.12	-0.05	-0.07	0.08	-0.12	-0.11
3	1	-0.07	0.10	-0.03	-0.31	-0.18	-0.17	-0.04	0.16	-0.04



4	6	0.07	0.00	0.10	0.05	0.01	-0.03	0.00	0.01	0.02
5	6	0.06	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.06	0.00	0.01	0.02
6	6	0.07	0.04	0.22	0.05	0.10	0.05	0.00	0.00	0.00
7	6	0.02	0.00	-0.03	0.05	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.01
8	6	0.05	-0.04	-0.13	-0.08	0.03	-0.09	0.01	0.01	0.02
9	6	0.06	0.07	0.00	-0.01	-0.13	0.08	0.00	0.00	0.00
10	6	0.06	0.01	0.03	-0.01	0.14	0.05	0.00	0.00	-0.02
11	1	0.09	0.07	0.39	0.11	0.14	0.12	-0.01	0.00	-0.01
12	8	-0.03	0.01	-0.19	0.03	0.02	-0.09	0.00	0.00	0.04
13	8	0.01	-0.01	-0.04	0.03	-0.05	0.10	-0.02	0.01	-0.02
14	6	0.05	-0.04	-0.20	-0.07	0.08	-0.05	0.01	0.00	0.00
15	6	-0.04	-0.05	0.02	0.01	0.10	-0.07	0.00	0.00	0.00
16	8	0.10	0.34	-0.13	0.05	-0.14	0.13	-0.03	-0.02	-0.01
17	8	0.01	-0.13	0.12	-0.08	-0.20	0.16	0.03	0.02	-0.03
18	1	0.06	0.02	0.05	-0.01	0.22	0.12	0.00	-0.01	-0.04
19	1	-0.01	0.01	-0.08	0.00	-0.01	0.11	-0.01	0.01	-0.02
20	1	0.05	-0.06	-0.36	-0.11	0.10	-0.06	0.01	0.00	-0.01
21	8	-0.11	-0.07	0.20	0.04	0.27	-0.11	0.01	-0.01	-0.01
22	8	-0.08	-0.03	0.03	0.14	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.00
23	1	-0.17	-0.03	0.19	0.25	0.08	0.04	-0.01	0.00	-0.02
24	8	0.05	-0.01	0.07	0.05	-0.01	0.07	0.06	-0.02	0.00
25	1	0.07	-0.02	0.10	0.06	-0.01	0.06	0.13	0.02	-0.09
26	7	-0.03	-0.05	0.01	0.02	0.02	-0.05	0.00	0.01	0.01
27	1	-0.04	0.02	-0.02	0.02	-0.01	-0.04	-0.01	0.01	0.02
28	7	-0.04	-0.02	-0.01	0.00	0.03	-0.05	0.01	0.01	0.01
29	1	0.03	-0.07	0.09	-0.09	-0.16	0.14	0.03	0.00	-0.02
30	6	-0.04	0.02	-0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.01
31	1	-0.04	0.04	-0.03	-0.03	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.01
32	6	-0.04	0.02	-0.02	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
33	1	-0.04	0.04	-0.02	0.00	-0.05	0.04	0.00	-0.01	-0.01
34	6	-0.03	-0.02	0.00	0.02	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00
35	1	-0.03	-0.03	0.01	0.04	-0.04	0.01	-0.02	0.00	0.00
36	1	-0.29	0.07	-0.06	-0.28	0.01	-0.05	-0.87	0.01	-0.37

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies --		216.1443			227.5314			254.3365		
Red. masses --		8.9547			6.0887			6.3695		
Frc consts --		0.2465			0.1857			0.2428		
IR Inten --		11.6216			41.0244			22.8625		
Raman Activ --		0.2233			1.3401			0.2209		
Depolar (P) --		0.6033			0.7467			0.6206		
Depolar (U) --		0.7525			0.8550			0.7659		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	8	0.20	0.34	-0.05	0.14	-0.05	0.11	-0.09	0.24	-0.20
2	1	0.11	0.31	-0.06	0.17	-0.17	-0.01	0.03	0.28	-0.22
3	1	0.16	0.18	-0.07	0.06	0.01	0.03	-0.10	0.36	-0.22
4	6	0.01	0.03	-0.01	-0.03	-0.03	-0.20	-0.03	-0.03	-0.06
5	6	0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.02	-0.22	-0.01	-0.01	-0.05
6	6	0.00	-0.04	-0.01	-0.03	-0.04	-0.02	-0.03	-0.01	-0.03
7	6	-0.10	0.11	-0.06	-0.05	0.03	-0.04	0.02	-0.05	0.01
8	6	0.03	-0.01	0.00	0.04	-0.03	-0.17	-0.01	-0.01	-0.05
9	6	0.00	-0.15	0.02	0.02	0.04	0.02	0.00	0.09	0.01
10	6	0.02	-0.05	0.00	0.00	-0.03	0.16	-0.02	0.00	0.05
11	1	-0.04	-0.06	-0.02	-0.06	-0.04	0.05	-0.02	-0.01	-0.02
12	8	-0.12	0.24	-0.10	0.00	0.09	0.10	0.04	-0.08	0.06
13	8	-0.20	0.10	-0.10	-0.07	0.01	0.00	0.05	-0.05	0.04
14	6	0.03	-0.04	0.01	0.04	-0.03	0.05	-0.01	0.00	0.02
15	6	0.04	-0.02	0.01	0.00	-0.02	-0.05	-0.02	0.00	-0.02
16	8	-0.04	-0.17	0.00	0.23	0.02	0.16	0.09	0.06	0.09
17	8	0.00	-0.32	0.09	-0.16	0.06	0.13	-0.05	0.20	-0.01

18	1	0.02	-0.07	-0.01	0.00	-0.01	0.40	-0.02	0.01	0.12
19	1	-0.25	0.11	-0.18	-0.06	-0.01	0.09	0.01	-0.02	-0.05
20	1	0.05	-0.04	0.02	0.06	-0.02	0.18	-0.01	0.01	0.07
21	8	0.03	-0.05	0.01	-0.04	-0.02	0.05	-0.03	0.02	0.00
22	8	0.02	-0.01	0.01	-0.04	-0.01	0.03	-0.02	-0.01	0.00
23	1	0.01	-0.01	0.02	-0.10	0.00	0.17	-0.02	0.00	0.04
24	8	0.07	-0.09	0.16	-0.01	0.06	-0.12	0.09	-0.34	0.15
25	1	0.10	-0.05	0.10	-0.08	0.05	-0.09	-0.04	-0.30	0.06
26	7	-0.01	0.04	0.00	0.01	-0.01	-0.04	0.00	-0.01	-0.01
27	1	-0.01	0.01	0.02	0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
28	7	0.01	0.05	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	0.00	-0.02	0.00
29	1	0.01	-0.25	0.08	-0.17	0.05	0.17	-0.06	0.17	0.01
30	6	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.02	-0.04	0.00	-0.01	-0.01
31	1	0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.02	-0.04	0.00	-0.02	-0.01
32	6	0.00	-0.03	0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.00	0.00	-0.02
33	1	0.00	-0.06	0.01	0.00	-0.03	-0.02	0.00	0.01	-0.02
34	6	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.00	0.00	-0.02
35	1	-0.03	-0.03	0.02	0.00	-0.02	-0.03	0.00	0.01	-0.02
36	1	-0.18	-0.15	0.05	-0.35	0.18	-0.24	-0.05	-0.39	0.09

22 23 24  
A A A

Frequencies -- 286.4211 297.6712 321.8827  
Red. masses -- 6.3761 1.0819 9.1047  
Frc consts -- 0.3082 0.0565 0.5558  
IR Inten -- 42.5755 70.1604 7.5258  
Raman Activ -- 1.0560 0.3744 2.7218  
Depolar (P) -- 0.7003 0.5035 0.7377  
Depolar (U) -- 0.8237 0.6697 0.8491

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.10	0.05	0.05	0.00	-0.03	-0.01	0.11	0.07	0.05
2	1	-0.04	0.05	0.11	0.21	-0.24	-0.28	0.11	-0.05	-0.06
3	1	0.03	-0.32	0.02	-0.04	0.50	-0.09	0.08	0.16	0.01
4	6	0.12	-0.07	0.04	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.14	0.03
5	6	-0.03	-0.14	0.10	0.00	-0.01	0.00	0.13	-0.05	0.04
6	6	0.12	0.03	-0.02	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.08	0.00
7	6	0.07	-0.02	-0.02	0.01	0.01	0.01	-0.10	-0.16	0.03
8	6	-0.15	-0.11	0.05	-0.01	-0.01	0.01	-0.05	0.07	0.00
9	6	-0.03	-0.03	0.06	-0.01	-0.01	-0.01	0.23	-0.04	0.03
10	6	0.00	0.12	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.08	0.00	0.01
11	1	0.21	0.07	-0.06	0.02	0.01	-0.01	0.11	-0.04	-0.03
12	8	0.06	0.21	-0.03	0.00	0.03	0.01	-0.10	-0.14	0.03
13	8	-0.11	-0.10	-0.06	-0.02	0.00	0.00	-0.19	-0.20	0.00
14	6	-0.14	0.03	0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.05	0.04	0.02
15	6	-0.10	-0.11	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.11	0.14	-0.03
16	8	-0.02	0.12	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.24	0.01	-0.02
17	8	-0.01	0.15	-0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.30	-0.03	-0.04
18	1	0.00	0.25	-0.04	0.01	0.02	-0.02	-0.08	0.04	0.00
19	1	-0.21	-0.03	-0.05	-0.02	0.00	-0.02	-0.27	-0.17	-0.07
20	1	-0.25	0.08	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.01	0.03
21	8	-0.06	0.09	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.26	-0.07
22	8	0.11	-0.27	0.03	0.01	-0.02	0.00	-0.09	0.14	-0.05
23	1	0.30	-0.16	-0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.10	0.12	-0.10
24	8	0.02	0.00	-0.04	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.04	-0.01
25	1	0.04	0.06	-0.17	-0.24	-0.20	0.40	0.06	-0.03	0.14
26	7	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.01
27	1	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.02	0.02
28	7	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00
29	1	-0.01	0.16	-0.05	-0.01	0.03	-0.02	0.35	-0.01	-0.09
30	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.01
31	1	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.01

32	6	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.01	0.01
33	1	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00
34	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.01
35	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.01	0.01
36	1	-0.17	-0.13	-0.13	0.10	0.52	0.12	0.04	0.17	0.04

25

26

27

A

A

A

Frequencies --	375.5475	380.7118	406.1245
Red. masses --	5.9273	4.8319	5.4645
Frc consts --	0.4925	0.4126	0.5310
IR Inten --	32.3658	61.6855	1.3217
Raman Activ --	0.1158	3.3113	2.8732
Depolar (P) --	0.5897	0.1240	0.7457
Depolar (U) --	0.7419	0.2207	0.8543

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.01	0.00	0.00	-0.05	-0.07	-0.05	0.03	0.07	0.05
2	1	-0.05	0.02	0.04	-0.03	-0.03	-0.01	0.02	0.04	0.02
3	1	0.12	0.05	0.10	0.23	0.38	0.18	-0.24	-0.38	-0.18
4	6	0.02	0.01	0.17	-0.04	0.06	0.06	-0.07	0.01	-0.08
5	6	0.01	-0.06	-0.09	0.02	0.02	-0.02	0.00	0.06	-0.03
6	6	0.04	0.08	0.09	-0.05	0.01	-0.12	-0.04	0.22	-0.05
7	6	-0.04	-0.01	0.09	-0.08	0.11	0.06	-0.09	-0.09	-0.02
8	6	-0.02	0.03	0.19	-0.02	-0.02	-0.08	0.06	0.02	-0.05
9	6	0.01	-0.07	-0.16	0.10	0.01	-0.01	0.01	0.08	0.01
10	6	0.00	0.05	-0.23	-0.05	0.03	-0.01	0.00	0.24	0.00
11	1	0.11	0.13	0.14	-0.06	-0.01	-0.25	0.06	0.27	-0.01
12	8	-0.08	-0.06	0.00	-0.10	-0.05	0.00	-0.08	-0.18	0.03
13	8	-0.05	0.02	-0.02	0.08	0.22	0.00	-0.11	-0.10	0.02
14	6	-0.03	0.09	0.07	-0.03	0.06	0.10	0.04	0.21	-0.09
15	6	0.03	0.01	0.11	-0.07	-0.09	-0.05	0.08	-0.07	0.01
16	8	0.28	-0.02	-0.02	0.13	0.00	0.01	-0.06	-0.02	0.02
17	8	-0.25	0.00	-0.04	0.15	-0.04	-0.01	0.07	-0.02	0.02
18	1	0.00	0.02	-0.55	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.19	0.10
19	1	-0.05	0.01	-0.10	0.22	0.12	-0.08	-0.17	-0.07	0.12
20	1	-0.08	0.12	0.08	-0.03	0.08	0.25	-0.04	0.25	-0.11
21	8	0.07	-0.06	0.00	-0.08	-0.01	0.00	0.06	-0.17	0.04
22	8	0.03	0.03	-0.02	0.06	-0.22	0.05	0.10	-0.10	0.04
23	1	0.07	-0.03	-0.25	0.19	-0.09	0.19	0.14	-0.05	0.10
24	8	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.03	0.01	-0.01	-0.02
25	1	-0.12	0.06	-0.12	0.20	0.10	-0.14	-0.06	-0.10	0.18
26	7	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
27	1	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.01
28	7	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	-0.26	0.05	0.10	0.16	-0.07	-0.04	0.08	-0.05	-0.01
30	6	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
31	1	0.01	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
32	6	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	-0.02	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
36	1	-0.03	-0.08	-0.02	0.12	-0.28	0.05	-0.09	0.26	-0.02

28

29

30

A

A

A

Frequencies --	416.9455	446.6578	490.8540
Red. masses --	1.4255	3.8984	1.1546
Frc consts --	0.1460	0.4582	0.1639
IR Inten --	57.4163	15.4117	27.5832
Raman Activ --	0.9269	3.6535	0.6709
Depolar (P) --	0.4062	0.1751	0.5954
Depolar (U) --	0.5777	0.2981	0.7464

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.02	-0.06	-0.04	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.04
2	1	0.09	-0.07	-0.09	-0.22	0.01	0.09	-0.48	0.02	0.18
3	1	0.33	0.63	0.20	0.18	-0.12	0.19	0.51	-0.07	0.48
4	6	0.01	-0.02	-0.03	0.07	0.02	0.22	-0.01	-0.01	-0.04
5	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
6	6	0.02	0.03	0.00	0.09	-0.02	-0.13	-0.01	0.00	0.00
7	6	-0.01	-0.03	0.00	0.01	-0.03	0.12	0.00	0.00	0.00
8	6	0.01	0.00	-0.01	0.07	-0.04	-0.20	-0.01	0.00	0.01
9	6	-0.02	0.01	0.01	-0.05	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
10	6	0.02	0.04	0.01	0.11	0.01	0.00	-0.02	0.01	0.01
11	1	0.04	0.05	0.02	0.10	-0.06	-0.37	-0.01	0.01	0.02
12	8	-0.01	0.02	0.01	-0.05	-0.07	-0.03	0.00	0.03	0.01
13	8	-0.05	-0.07	0.03	-0.06	-0.03	-0.02	0.01	-0.01	0.04
14	6	0.01	0.03	-0.03	0.09	0.04	0.13	-0.01	0.00	-0.03
15	6	0.02	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.02
16	8	-0.04	0.00	0.00	-0.10	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00
17	8	-0.01	0.01	0.01	-0.10	0.02	0.02	0.02	0.00	0.00
18	1	0.02	0.05	0.05	0.11	0.02	-0.02	-0.02	0.01	0.04
19	1	-0.06	-0.06	-0.11	-0.12	0.01	-0.20	-0.01	0.01	-0.26
20	1	-0.01	0.03	-0.05	0.07	0.09	0.35	-0.01	-0.01	-0.05
21	8	0.02	-0.02	0.01	-0.02	0.07	0.03	0.01	-0.01	0.00
22	8	0.01	0.02	0.00	-0.03	0.04	0.00	0.01	0.00	0.00
23	1	-0.02	0.01	0.00	-0.22	0.06	0.39	0.02	0.00	-0.06
24	8	-0.03	0.03	0.03	0.02	-0.01	-0.02	0.03	-0.02	-0.02
25	1	0.21	0.17	-0.27	-0.12	-0.04	0.05	-0.20	-0.09	0.14
26	7	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
28	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	-0.02	-0.02	0.01	-0.11	0.04	0.05	0.03	0.02	-0.01
30	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	1	0.16	-0.44	0.04	-0.08	0.13	-0.03	-0.11	0.27	-0.04

31

32

33

A

A

A

Frequencies -- 547.9792 553.0716 597.1266

Red. masses -- 4.9908 4.3530 3.7970

Frc consts -- 0.8830 0.7845 0.7977

IR Inten -- 2.0101 14.0298 29.3137

Raman Activ -- 0.6730 6.6938 0.6397

Depolar (P) -- 0.4958 0.2227 0.7142

Depolar (U) -- 0.6629 0.3643 0.8332

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01
2	1	-0.10	-0.06	-0.02	0.01	0.07	0.05	0.06	0.01	-0.01
3	1	0.10	0.01	0.08	0.05	0.03	0.04	-0.04	0.02	-0.04
4	6	-0.07	0.08	0.03	0.07	-0.02	-0.13	-0.05	0.06	0.13
5	6	0.01	0.15	-0.08	0.09	0.03	0.01	0.01	0.11	0.20
6	6	-0.13	0.04	0.14	0.13	-0.01	0.01	-0.10	-0.01	-0.15
7	6	0.10	-0.05	-0.05	-0.10	0.03	-0.04	0.05	-0.02	-0.01
8	6	0.09	0.10	0.04	0.10	0.04	0.12	0.03	0.06	0.04
9	6	0.00	0.16	-0.07	0.00	0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.10
10	6	0.00	-0.09	-0.15	0.19	-0.01	0.04	-0.04	0.02	0.20
11	1	-0.23	0.00	0.21	0.11	-0.01	0.08	-0.15	-0.10	-0.54
12	8	0.12	0.06	-0.03	-0.08	-0.12	0.05	0.05	0.03	-0.02
13	8	-0.03	-0.17	0.02	-0.03	0.08	0.03	0.00	-0.07	0.00

14	6	0.14	0.04	0.13	0.17	0.00	-0.06	0.05	0.00	-0.14
15	6	-0.10	-0.01	-0.06	-0.13	-0.02	0.06	-0.02	0.01	-0.03
16	8	-0.02	-0.05	0.04	-0.08	-0.03	-0.04	0.12	-0.04	-0.03
17	8	0.01	-0.04	0.03	-0.08	0.02	0.04	-0.10	-0.04	-0.04
18	1	-0.01	-0.30	-0.38	0.19	-0.03	0.08	-0.05	-0.07	0.23
19	1	-0.18	-0.06	-0.08	0.04	0.03	0.08	-0.07	-0.02	-0.02
20	1	0.24	-0.01	0.21	0.18	-0.03	-0.19	0.11	-0.10	-0.46
21	8	-0.12	0.05	-0.04	-0.10	0.13	-0.06	-0.04	-0.02	0.00
22	8	0.00	-0.15	0.01	-0.06	-0.11	0.02	0.01	-0.03	0.03
23	1	0.13	0.01	0.22	0.27	-0.12	-0.61	0.15	0.01	-0.11
24	8	-0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.01
25	1	0.24	-0.05	0.10	-0.29	0.05	-0.11	-0.23	0.07	-0.12
26	7	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	-0.04	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00
28	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
29	1	0.00	-0.13	0.06	-0.08	0.06	0.10	-0.10	0.01	0.05
30	6	0.00	0.01	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	-0.01
32	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
36	1	0.01	0.02	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	-0.04	0.00

34

35

36

A

A

A

Frequencies --	599.6541	624.2088	628.6379
Red. masses --	1.3125	1.3710	2.9615
Frc consts --	0.2781	0.3147	0.6895
IR Inten --	76.4465	55.1212	4.3421
Raman Activ --	2.0618	1.5890	0.3522
Depolar (P) --	0.6609	0.3636	0.5036
Depolar (U) --	0.7958	0.5333	0.6699

Atom AN

X

Y

Z

X

Y

Z

X

Y

Z

1	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
2	1	0.06	0.08	0.04	-0.15	-0.14	-0.07	0.07	0.07	0.04
3	1	0.01	0.04	0.00	0.03	-0.06	0.04	-0.01	0.03	-0.01
4	6	0.00	-0.02	-0.05	0.01	0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.01
5	6	0.02	0.00	0.05	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01
6	6	0.01	0.00	0.03	0.03	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.01
7	6	-0.03	0.00	-0.05	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.01
8	6	0.01	0.02	0.08	-0.01	0.00	0.07	0.00	0.00	-0.03
9	6	0.02	-0.03	0.01	-0.03	0.01	-0.03	0.02	0.00	0.01
10	6	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.01	0.04	-0.02	0.00	-0.01
11	1	0.02	0.01	0.05	0.02	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.01
12	8	-0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00
13	8	0.01	0.01	0.01	-0.02	0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.01
14	6	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.00	0.01	0.01
15	6	0.00	-0.01	-0.04	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00
16	8	0.01	0.00	-0.02	0.03	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01
17	8	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.01
18	1	0.00	-0.01	-0.06	0.04	0.03	0.04	-0.02	-0.01	-0.02
19	1	0.05	-0.02	0.06	-0.05	0.04	-0.05	0.03	-0.02	0.03
20	1	0.01	-0.01	-0.10	-0.02	-0.04	-0.13	0.00	0.02	0.06
21	8	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.01
22	8	0.02	-0.02	-0.05	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.01	0.01
23	1	-0.30	0.08	0.82	-0.15	0.01	0.30	0.06	0.00	-0.12
24	8	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01
25	1	-0.38	0.08	-0.15	0.77	-0.17	0.33	-0.38	0.08	-0.16
26	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.02	0.00	0.19	-0.09
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.07	0.03

28	7	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.05	0.03
29	1	-0.01	0.06	0.02	-0.05	-0.10	-0.02	0.02	0.02	0.03
30	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.10	0.05
31	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.03	-0.01	-0.29	0.14
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.02	0.00	0.20	-0.10
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.03	0.01	0.30	-0.15
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.02	0.00	-0.21	0.10
35	1	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.12	0.06	-0.01	-0.57	0.28
36	1	-0.01	-0.02	-0.01	0.03	0.06	0.01	-0.01	-0.02	-0.01

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	661.8456	673.0182	698.1152
Red. masses --	4.6323	5.2897	4.8311
Frc consts --	1.1955	1.4117	1.3872
IR Inten --	82.9748	0.3002	45.2418
Raman Activ --	2.3569	0.3728	0.8714
Depolar (P) --	0.1663	0.7346	0.2121
Depolar (U) --	0.2852	0.8470	0.3500

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01
2	1	0.04	0.04	0.02	0.02	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00
3	1	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.06	0.07	0.03
4	6	-0.11	-0.03	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.19	-0.03
5	6	-0.07	-0.06	0.04	0.01	-0.01	0.00	-0.16	0.07	0.00
6	6	-0.13	0.15	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.04	0.08	0.00
7	6	-0.02	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.08	0.12	-0.06
8	6	0.07	-0.17	0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.08	-0.04	0.00
9	6	-0.03	0.01	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.10	-0.02	0.03
10	6	0.06	0.04	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.19	-0.03	0.00
11	1	-0.14	0.14	-0.04	0.02	0.00	0.00	-0.18	-0.03	-0.02
12	8	-0.02	0.09	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.10	-0.16	-0.02
13	8	0.06	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.07
14	6	0.10	0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.07	-0.16	0.05
15	6	0.10	-0.18	0.05	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.02
16	8	0.04	0.01	0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.08	0.06	0.09
17	8	0.04	-0.04	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.08	-0.07	-0.11
18	1	0.05	-0.15	0.01	-0.01	0.02	0.01	0.19	0.05	-0.07
19	1	0.14	-0.08	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.39	0.18	0.07
20	1	-0.03	0.12	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.18	-0.10	0.03
21	8	0.14	0.21	0.03	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
22	8	-0.19	-0.05	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
23	1	-0.60	-0.40	-0.26	-0.02	-0.01	0.00	-0.03	-0.02	-0.05
24	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.01
25	1	-0.08	0.01	-0.02	-0.07	0.01	-0.02	-0.48	0.12	-0.22
26	7	0.00	0.00	0.00	0.01	0.24	-0.12	0.00	0.01	0.00
27	1	-0.01	0.02	0.01	0.00	-0.14	0.06	-0.02	0.00	0.03
28	7	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.34	0.17	0.01	-0.01	0.00
29	1	0.03	-0.03	-0.09	-0.01	-0.13	0.09	0.08	-0.05	-0.25
30	6	0.00	0.00	0.01	0.01	0.28	-0.14	0.00	0.01	0.01
31	1	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.65	-0.32	0.00	0.02	0.00
32	6	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.16	0.08	-0.01	0.00	0.00
33	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.24	0.12	-0.01	-0.01	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00
35	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.00
36	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.05	-0.01

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	730.5715	756.2342	757.1292
Red. masses --	5.4394	2.6835	4.6255
Frc consts --	1.7105	0.9042	1.5622

IR Inten	--	12.9042		66.8115		24.5966				
Raman Activ	--	2.7741		9.7700		5.9212				
Depolar (P)	--	0.0443		0.0269		0.0898				
Depolar (U)	--	0.0849		0.0523		0.1649				
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.01	0.00	-0.01	-0.01
2	1	-0.05	0.01	0.02	0.33	0.52	0.32	0.06	0.15	0.10
3	1	0.06	-0.01	0.05	0.08	0.06	0.07	0.08	0.04	0.07
4	6	-0.04	-0.02	-0.08	0.00	-0.03	0.03	0.08	0.00	0.01
5	6	-0.01	0.01	0.26	-0.06	-0.01	-0.01	0.05	0.04	0.09
6	6	-0.02	0.06	0.10	0.07	0.02	-0.01	0.11	-0.09	0.07
7	6	-0.11	-0.02	-0.23	-0.08	-0.08	0.01	-0.04	0.05	-0.20
8	6	0.04	-0.01	-0.10	-0.03	-0.01	0.02	-0.05	-0.02	-0.03
9	6	-0.05	-0.25	0.09	-0.08	0.15	-0.06	0.08	0.25	-0.15
10	6	0.04	-0.01	-0.08	0.12	0.01	0.02	-0.10	0.03	0.00
11	1	-0.02	0.06	0.04	0.06	0.00	-0.09	0.17	-0.11	-0.21
12	8	-0.01	0.02	0.08	-0.09	0.08	0.03	0.04	-0.05	0.04
13	8	0.04	0.00	0.04	0.07	-0.05	-0.05	-0.05	0.03	0.05
14	6	0.06	0.06	0.11	-0.01	-0.05	0.01	-0.16	-0.02	0.06
15	6	0.06	0.01	-0.25	-0.03	0.05	-0.03	0.12	-0.08	-0.11
16	8	0.07	0.06	-0.02	0.02	0.01	0.10	-0.02	-0.09	-0.03
17	8	-0.06	0.02	-0.09	0.03	-0.07	-0.06	-0.02	-0.01	0.09
18	1	0.04	-0.13	-0.30	0.13	0.06	-0.08	-0.10	0.20	-0.40
19	1	0.16	-0.09	0.12	0.31	-0.24	0.21	-0.03	0.01	0.21
20	1	0.05	0.06	0.06	-0.07	-0.03	-0.08	-0.17	-0.07	-0.17
21	8	-0.07	-0.03	0.07	-0.05	-0.03	-0.01	0.08	0.04	0.07
22	8	0.02	0.05	0.09	0.04	0.04	0.01	-0.08	-0.03	0.03
23	1	0.28	0.07	-0.34	0.16	0.13	0.05	-0.20	-0.21	-0.25
24	8	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.01
25	1	0.38	-0.10	0.18	-0.01	-0.06	0.08	0.06	-0.04	0.05
26	7	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.01	0.12	-0.05	-0.01	-0.06	0.05	0.00	-0.13	0.05
28	7	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.01
29	1	-0.07	0.07	-0.11	0.02	-0.14	-0.14	-0.03	-0.08	0.21
30	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00
31	1	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
33	1	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.06	-0.02
34	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.01
36	1	0.01	0.06	0.01	-0.05	0.13	-0.02	0.00	0.03	0.00

		43		44		45				
		A		A		A				
Frequencies	--	770.3337		789.9819		796.3533				
Red. masses	--	1.1848		1.4306		1.7481				
Frc consts	--	0.4142		0.5260		0.6532				
IR Inten	--	38.8178		335.8789		38.1649				
Raman Activ	--	0.3213		2.1504		1.0217				
Depolar (P)	--	0.6637		0.3045		0.6559				
Depolar (U)	--	0.7978		0.4669		0.7922				
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z			
1	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.02	0.01	0.02	0.01
2	1	0.02	0.03	0.02	0.32	0.54	0.34	-0.18	-0.31	-0.19
3	1	0.01	0.00	0.01	0.14	0.10	0.12	-0.08	-0.06	-0.07
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.02	-0.04
5	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.06	0.00	0.04	0.16
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.02
7	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	-0.01	-0.01	-0.02	0.02
8	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.05	-0.01	-0.02	-0.04
9	6	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.10	-0.07

10	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.02	-0.04	0.02	-0.01	-0.09
11	1	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.03	0.19	0.05	0.08	0.40
12	8	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.00
13	8	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.01	0.00	0.03	-0.01	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.08	-0.01	0.01	0.01
16	8	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.03	-0.02	0.02
17	8	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.02	-0.04	-0.02
18	1	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.03	0.32	0.02	0.15	0.52
19	1	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.04	0.31	0.00	0.03	-0.18
20	1	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.06	0.28	-0.05	0.09	0.43
21	8	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.02	0.00	-0.01	-0.01
22	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	0.01	0.00
23	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.06	-0.03	0.04	0.02	0.02	0.01
24	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.01
25	1	0.00	0.00	0.01	0.16	-0.09	0.15	-0.11	0.06	-0.09
26	7	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.19	-0.10	0.00	0.03	-0.02	0.00	-0.14	0.07
28	7	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
29	1	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.02	0.02	-0.02	-0.04	0.01
30	6	0.00	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
31	1	-0.01	-0.22	0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
32	6	0.00	0.08	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	-0.01	-0.74	0.35	0.00	0.03	-0.01	0.00	-0.04	0.02
34	6	0.00	0.06	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01
35	1	-0.01	-0.40	0.20	0.00	0.02	-0.01	-0.01	-0.05	0.02
36	1	0.00	0.01	0.00	-0.04	0.12	-0.01	0.02	-0.07	0.01

46

47

48

A

A

A

Frequencies --	808.5027	817.0078	832.3006
Red. masses --	5.8145	1.1793	6.0272
Frc consts --	2.2394	0.4638	2.4600
IR Inten --	20.4804	71.6444	13.8389
Raman Activ --	0.4271	0.1264	4.1935
Depolar (P) --	0.7096	0.6618	0.0821
Depolar (U) --	0.8302	0.7965	0.1517

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
2	1	-0.22	-0.31	-0.19	-0.03	-0.05	-0.03	-0.06	-0.10	-0.06
3	1	-0.03	-0.05	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01
4	6	-0.01	0.05	0.20	0.00	0.00	0.01	0.10	-0.07	0.03
5	6	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.06	0.01	-0.02
6	6	0.01	0.03	0.03	0.01	0.00	0.00	0.10	-0.22	0.04
7	6	-0.14	-0.02	-0.36	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.03	-0.05
8	6	-0.01	-0.06	-0.19	-0.01	0.00	-0.01	0.09	0.08	-0.04
9	6	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.03	-0.02	-0.23	0.04	0.05
10	6	0.08	0.01	0.03	0.01	0.00	-0.01	-0.24	0.01	0.01
11	1	-0.05	-0.09	-0.43	0.01	0.00	0.01	0.32	-0.13	-0.03
12	8	0.01	0.02	0.10	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.03	0.00
13	8	0.05	-0.02	0.07	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.04	0.02
14	6	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.09	0.20	-0.03
15	6	-0.14	0.06	0.35	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.03	0.06
16	8	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.11	0.22
17	8	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.13	-0.23
18	1	0.08	-0.03	-0.18	0.01	0.03	0.04	-0.24	0.02	-0.07
19	1	0.10	-0.06	-0.02	0.01	0.00	-0.02	-0.05	0.07	0.00
20	1	-0.03	0.05	0.19	-0.01	0.00	0.04	0.31	0.06	-0.06
21	8	0.02	-0.03	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.04	0.02	-0.01
22	8	0.05	0.01	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.05	-0.02
23	1	-0.04	0.06	0.22	0.00	0.00	0.01	-0.09	-0.09	-0.01



24	8	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01
25	1	0.06	0.01	-0.01	-0.03	0.01	-0.02	-0.15	0.04	-0.07
26	7	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.01
27	1	0.00	-0.18	0.08	0.02	0.83	-0.41	-0.01	0.04	0.02
28	7	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
29	1	0.01	0.03	0.02	0.00	-0.07	0.04	-0.04	-0.18	-0.45
30	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.04	-0.02	0.01	0.01	0.01
31	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.07	0.03	0.01	0.01	0.01
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00
33	1	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.08	-0.04	0.00	0.00	-0.02
34	6	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.08	0.04	-0.01	0.00	0.00
35	1	0.00	-0.06	0.03	0.01	0.29	-0.14	-0.01	0.01	-0.01
36	1	0.03	-0.05	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00

49

50

51

A

A

A

Frequencies --	866.0874	888.3743	911.6112
Red. masses --	3.6798	1.1975	6.5056
Frc consts --	1.6263	0.5568	3.1853
IR Inten --	2.5492	14.3651	5.5548
Raman Activ --	0.8781	0.2935	3.6509
Depolar (P) --	0.7452	0.7301	0.7315
Depolar (U) --	0.8540	0.8440	0.8449

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
2	1	-0.03	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.06	0.04	0.01
3	1	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.03	-0.04
4	6	0.01	0.06	0.21	0.00	0.00	0.00	0.05	0.22	-0.07
5	6	0.00	-0.03	-0.19	0.00	0.01	0.00	0.01	0.30	-0.04
6	6	0.02	-0.03	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.07	0.03
7	6	-0.07	-0.01	-0.19	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.08	0.10
8	6	0.00	0.07	0.20	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.24	-0.09
9	6	-0.01	-0.04	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.08
10	6	0.00	-0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00
11	1	0.03	0.04	0.25	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.17	0.00
12	8	0.01	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.05	0.04
13	8	0.02	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.17	-0.05
14	6	-0.01	-0.02	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.08	0.03
15	6	0.06	-0.03	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.02	0.07
16	8	-0.02	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.03	-0.03
17	8	0.02	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.02
18	1	0.00	0.17	0.74	0.00	0.01	-0.01	0.03	0.36	-0.09
19	1	0.05	-0.05	0.04	0.00	0.00	0.00	0.19	-0.23	-0.26
20	1	-0.01	0.06	0.31	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.18	0.02
21	8	-0.01	0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	0.12	0.01	0.03
22	8	-0.02	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.16	-0.03
23	1	0.01	-0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.26	-0.28	-0.06
24	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.04	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.01	0.02
26	7	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
27	1	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.36	-0.18	0.01	-0.05	0.02
28	7	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
29	1	0.02	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.08	-0.02
30	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.03	0.00	0.00	0.00
31	1	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.42	-0.21	0.01	0.00	-0.01
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.32	-0.15	0.00	-0.03	0.02
34	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.09	-0.05	0.00	-0.01	0.00
35	1	0.00	-0.03	0.02	-0.01	-0.62	0.30	-0.01	0.04	-0.02
36	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00

52

53

54

	A			A			A			
Frequencies --	923.1983			940.8096			959.6346			
Red. masses --	1.3430			6.3520			3.0356			
Frc consts --	0.6744			3.3126			1.6470			
IR Inten --	8.2741			3.2581			38.6616			
Raman Activ --	0.1079			5.3334			2.2040			
Depolar (P) --	0.5557			0.7455			0.3234			
Depolar (U) --	0.7144			0.8542			0.4887			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	1	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	-0.01
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	0.00	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	-0.01	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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	8	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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01
17	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.02	0.02	0.00	-0.01
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
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	0.01
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	8	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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	7	0.00	0.01	-0.01	0.19	0.00	0.00	0.15	0.07	0.14
27	1	0.00	0.00	0.00	0.05	0.10	0.20	0.32	-0.03	-0.05
28	7	0.00	0.01	-0.01	0.15	0.02	0.04	-0.19	0.06	0.12
29	1	0.00	0.04	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.02
30	6	0.00	-0.12	0.06	-0.02	0.14	0.29	-0.11	-0.07	-0.14
31	1	0.01	0.74	-0.36	0.14	0.13	0.28	0.27	-0.08	-0.20
32	6	0.00	0.09	-0.04	-0.42	-0.01	-0.03	0.02	-0.03	-0.06
33	1	-0.01	-0.39	0.17	-0.44	0.03	0.03	-0.03	0.23	0.54
34	6	0.00	-0.05	0.02	0.07	-0.16	-0.33	0.10	-0.05	-0.10
35	1	0.01	0.28	-0.13	0.24	-0.15	-0.29	-0.44	-0.10	-0.25
36	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	55 A			56 A			57 A			
Frequencies --	984.6249			1024.9010			1044.5780			
Red. masses --	1.3972			1.3520			1.0813			
Frc consts --	0.7981			0.8367			0.6951			
IR Inten --	0.2426			3.0796			100.9580			
Raman Activ --	0.0845			0.1433			1.3168			
Depolar (P) --	0.6363			0.3085			0.7298			
Depolar (U) --	0.7777			0.4715			0.8438			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.02
2	1	0.01	0.01	0.00	0.02	0.02	0.01	-0.29	-0.27	-0.15
3	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.15	0.02	0.12
4	6	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.01
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00

6	6	0.00	0.01	0.11	0.00	0.01	0.10	0.00	0.00	0.00
7	6	0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.02	0.03
8	6	0.00	0.01	0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
10	6	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.02	-0.12	0.00	0.00	0.00
11	1	-0.05	-0.15	-0.63	-0.05	-0.13	-0.57	0.01	0.00	-0.04
12	8	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.04
14	6	0.00	-0.02	-0.13	0.00	0.02	0.07	0.00	-0.01	0.00
15	6	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.01	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	-0.01	-0.09	0.01	0.14	0.64	0.00	0.02	0.03
19	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.05	0.12	-0.11	0.86
20	1	-0.03	0.18	0.71	0.01	-0.09	-0.43	0.02	-0.02	-0.01
21	8	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
23	1	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
24	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	-0.03
26	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	7	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	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.01
30	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	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	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00

58

59

60

A

A

A

Frequencies --	1056.2368	1069.4986	1079.2017
Red. masses --	1.0841	1.3967	1.5100
Frc consts --	0.7126	0.9412	1.0362
IR Inten --	79.8786	12.1252	101.9325
Raman Activ --	0.3958	2.7375	1.6672
Depolar (P) --	0.5790	0.5858	0.7481
Depolar (U) --	0.7334	0.7388	0.8559

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
3	1	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	0.01	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	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	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.01
12	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	8	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	0.01	0.01	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	8	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
17	8	-0.01	-0.04	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01

20	1	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
24	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.08	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	7	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.02	-0.05	0.01	0.02	0.04
27	1	0.01	0.04	-0.03	-0.20	0.04	0.07	-0.04	0.05	0.10
28	7	0.00	-0.03	0.01	0.05	0.00	0.01	0.09	-0.05	-0.11
29	1	0.05	0.85	-0.50	0.01	0.04	0.02	0.00	-0.03	0.01
30	6	0.00	0.01	0.00	0.07	-0.03	-0.07	0.01	0.01	0.03
31	1	-0.01	-0.03	0.02	0.45	-0.07	-0.12	-0.38	0.05	0.08
32	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.04	0.07	0.05	0.03	0.06
33	1	0.00	0.02	-0.02	-0.11	0.34	0.72	0.03	0.17	0.37
34	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.07	-0.02	-0.04
35	1	-0.03	0.01	-0.01	0.21	0.02	0.04	-0.75	-0.09	-0.21
36	1	-0.01	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

61

62

63

A

A

A

Frequencies -- 1096.7671 1154.7690 1172.8348

Red. masses -- 3.5516 3.7316 2.6700

Frc consts -- 2.5171 2.9318 2.1639

IR Inten -- 29.6736 64.9008 76.8147

Raman Activ -- 26.0289 1.9865 9.6927

Depolar (P) -- 0.0707 0.0378 0.2282

Depolar (U) -- 0.1320 0.0728 0.3716

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	0.02	0.02	0.01	0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00
3	1	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01
4	6	0.04	-0.08	0.01	-0.09	-0.16	0.04	0.04	0.05	-0.01
5	6	0.20	-0.01	-0.01	0.14	-0.04	0.00	0.19	0.03	-0.02
6	6	-0.05	0.25	-0.03	-0.09	-0.06	0.00	-0.08	-0.01	0.00
7	6	0.00	-0.03	-0.02	0.02	-0.06	-0.01	-0.01	0.02	0.01
8	6	0.05	0.07	-0.01	-0.08	0.15	-0.04	0.05	-0.07	0.03
9	6	0.02	0.02	0.04	0.05	0.03	0.04	0.06	0.02	0.06
10	6	-0.09	0.00	-0.01	0.20	-0.01	0.00	0.01	0.05	-0.01
11	1	0.39	0.48	-0.18	-0.51	-0.27	0.10	-0.58	-0.25	0.11
12	8	0.01	0.00	0.00	0.06	0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.00
13	8	-0.02	0.04	0.01	-0.04	0.08	0.02	0.01	-0.03	-0.01
14	6	-0.07	-0.24	0.04	-0.09	0.08	-0.01	-0.05	-0.04	0.01
15	6	0.01	0.06	0.01	0.05	0.13	-0.01	-0.05	-0.14	0.00
16	8	-0.04	0.03	0.05	-0.03	0.02	0.03	-0.04	0.02	0.04
17	8	-0.05	-0.03	-0.07	-0.05	-0.03	-0.06	-0.06	-0.04	-0.08
18	1	-0.11	-0.03	0.04	0.22	-0.06	0.01	0.02	0.43	-0.10
19	1	0.00	0.02	-0.07	0.00	0.04	-0.03	0.01	-0.03	0.04
20	1	0.28	-0.46	0.12	-0.46	0.31	-0.11	-0.26	0.08	-0.02
21	8	0.01	0.00	0.00	0.08	-0.02	0.03	-0.06	0.01	-0.02
22	8	-0.04	-0.04	-0.01	-0.09	-0.11	-0.02	0.10	0.10	0.03
23	1	0.06	0.03	0.02	0.17	0.09	0.06	-0.27	-0.18	-0.08
24	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.02	0.00	0.01	0.02	0.00	0.01	0.03	0.00	0.01
26	7	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00
27	1	-0.01	0.00	0.01	0.02	-0.02	-0.04	-0.11	0.05	0.10
28	7	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02
29	1	-0.05	-0.06	-0.04	-0.03	-0.03	0.00	-0.04	0.03	-0.01
30	6	0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.01
31	1	-0.04	0.01	0.02	0.04	0.00	0.01	-0.18	0.02	0.04
32	6	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.01	-0.01
33	1	0.01	0.02	0.05	0.00	0.00	0.00	0.04	0.02	0.05

34	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.03	-0.02	-0.04		
35	1	-0.11	-0.01	-0.03	-0.08	-0.01	-0.02	0.09	-0.01	-0.03		
36	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00		
		64			65			66				
		A			A			A				
Frequencies --		1177.9496				1193.9519			1217.3571			
Red. masses --		1.7934				1.4350			3.9718			
Frc consts --		1.4661				1.2053			3.4680			
IR Inten --		58.3831				11.9914			52.6600			
Raman Activ --		10.3177				8.0188			42.0062			
Depolar (P) --		0.1254				0.4952			0.0595			
Depolar (U) --		0.2228				0.6624			0.1123			
Atom AN		X	Y	Z		X	Y	Z		X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00
2	1	0.00	0.00	0.00		0.01	0.01	0.01		0.00	0.00	0.00
3	1	0.00	0.00	0.00		-0.01	0.00	-0.01		0.00	0.00	0.00
4	6	0.01	0.01	0.00		-0.07	-0.07	0.02		0.00	-0.02	0.00
5	6	0.03	0.01	0.00		-0.06	0.01	0.00		0.03	0.00	0.00
6	6	-0.01	0.00	0.00		-0.02	-0.04	0.01		-0.01	0.01	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00		0.01	-0.05	0.00		0.00	-0.01	0.00
8	6	0.01	-0.02	0.01		0.02	0.01	0.00		-0.02	0.03	-0.01
9	6	0.01	0.00	0.01		-0.02	-0.02	-0.01		-0.01	0.00	-0.01
10	6	-0.01	0.01	0.00		0.01	0.08	-0.01		0.02	-0.01	0.00
11	1	-0.11	-0.05	0.02		-0.10	-0.09	0.03		-0.02	0.00	0.00
12	8	0.00	0.00	0.00		0.03	0.01	-0.01		0.01	0.00	0.00
13	8	0.00	-0.01	0.00		-0.02	0.05	0.01		0.00	0.01	0.00
14	6	0.00	-0.01	0.00		0.05	-0.04	0.01		-0.01	0.00	0.00
15	6	-0.01	-0.03	0.00		0.00	0.02	0.00		0.00	-0.02	0.00
16	8	-0.01	0.00	0.00		0.01	0.00	-0.01		0.00	0.00	0.00
17	8	-0.01	0.00	0.00		0.02	0.01	0.02		0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.11	-0.03		0.04	0.83	-0.17		0.02	-0.07	0.01
19	1	0.00	-0.01	0.00		0.02	0.01	-0.03		0.00	0.00	0.00
20	1	-0.03	0.00	0.00		0.40	-0.25	0.07		-0.03	0.01	0.00
21	8	-0.02	0.00	-0.01		0.00	0.00	0.00		-0.01	0.00	0.00
22	8	0.02	0.02	0.01		-0.01	-0.01	0.00		0.02	0.01	0.01
23	1	-0.06	-0.04	-0.02		0.03	0.02	0.00		-0.11	-0.09	-0.03
24	8	0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00
25	1	-0.01	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00
26	7	0.11	-0.02	-0.03		0.00	0.00	0.01		0.07	0.12	0.25
27	1	0.34	-0.16	-0.32		-0.01	0.00	0.01		0.00	0.19	0.39
28	7	-0.02	-0.03	-0.07		0.00	0.00	0.00		0.14	-0.08	-0.16
29	1	-0.01	-0.05	-0.05		0.01	0.00	0.01		-0.03	0.00	-0.02
30	6	0.08	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00		-0.06	-0.10	-0.21
31	1	0.64	-0.05	-0.08		-0.02	0.00	0.00		-0.29	-0.10	-0.21
32	6	-0.11	0.03	0.06		0.00	0.00	0.00		-0.18	-0.02	-0.04
33	1	-0.10	-0.10	-0.21		0.00	0.00	0.01		-0.22	-0.02	-0.05
34	6	-0.10	0.05	0.10		0.00	0.00	0.00		0.00	0.06	0.11
35	1	-0.41	0.02	0.04		0.02	0.00	0.01		0.51	0.12	0.27
36	1	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 --		1224.4365				1256.0356				1315.4040		
Red. masses --		2.0248				1.7520				3.0264		
Frc consts --		1.7886				1.6285				3.0852		
IR Inten --		327.0681				0.9941				269.0708		
Raman Activ --		14.4206				0.9147				6.1299		
Depolar (P) --		0.2462				0.7474				0.3163		
Depolar (U) --		0.3952				0.8554				0.4806		
Atom AN		X	Y	Z		X	Y	Z		X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00		0.00	-0.01	0.00

2	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	0.04	0.02
3	1	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03	0.03
4	6	0.05	0.08	-0.02	-0.14	-0.02	0.01	-0.18	-0.02	0.00
5	6	0.02	-0.05	0.01	0.00	0.11	-0.02	0.02	-0.15	0.03
6	6	-0.01	0.01	0.00	0.03	-0.06	0.01	0.05	0.02	0.00
7	6	-0.01	0.07	0.00	0.01	-0.04	0.01	0.00	0.22	0.00
8	6	0.10	-0.13	0.03	0.13	-0.03	0.01	0.06	0.08	-0.02
9	6	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.03	0.02	0.01	0.02	0.01
10	6	-0.07	0.02	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.05	-0.07	0.01
11	1	-0.27	-0.12	0.04	0.60	0.22	-0.08	0.16	0.06	-0.04
12	8	-0.04	-0.01	0.01	0.03	0.01	-0.01	-0.04	-0.01	0.01
13	8	0.03	-0.06	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.10	-0.12	-0.03
14	6	0.00	-0.01	0.01	-0.03	-0.04	0.01	-0.06	0.05	-0.01
15	6	0.01	0.08	0.00	-0.02	-0.04	0.01	0.01	0.04	0.00
16	8	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
17	8	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01
18	1	-0.07	0.24	-0.05	0.01	0.18	-0.02	0.06	0.30	-0.05
19	1	-0.05	0.01	0.04	-0.02	0.03	0.00	-0.49	0.35	0.15
20	1	-0.15	0.06	-0.04	-0.60	0.29	-0.08	0.16	-0.08	0.03
21	8	0.05	0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01
22	8	-0.11	-0.04	-0.04	0.00	0.02	0.00	0.02	-0.02	0.01
23	1	0.65	0.52	0.18	0.12	0.11	0.03	-0.22	-0.19	-0.06
24	8	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	7	0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.03
27	1	0.00	0.01	0.04	0.00	0.01	0.00	-0.17	0.11	0.21
28	7	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	-0.05
29	1	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.03	0.00
30	6	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.02
31	1	-0.03	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.29	-0.01	-0.01
32	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.02
33	1	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.06	-0.13
34	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.01	-0.02
35	1	0.04	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.02	-0.04
36	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00

70

71

72

A

A

A

Frequencies -- 1318.9746 1341.5445 1353.1468

Red. masses -- 1.7804 4.8842 5.3691

Frc consts -- 1.8249 5.1791 5.7922

IR Inten -- 27.2007 144.9293 346.0570

Raman Activ -- 32.0379 23.0397 6.4257

Depolar (P) -- 0.1580 0.3407 0.0931

Depolar (U) -- 0.2729 0.5082 0.1704

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	-0.04	-0.03	-0.01	0.00	-0.01
3	1	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00
4	6	0.05	0.00	0.00	-0.08	0.18	-0.03	-0.09	0.12	-0.01
5	6	-0.02	0.04	-0.01	-0.02	-0.21	0.05	-0.17	-0.03	-0.01
6	6	-0.01	-0.01	0.00	0.18	0.12	-0.03	0.08	-0.04	0.01
7	6	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.20	0.02	0.00	-0.06	0.01
8	6	-0.03	-0.02	0.01	0.23	0.10	-0.02	-0.08	-0.07	0.01
9	6	0.02	0.01	0.02	-0.04	0.01	-0.04	0.40	0.11	0.21
10	6	-0.01	0.02	0.00	-0.06	-0.19	0.04	0.01	-0.03	0.00
11	1	-0.01	-0.01	0.01	-0.45	-0.19	0.07	0.26	0.04	-0.02
12	8	0.01	0.00	0.00	0.06	0.02	-0.02	0.02	0.01	-0.01
13	8	-0.02	0.03	0.01	-0.09	0.09	0.03	-0.02	0.02	0.00
14	6	0.02	-0.01	0.00	-0.16	0.08	-0.02	0.03	0.08	-0.01
15	6	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.01	-0.01

16	8	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.07	0.02	0.03
17	8	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.01	0.03	-0.13	-0.10	-0.19
18	1	-0.01	-0.09	0.01	-0.05	0.14	-0.03	0.01	-0.03	0.00
19	1	0.13	-0.09	-0.04	0.47	-0.36	-0.12	0.06	-0.06	0.02
20	1	-0.01	0.01	0.00	0.06	-0.05	0.03	0.47	-0.18	0.05
21	8	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00
22	8	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
23	1	0.07	0.06	0.02	-0.05	-0.05	-0.01	0.03	0.03	0.01
24	8	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	-0.02	0.01	-0.01	0.09	0.01	0.03
26	7	-0.05	0.03	0.06	-0.01	0.00	0.01	0.04	0.00	-0.01
27	1	-0.37	0.23	0.46	-0.02	0.01	0.03	0.02	0.00	0.00
28	7	-0.07	-0.06	-0.12	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.01
29	1	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.06	-0.03	0.01	0.26	0.43
30	6	-0.03	0.03	0.05	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.02	-0.03
31	1	0.61	-0.03	-0.03	0.05	0.00	0.00	-0.16	-0.01	-0.02
32	6	0.05	0.02	0.05	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.01
33	1	0.09	-0.13	-0.27	0.01	-0.01	-0.01	-0.04	-0.01	-0.03
34	6	0.10	-0.02	-0.04	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01
35	1	-0.09	-0.05	-0.09	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.01	0.01
36	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00

73

74

75

A

A

A

Frequencies -- 1390.8586 1415.4398 1455.0786

Red. masses -- 2.6547 2.8691 4.1258

Frc consts -- 3.0257 3.3867 5.1467

IR Inten -- 110.0538 54.6905 25.7234

Raman Activ -- 12.5555 11.3145 35.8420

Depolar (P) -- 0.1806 0.1446 0.6023

Depolar (U) -- 0.3060 0.2527 0.7518

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	1	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.06	0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
5	6	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.08	-0.09	0.02	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
9	6	0.02	0.00	0.01	-0.03	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00
10	6	-0.06	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	-0.03	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.00
12	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	8	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.06	-0.04	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
15	6	0.06	0.30	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01
17	8	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
18	1	-0.06	0.13	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	0.11	-0.08	-0.03	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
20	1	-0.36	0.20	-0.06	-0.04	0.01	0.00	-0.03	0.01	0.00
21	8	-0.06	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	8	0.03	-0.09	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.58	-0.52	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	8	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	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	7	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.06	-0.13	0.08	0.00	0.00
27	1	0.00	0.01	0.01	-0.30	0.14	0.27	-0.12	0.12	0.25
28	7	0.00	0.00	-0.01	0.16	0.06	0.14	-0.12	0.03	0.06
29	1	0.01	0.02	0.03	0.02	0.12	0.20	0.02	0.01	0.03

30	6	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.06	-0.12	0.20	-0.09	-0.17
31	1	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.09	-0.17	-0.50	-0.04	-0.11
32	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.03	0.06	-0.02	0.16	0.32
33	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.17	-0.35	0.05	-0.24	-0.49
34	6	0.00	0.00	0.00	0.13	0.03	0.08	-0.10	-0.09	-0.18
35	1	0.01	0.00	0.00	-0.63	-0.04	-0.11	0.21	-0.07	-0.13
36	1	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 --		1467.7639				1504.8904				1513.8943
Red. masses --		1.5716				2.6187				3.8712
Frc consts --		1.9948				3.4942				5.2274
IR Inten --		25.4042				13.5268				22.4760
Raman Activ --		1.5164				0.1133				12.6690
Depolar (P) --		0.7350				0.5318				0.2611
Depolar (U) --		0.8472				0.6943				0.4141

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
2	1	-0.01	-0.07	-0.05	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.02	0.02
3	1	-0.01	-0.05	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.00
4	6	-0.03	0.02	0.00	-0.13	-0.09	0.02	-0.10	0.22	-0.04
5	6	0.05	-0.03	0.01	0.01	0.10	-0.02	0.24	0.00	0.00
6	6	-0.06	-0.02	0.01	0.13	-0.04	0.00	-0.06	-0.10	0.02
7	6	-0.03	0.16	0.03	-0.01	0.08	0.01	0.01	-0.15	0.01
8	6	-0.05	0.00	0.00	0.12	-0.08	0.02	-0.10	-0.22	0.05
9	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	-0.07	-0.01	-0.03
10	6	0.03	-0.02	0.00	0.01	0.19	-0.04	0.08	0.00	0.00
11	1	0.24	0.13	-0.04	-0.29	-0.27	0.06	0.41	0.13	-0.04
12	8	0.05	-0.02	-0.02	0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.00
13	8	-0.05	-0.05	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.03	0.00
14	6	0.02	0.02	0.00	-0.13	-0.03	0.00	-0.08	0.10	-0.02
15	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.00	0.02	0.11	-0.02
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
17	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04
18	1	0.05	0.15	-0.03	-0.02	-0.66	0.13	0.11	-0.04	0.01
19	1	0.68	-0.58	-0.18	0.18	-0.15	-0.05	-0.20	0.17	0.05
20	1	0.04	0.01	0.00	0.29	-0.31	0.07	0.48	-0.22	0.05
21	8	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00
22	8	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00
23	1	0.01	0.01	0.00	-0.04	-0.03	-0.01	-0.06	-0.05	-0.02
24	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.00	-0.01
26	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
27	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.02
28	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.02
29	1	-0.01	-0.03	-0.04	0.00	0.01	-0.02	-0.06	-0.21	-0.36
30	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
31	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02
33	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
35	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01
36	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00

		79		80		81				
		A		A		A				
Frequencies --		1539.4849				1561.7226				1591.6837
Red. masses --		2.5891				1.5496				2.5276
Frc consts --		3.6153				2.2268				3.7729
IR Inten --		48.5029				10.6083				9.1632
Raman Activ --		10.9951				2.4322				5.4600



Depolar (P) --	0.5805	0.7431	0.6302
Depolar (U) --	0.7346	0.8526	0.7732

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	1	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	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00
5	6	-0.01	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
8	6	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00
9	6	0.01	0.03	0.05	-0.06	-0.04	-0.09	-0.05	-0.01	-0.02
10	6	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
11	1	-0.02	-0.01	0.00	0.04	0.02	-0.01	0.02	0.01	0.00
12	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
16	8	0.01	-0.02	-0.04	-0.02	0.03	0.06	0.00	0.00	0.01
17	8	-0.02	0.01	0.02	0.04	-0.02	-0.03	0.02	-0.01	-0.01
18	1	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.02	0.01	0.00	0.05	-0.03	0.01	0.03	-0.02	0.00
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	8	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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.01	0.01	-0.02	0.02	-0.03	0.04	0.00	-0.01	0.03
26	7	0.20	-0.05	-0.09	0.05	0.00	0.00	0.08	-0.04	-0.07
27	1	-0.31	0.30	0.60	0.06	0.00	0.00	-0.35	0.24	0.47
28	7	0.00	0.02	0.03	0.01	-0.01	-0.02	-0.15	-0.01	-0.02
29	1	-0.04	-0.22	-0.37	0.12	0.46	0.80	0.10	0.20	0.37
30	6	-0.11	0.01	0.01	-0.07	0.01	0.02	0.20	0.01	0.03
31	1	0.15	-0.01	-0.01	0.17	-0.01	-0.01	-0.35	0.06	0.11
32	6	0.10	-0.02	-0.04	0.06	0.01	0.01	-0.09	-0.05	-0.11
33	1	0.10	0.07	0.14	0.07	0.01	0.02	-0.15	0.09	0.18
34	6	-0.22	0.02	0.02	-0.10	-0.01	-0.03	0.08	0.06	0.12
35	1	0.22	0.07	0.15	0.17	0.01	0.03	-0.26	0.04	0.06
36	1	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.00	-0.03	0.00

	82	83	84
	A	A	A

Frequencies --	1649.2659	1657.8124	1666.0277
Red. masses --	1.0945	7.4008	6.3963
Frc consts --	1.7540	11.9839	10.4603
IR Inten --	31.2017	59.8975	9.5473
Raman Activ --	1.9853	35.5496	19.2973
Depolar (P) --	0.5098	0.7500	0.7497
Depolar (U) --	0.6753	0.8571	0.8569

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	-0.08	0.03	0.05	-0.02	0.01	0.02	0.04	0.00	-0.02
3	1	-0.05	0.06	-0.05	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.02	0.02
4	6	0.00	-0.01	0.00	-0.08	0.27	-0.05	-0.29	0.02	0.00
5	6	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.35	0.07	0.18	0.02	-0.01
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.22	0.04	0.34	0.13	-0.03
7	6	0.02	0.00	-0.01	-0.02	-0.06	0.01	-0.03	0.00	0.02
8	6	0.01	0.00	0.00	0.04	0.24	-0.05	-0.30	-0.05	0.01
9	6	0.01	0.00	0.01	0.01	0.03	-0.03	-0.03	-0.02	-0.04
10	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.40	-0.08	-0.18	-0.03	0.01
11	1	0.00	0.00	0.00	0.27	-0.07	0.01	-0.40	-0.25	0.06

12	8	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.04	0.01	-0.02
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.01	0.01	0.00	0.13	-0.24	0.05	0.31	-0.11	0.02
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.01	-0.02	0.02	-0.02
16	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.02
17	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
18	1	0.00	0.01	0.00	-0.04	-0.45	0.08	-0.21	0.05	-0.01
19	1	0.02	-0.02	-0.01	-0.04	0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00
20	1	0.01	-0.01	0.00	-0.33	0.01	-0.01	-0.35	0.29	-0.07
21	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.04	-0.01	0.02
22	8	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	0.03	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00
24	8	0.02	0.06	-0.03	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
25	1	-0.27	-0.28	0.62	-0.03	-0.04	0.08	-0.03	-0.04	0.08
26	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
27	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.02	0.04
28	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
29	1	0.00	-0.05	-0.03	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.02	0.03
30	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
31	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
36	1	-0.07	-0.64	-0.12	-0.01	-0.08	-0.01	-0.01	-0.08	-0.01

85

86

87

A

A

A

Frequencies -- 1685.9291 1811.9039 1821.0979

Red. masses -- 1.0765 6.9126 8.5160

Frc consts -- 1.8028 13.3710 16.6399

IR Inten -- 55.5552 217.7786 290.3235

Raman Activ -- 1.2354 20.0688 34.4412

Depolar (P) -- 0.6273 0.3735 0.2434

Depolar (U) -- 0.7710 0.5438 0.3915

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	-0.06	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
2	1	0.62	-0.15	-0.41	0.01	-0.01	-0.03	0.08	-0.06	-0.09
3	1	0.33	-0.40	0.36	0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.11	0.03
4	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.00	-0.09	-0.01	0.01
5	6	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00
7	6	-0.01	-0.01	0.00	0.12	0.00	-0.04	0.60	0.01	-0.19
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.30	0.24	0.42	0.07	-0.03	-0.08
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01
11	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.04	0.01
12	8	0.01	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.02	-0.36	0.00	0.12
13	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.06	0.04	0.02
14	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.01	0.03	-0.15	0.02	-0.06
16	8	0.00	0.00	0.00	0.17	-0.15	-0.26	-0.04	0.03	0.05
17	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.06	0.00	0.00	0.01
18	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.01
19	1	-0.04	0.03	-0.01	0.07	-0.08	-0.02	0.35	-0.37	-0.11
20	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00
21	8	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.02	0.10	-0.01	0.04
22	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03	0.02	-0.08	-0.06	-0.03
24	8	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
25	1	-0.04	-0.03	0.07	0.03	0.03	-0.02	0.03	0.07	-0.15

26	7	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.11	-0.22	-0.02	0.04	0.04
28	7	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.21	0.28	0.54	-0.04	-0.03	-0.14
30	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
35	1	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
36	1	0.00	-0.11	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.02	0.09	0.02

88

89

90

A

A

A

Frequencies -- 1850.5154 2828.1929 3213.2203

Red. masses -- 10.1130 1.0811 1.0887

Frc consts -- 20.4040 5.0951 6.6225

IR Inten -- 501.9719 3286.0260 5.8060

Raman Activ -- 73.2193 403.9878 75.0531

Depolar (P) -- 0.1158 0.3263 0.5704

Depolar (U) -- 0.2076 0.4921 0.7264

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	1	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.03	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03	0.00
7	6	0.15	0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.09	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.08	-0.06	-0.09	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00
11	1	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.33	-0.06
12	8	-0.09	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	8	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00
15	6	0.65	-0.10	0.24	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	8	-0.04	0.04	0.06	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
17	8	-0.01	0.01	0.01	-0.07	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.87	-0.03	0.00
19	1	0.08	-0.10	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
20	1	-0.01	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.24	0.05
21	8	-0.41	0.04	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	8	-0.06	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.33	0.28	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
26	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	-0.03	0.02	0.06	-0.02	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
28	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	-0.06	-0.09	-0.14	0.99	-0.11	-0.06	0.00	0.00	0.00
30	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	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	1	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	1	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

91

92

93

A

A

A

Frequencies -- 3232.4913 3240.0430 3264.9276



99

A

[illegible]



36 1 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 -0.36 -0.10 0.90

# PYRHEM

Harmonic frequencies (cm\*\*-1), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A\*\*4/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 --		13.6471						19.0481			46.4070	
Red. masses --		8.4579						7.2008			7.7827	
Frc consts --		0.0009						0.0015			0.0099	
IR Inten --		0.7682						1.2719			1.3887	
Raman Activ --		1.5196						2.1890			0.0249	
Depolar (P) --		0.7486						0.7498			0.6851	
Depolar (U) --		0.8562						0.8570			0.8131	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z		
1	6	0.05	0.02	0.02	0.04	0.02	-0.01	0.00	0.01	0.06		
2	6	0.00	0.05	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.01	0.08		
3	6	-0.05	0.02	-0.01	-0.05	0.02	0.02	0.00	0.01	0.07		
4	6	-0.05	-0.04	0.00	-0.05	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.13		
5	1	-0.09	-0.06	-0.01	-0.09	-0.05	0.05	0.00	0.00	0.14		
6	6	0.00	-0.06	0.03	0.00	-0.06	0.02	0.00	0.01	0.19		
7	6	0.04	-0.04	0.04	0.04	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.13		
8	1	0.08	-0.06	0.06	0.08	-0.06	-0.02	0.00	0.00	0.12		
9	6	0.10	0.04	-0.02	0.10	0.04	-0.01	0.00	0.00	-0.05		
10	8	0.14	0.09	-0.22	0.07	0.08	0.15	-0.04	-0.03	0.15		
11	6	0.00	0.10	-0.01	0.00	0.09	-0.01	0.00	-0.01	0.06		
12	8	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.21	-0.03	0.01	-0.01	0.05		
13	8	0.00	0.25	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.06		
14	6	-0.10	0.05	0.00	-0.10	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.04		
15	8	-0.07	0.09	0.23	-0.13	0.09	-0.18	0.03	-0.02	0.12		
16	8	-0.18	0.03	-0.26	-0.11	0.01	0.20	-0.03	0.03	-0.38		
17	1	-0.21	0.05	-0.22	-0.14	0.03	0.16	-0.02	0.02	-0.43		
18	7	0.01	-0.08	0.01	0.00	0.06	-0.01	0.01	-0.01	0.01		
19	1	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.19	-0.03	0.01	-0.02	0.04		
20	7	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.12	0.01	-0.01	-0.02	0.01		
21	1	0.00	0.14	-0.02	0.00	-0.11	0.01	-0.02	-0.04	0.03		
22	6	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.30	0.03	-0.02	0.00	-0.01		
23	1	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.46	0.05	-0.04	0.00	-0.02		
24	6	0.01	-0.25	0.02	0.00	-0.23	0.02	0.00	0.03	-0.03		
25	1	0.01	-0.36	0.04	0.00	-0.34	0.03	0.00	0.06	-0.05		
26	6	0.01	-0.24	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.02	-0.01		
27	1	0.01	-0.35	0.04	0.00	0.10	-0.02	0.04	0.04	-0.02		
28	8	0.09	0.00	0.20	0.17	0.02	-0.19	0.05	0.04	-0.42		
29	1	-0.01	-0.11	0.05	-0.01	-0.11	0.02	0.00	0.01	0.26		
30	1	0.13	0.02	0.14	0.19	0.04	-0.16	0.04	0.03	-0.46		
		4			5			6				
		A			A			A				
Frequencies --		48.8375						58.4350			88.6761	
Red. masses --		6.8591						4.6969			5.8088	
Frc consts --		0.0096						0.0094			0.0269	
IR Inten --		3.1654						0.7498			0.3043	
Raman Activ --		4.0897						3.4216			2.1488	
Depolar (P) --		0.7495						0.7498			0.7498	
Depolar (U) --		0.8568						0.8570			0.8570	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z		
1	6	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	0.01		
2	6	0.00	-0.01	-0.07	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.05	0.02		
3	6	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.02	0.02	-0.03	0.01		

4	6	0.01	0.01	0.21	0.01	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.00
5	1	0.01	0.01	0.28	0.01	0.01	0.02	0.04	0.00	-0.01
6	6	0.00	0.01	0.32	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.01	0.01	0.21	-0.01	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	0.00
8	1	-0.01	0.01	0.28	-0.01	0.01	-0.03	-0.04	0.00	-0.01
9	6	-0.01	-0.01	-0.10	-0.02	-0.01	-0.05	-0.05	-0.04	0.00
10	8	0.02	-0.03	-0.27	0.00	-0.02	-0.16	-0.05	-0.06	0.02
11	6	0.00	-0.01	-0.11	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.02
12	8	-0.02	0.00	-0.10	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.01
13	8	0.02	0.00	-0.10	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	0.01
14	6	0.01	-0.01	-0.10	0.01	-0.01	0.06	0.04	-0.05	0.00
15	8	-0.02	-0.02	-0.27	0.03	-0.01	0.17	0.05	-0.07	0.01
16	8	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.06	-0.03	-0.02
17	1	0.04	-0.01	-0.09	0.01	0.00	-0.01	0.08	-0.04	-0.03
18	7	-0.03	0.02	0.04	0.00	0.18	-0.02	0.01	0.36	-0.04
19	1	-0.02	0.01	-0.07	0.00	0.07	0.00	0.00	0.14	-0.01
20	7	0.04	0.01	0.05	0.00	-0.17	0.03	0.00	0.36	-0.04
21	1	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.25	0.04	-0.01	0.42	-0.04
22	6	0.06	0.01	0.12	0.00	-0.26	0.03	0.00	-0.04	0.00
23	1	0.12	0.00	0.14	0.00	-0.52	0.06	-0.01	-0.12	0.01
24	6	0.00	0.02	0.17	0.00	0.04	-0.01	0.01	-0.28	0.03
25	1	-0.01	0.02	0.23	0.00	0.07	-0.02	0.02	-0.61	0.06
26	6	-0.06	0.02	0.11	0.00	0.31	-0.04	0.02	-0.01	0.00
27	1	-0.12	0.03	0.12	0.01	0.58	-0.08	0.02	-0.08	0.01
28	8	-0.05	0.00	0.01	-0.05	-0.01	0.05	-0.06	-0.03	-0.02
29	1	0.00	0.02	0.48	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.01
30	1	-0.05	-0.01	-0.08	-0.05	-0.01	0.01	-0.07	-0.04	-0.02

7  
A

8  
A

9  
A

Frequencies --	108.8565	118.6445	148.9925
Red. masses --	6.2913	8.0943	6.1289
Frc consts --	0.0439	0.0671	0.0802
IR Inten --	7.3972	3.9431	9.2642
Raman Activ --	0.1580	0.0805	0.2300
Depolar (P) --	0.5919	0.6159	0.3885
Depolar (U) --	0.7436	0.7623	0.5596

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.00	-0.03	0.06	-0.01	-0.02	0.02	0.00	0.09
2	6	-0.02	0.00	-0.09	0.03	0.00	-0.07	0.02	0.00	0.15
3	6	-0.02	0.00	-0.03	0.06	0.01	-0.04	0.01	0.00	0.08
4	6	-0.02	0.00	0.03	0.06	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.03
5	1	-0.02	0.00	0.08	0.06	0.01	0.04	0.01	0.00	-0.10
6	6	-0.03	0.00	0.04	0.07	0.00	0.04	0.01	0.00	-0.07
7	6	-0.03	0.01	0.02	0.06	-0.01	0.03	0.02	0.00	-0.01
8	1	-0.03	0.01	0.06	0.05	0.00	0.07	0.02	0.00	-0.07
9	6	-0.05	0.00	0.07	0.12	0.02	0.03	0.01	-0.01	-0.01
10	8	-0.08	-0.01	0.22	0.12	0.09	0.11	0.03	-0.04	-0.12
11	6	-0.01	-0.01	-0.16	0.01	0.00	-0.09	0.01	0.01	0.18
12	8	0.02	-0.03	-0.17	-0.01	-0.04	-0.09	0.03	0.03	0.17
13	8	-0.03	-0.01	-0.17	-0.02	0.02	-0.11	0.01	-0.01	0.19
14	6	-0.04	0.01	0.06	0.12	-0.02	0.03	0.00	0.01	-0.01
15	8	-0.02	0.04	0.20	0.14	-0.07	0.11	-0.01	0.02	-0.10
16	8	-0.08	-0.01	0.02	0.17	0.01	0.01	0.00	0.01	-0.02
17	1	-0.08	0.00	0.11	0.21	-0.02	0.08	-0.02	0.01	-0.11
18	7	0.01	-0.01	-0.15	-0.28	0.01	-0.06	-0.13	-0.03	-0.25
19	1	0.02	-0.03	-0.21	0.01	-0.02	-0.08	0.03	0.01	0.02
20	7	0.19	-0.01	-0.13	-0.21	0.00	-0.05	0.08	-0.02	-0.22
21	1	0.28	-0.02	-0.25	-0.20	0.00	-0.08	0.16	-0.04	-0.33
22	6	0.26	0.00	0.05	-0.19	-0.01	0.03	0.15	0.00	-0.01
23	1	0.42	0.00	0.10	-0.13	-0.02	0.05	0.34	0.01	0.04



24	6	0.09	0.02	0.17	-0.26	0.00	0.08	-0.05	0.01	0.13
25	1	0.08	0.03	0.32	-0.26	0.00	0.14	-0.06	0.03	0.31
26	6	-0.07	0.01	0.03	-0.31	0.01	0.02	-0.22	-0.01	-0.04
27	1	-0.22	0.02	0.05	-0.38	0.02	0.03	-0.41	-0.01	-0.01
28	8	-0.04	0.00	0.01	0.19	-0.02	0.01	-0.02	0.01	-0.02
29	1	-0.03	0.01	0.09	0.07	0.00	0.08	0.01	0.00	-0.17
30	1	-0.07	0.00	0.12	0.23	0.01	0.06	-0.01	0.01	-0.12

		10		11		12				
		A		A		A				
Frequencies --		162.8458				176.5209				181.3001
Red. masses --		9.7533				6.7932				5.7367
Frc consts --		0.1524				0.1247				0.1111
IR Inten --		0.5791				0.2875				0.2772
Raman Activ --		1.0806				0.7277				0.4638
Depolar (P) --		0.7433				0.7499				0.7486
Depolar (U) --		0.8527				0.8571				0.8562

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.01	-0.15	-0.10	0.00	-0.12	0.06	-0.01	-0.16
2	6	0.04	0.00	-0.03	-0.10	0.00	0.02	0.07	0.00	-0.01
3	6	0.04	0.00	0.11	-0.10	0.00	0.14	0.07	0.00	0.15
4	6	0.04	0.00	0.17	-0.10	0.01	0.21	0.07	0.00	0.26
5	1	0.04	0.00	0.32	-0.09	0.02	0.37	0.07	0.00	0.47
6	6	0.04	0.00	0.02	-0.10	0.00	-0.01	0.07	0.00	0.00
7	6	0.04	0.00	-0.17	-0.10	-0.01	-0.21	0.06	0.00	-0.26
8	1	0.04	0.00	-0.28	-0.10	-0.01	-0.39	0.06	0.00	-0.46
9	6	0.00	-0.03	-0.08	0.01	0.07	-0.03	-0.01	-0.04	-0.01
10	8	0.00	-0.06	-0.11	0.03	0.24	0.01	-0.05	-0.10	0.14
11	6	0.03	-0.01	-0.02	-0.09	0.02	0.02	0.06	0.00	0.00
12	8	0.03	0.46	-0.08	-0.09	0.01	0.03	0.05	-0.16	0.02
13	8	0.03	-0.44	0.04	-0.09	0.04	0.02	0.07	0.14	-0.02
14	6	0.00	0.02	0.08	0.01	-0.08	0.03	-0.01	0.05	0.00
15	8	0.01	0.06	0.16	0.01	-0.26	-0.05	-0.04	0.13	-0.14
16	8	-0.05	0.01	-0.10	0.17	0.04	-0.07	-0.09	0.01	-0.06
17	1	-0.08	0.03	-0.12	0.27	-0.05	-0.18	-0.16	0.05	-0.21
18	7	-0.03	-0.03	0.01	0.06	-0.01	-0.02	-0.04	0.01	0.00
19	1	0.04	0.31	-0.05	-0.11	0.01	0.00	0.06	-0.11	0.02
20	7	-0.04	0.05	0.00	0.09	-0.01	-0.02	-0.05	-0.01	0.01
21	1	-0.05	-0.03	0.02	0.10	-0.01	-0.04	-0.06	0.02	0.01
22	6	-0.05	0.06	-0.01	0.10	0.00	0.00	-0.05	-0.02	0.00
23	1	-0.05	0.11	-0.01	0.12	0.00	0.00	-0.06	-0.03	0.00
24	6	-0.04	-0.02	0.00	0.08	0.01	0.01	-0.05	0.00	0.00
25	1	-0.04	-0.03	-0.01	0.07	0.02	0.03	-0.05	0.00	-0.01
26	6	-0.03	-0.07	0.01	0.05	0.00	-0.01	-0.04	0.02	0.00
27	1	-0.03	-0.13	0.02	0.04	0.00	-0.01	-0.04	0.04	0.00
28	8	-0.06	-0.02	0.11	0.15	-0.06	0.06	-0.08	-0.01	0.06
29	1	0.04	0.00	0.04	-0.10	0.00	-0.02	0.07	0.00	0.01
30	1	-0.09	-0.03	0.17	0.25	0.02	0.15	-0.14	-0.04	0.22

		13		14		15				
		A		A		A				
Frequencies --		209.7316				221.9707				275.4302
Red. masses --		10.7709				7.2187				7.2527
Frc consts --		0.2791				0.2096				0.3242
IR Inten --		0.1497				23.5505				1.6640
Raman Activ --		0.1100				2.0388				1.6426
Depolar (P) --		0.7376				0.7385				0.7500
Depolar (U) --		0.8490				0.8496				0.8571

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.06	0.01	-0.01	0.00	-0.22	-0.17	-0.10	0.03
2	6	0.01	-0.04	0.01	0.00	-0.01	-0.27	-0.01	-0.17	0.06
3	6	-0.02	-0.06	0.00	0.00	-0.01	-0.24	0.16	-0.09	0.03

4	6	-0.01	-0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.16	0.06	0.00
5	1	-0.02	-0.06	-0.02	0.00	0.00	0.12	0.27	0.11	-0.03
6	6	0.01	-0.08	0.00	-0.01	0.00	0.20	0.01	0.17	0.00
7	6	0.03	-0.06	0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.16	0.06	0.02
8	1	0.04	-0.07	0.01	-0.01	0.00	0.17	-0.29	0.13	0.00
9	6	-0.06	-0.11	0.02	-0.02	0.00	-0.06	-0.11	-0.06	0.00
10	8	-0.09	-0.23	0.06	-0.03	0.05	0.06	-0.07	0.19	-0.03
11	6	0.02	0.25	-0.01	0.01	0.01	0.04	-0.02	-0.07	0.02
12	8	0.01	0.42	-0.03	-0.24	0.01	0.18	0.01	0.11	-0.01
13	8	0.04	0.46	-0.03	0.29	0.02	0.20	-0.03	0.11	-0.01
14	6	0.05	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.12	-0.05	0.00
15	8	0.06	-0.19	0.03	0.02	0.02	0.07	0.09	0.21	-0.02
16	8	0.14	-0.06	-0.01	-0.01	-0.03	0.04	-0.11	-0.20	-0.01
17	1	0.20	-0.10	0.00	-0.01	-0.02	0.24	-0.28	-0.08	-0.04
18	7	-0.01	-0.09	0.00	-0.01	-0.01	-0.06	0.00	-0.02	0.00
19	1	0.01	0.38	-0.03	-0.25	0.01	0.23	0.01	0.16	-0.03
20	7	-0.01	-0.09	0.00	0.02	-0.01	-0.06	0.00	-0.02	0.00
21	1	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.01	-0.05	0.00	0.02	0.00
22	6	-0.01	0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.04	-0.01	0.03	-0.01	-0.05	0.00	0.01	0.00
24	6	-0.01	0.05	-0.01	0.01	-0.01	-0.04	0.00	0.01	0.00
25	1	-0.01	0.12	-0.01	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.03	0.00
26	6	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.06	0.00	-0.01	0.00
27	1	-0.02	-0.02	0.00	-0.02	-0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00
28	8	-0.17	-0.03	-0.02	0.01	-0.03	0.03	0.11	-0.24	-0.02
29	1	0.01	-0.10	-0.01	-0.01	0.01	0.50	0.01	0.33	-0.02
30	1	-0.26	-0.09	-0.01	0.00	-0.02	0.21	0.31	-0.12	-0.05

16

17

18

A

A

A

Frequencies --	313.1193	375.3978	379.9374
Red. masses --	10.5287	7.0131	6.9915
Frc consts --	0.6082	0.5823	0.5946
IR Inten --	0.0122	23.0477	10.8695
Raman Activ --	3.0560	3.9705	1.0029
Depolar (P) --	0.7117	0.1326	0.1402
Depolar (U) --	0.8316	0.2341	0.2459

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.11	-0.01	-0.04	-0.02	-0.16	-0.04	-0.01	0.17
2	6	-0.13	0.02	-0.01	0.03	0.02	0.05	0.02	-0.02	-0.07
3	6	0.00	0.13	-0.01	-0.06	0.03	-0.09	-0.03	0.01	0.22
4	6	0.00	0.06	0.00	-0.08	-0.02	-0.12	-0.02	0.04	0.05
5	1	-0.08	0.02	0.00	-0.08	-0.01	-0.21	0.01	0.06	0.03
6	6	0.08	-0.02	0.00	-0.08	-0.02	0.14	-0.05	0.06	-0.21
7	6	0.02	-0.06	0.00	-0.05	-0.01	0.00	-0.05	0.05	0.13
8	1	-0.05	-0.02	0.00	-0.03	-0.02	0.05	-0.08	0.07	0.21
9	6	0.08	-0.20	0.00	-0.11	-0.08	-0.10	-0.05	-0.07	0.07
10	8	0.07	-0.29	0.01	-0.11	0.04	0.01	-0.03	-0.02	-0.02
11	6	-0.23	0.01	0.00	0.13	0.01	0.11	0.10	-0.02	-0.16
12	8	-0.28	0.01	0.03	0.35	-0.01	0.00	-0.10	-0.01	-0.07
13	8	-0.25	0.00	0.00	0.01	0.00	0.03	0.38	-0.01	-0.01
14	6	0.07	0.21	0.00	-0.09	0.09	-0.03	-0.09	0.05	0.12
15	8	0.07	0.25	-0.01	-0.08	-0.01	0.02	-0.10	-0.05	-0.02
16	8	0.14	0.28	0.00	0.08	0.23	0.02	0.02	0.17	-0.02
17	1	0.24	0.21	-0.02	0.26	0.10	0.08	0.11	0.08	-0.29
18	7	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
19	1	-0.31	0.00	0.07	0.38	-0.03	-0.14	-0.09	0.01	0.05
20	7	0.05	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00
21	1	0.07	0.00	-0.03	-0.04	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.01
22	6	0.06	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.01
23	1	0.06	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.03	0.00	-0.01

24	6	0.05	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.02
25	1	0.05	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02
26	6	0.04	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.01
27	1	0.05	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01
28	8	0.11	-0.25	0.01	0.05	-0.26	0.01	0.06	-0.15	-0.02
29	1	0.08	-0.03	0.01	-0.08	-0.03	0.35	-0.05	0.07	-0.53
30	1	0.17	-0.21	0.04	0.21	-0.13	0.23	0.19	-0.08	-0.18

19  
A

20  
A

21  
A

Frequencies --	409.1344	441.1701	538.9746
Red. masses --	7.8733	3.3084	7.3089
Frc consts --	0.7765	0.3794	1.2509
IR Inten --	8.3638	0.2741	8.7593
Raman Activ --	3.2014	1.3643	8.5982
Depolar (P) --	0.7392	0.5095	0.2284
Depolar (U) --	0.8500	0.6750	0.3718

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.07	0.03	-0.04	-0.04	0.00	0.22	0.12	-0.01	0.08
2	6	0.00	0.07	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.12	-0.03	0.02
3	6	-0.06	0.03	-0.06	-0.03	0.00	-0.22	0.14	-0.02	-0.08
4	6	-0.02	0.30	-0.01	-0.04	0.00	0.15	0.24	-0.02	0.01
5	1	0.09	0.35	0.01	-0.03	0.00	0.41	0.25	-0.03	0.05
6	6	0.02	0.32	0.04	-0.05	0.00	0.00	0.29	0.00	0.01
7	6	0.05	0.29	-0.04	-0.05	-0.01	-0.15	0.20	0.00	-0.03
8	1	-0.08	0.37	-0.05	-0.05	-0.01	-0.40	0.18	0.02	-0.10
9	6	0.11	-0.09	0.00	-0.01	-0.01	0.14	-0.13	-0.02	0.03
10	8	0.10	-0.24	0.01	0.02	-0.03	-0.04	-0.11	0.20	-0.02
11	6	0.00	0.08	0.02	0.02	-0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.00
12	8	0.03	-0.01	0.01	0.05	0.00	-0.01	-0.13	0.02	0.06
13	8	-0.05	-0.02	0.01	0.05	0.00	0.01	-0.12	0.00	-0.06
14	6	-0.11	-0.10	-0.02	-0.01	0.02	-0.14	-0.16	0.04	-0.03
15	8	-0.10	-0.23	0.01	0.02	0.04	0.05	-0.16	-0.20	0.02
16	8	-0.15	-0.13	0.01	0.02	0.02	0.01	-0.07	0.15	0.01
17	1	-0.21	-0.08	0.11	0.11	-0.01	0.47	0.09	0.06	0.35
18	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	0.03	-0.05	-0.01	0.05	0.00	-0.03	-0.14	0.04	0.14
20	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
21	1	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.02
22	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
24	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
26	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
28	8	0.13	-0.11	0.02	0.01	-0.01	-0.01	-0.09	-0.10	-0.01
29	1	0.01	0.25	0.11	-0.05	0.00	0.00	0.29	0.02	0.02
30	1	0.17	-0.08	0.07	0.11	0.01	-0.47	0.04	-0.05	-0.36

22  
A

23  
A

24  
A

Frequencies --	545.9700	573.8281	598.5294
Red. masses --	5.8333	1.3600	2.6885
Frc consts --	1.0245	0.2639	0.5675
IR Inten --	24.4800	142.4403	21.5317
Raman Activ --	1.2492	0.2693	0.1856
Depolar (P) --	0.6662	0.7477	0.7360
Depolar (U) --	0.7997	0.8556	0.8479

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.11	0.11	0.05	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.08
2	6	0.02	0.22	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.02	0.20
3	6	-0.08	0.12	0.02	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.09

4	6	-0.15	0.02	0.09	0.02	0.00	0.07	-0.02	0.00	-0.12
5	1	-0.28	-0.05	0.14	0.04	0.01	0.14	-0.03	0.00	-0.47
6	6	0.02	-0.09	-0.09	0.00	0.01	-0.08	-0.01	0.00	0.17
7	6	0.19	0.01	0.08	-0.02	0.00	0.07	0.01	0.00	-0.12
8	1	0.32	-0.07	0.10	-0.04	0.01	0.15	0.03	-0.01	-0.45
9	6	-0.14	-0.01	-0.04	0.02	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.03
10	8	-0.16	0.07	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
11	6	0.00	0.20	-0.02	0.00	-0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.08
12	8	-0.01	-0.05	0.02	0.02	0.01	0.01	-0.09	-0.01	-0.05
13	8	-0.02	-0.07	0.01	-0.02	0.01	0.01	0.10	-0.01	-0.03
14	6	0.12	-0.01	-0.05	-0.02	0.00	-0.05	0.01	0.00	-0.03
15	8	0.14	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
16	8	-0.03	-0.17	-0.02	0.00	0.02	-0.04	-0.01	-0.01	-0.02
17	1	-0.23	-0.01	0.28	0.13	-0.03	0.67	0.04	-0.01	0.49
18	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
19	1	-0.01	-0.16	0.04	0.02	0.02	-0.01	-0.09	0.00	0.04
20	7	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	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	1	0.00	-0.01	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	0.00	0.00
25	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	8	0.00	-0.20	-0.01	0.01	0.02	-0.04	0.01	-0.01	-0.02
29	1	0.01	-0.29	-0.25	0.00	0.04	-0.18	-0.01	-0.02	0.16
30	1	0.24	-0.03	0.13	-0.16	-0.03	0.63	-0.05	-0.01	0.40

25  
A

26  
A

27  
A

Frequencies --	604.9771	629.3275	655.7220
Red. masses --	1.3317	3.4156	4.6756
Frc consts --	0.2872	0.7970	1.1845
IR Inten --	4.3369	11.3077	132.3157
Raman Activ --	3.7900	0.1452	0.4104
Depolar (P) --	0.7251	0.7498	0.7500
Depolar (U) --	0.8406	0.8570	0.8571

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.11	0.01
2	6	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.01
3	6	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.11	0.00
4	6	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.11	0.00
5	1	-0.01	0.00	-0.09	0.01	0.00	0.00	-0.06	0.14	-0.01
6	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00
7	6	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.14	0.10	0.00
8	1	-0.01	0.00	0.11	-0.01	0.00	0.00	0.07	0.14	-0.02
9	6	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.14	0.00
10	8	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.10	0.17	0.03
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01
12	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
14	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.14	0.00
15	8	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.18	0.02
16	8	0.00	-0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.15	-0.05	-0.02
17	1	0.10	-0.03	0.65	0.00	0.00	0.01	0.47	-0.29	-0.10
18	7	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.01	0.00	-0.01	0.00
19	1	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00
20	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.23	-0.03	0.00	0.01	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.01	0.00	0.00	0.00
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.03	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.71	0.09	0.00	0.00	0.00

24	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.25	-0.03	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.37	-0.05	0.00	0.00	0.00
26	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.02	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.37	0.05	0.00	0.01	0.00
28	8	-0.01	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.04	-0.03
29	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.16	-0.01
30	1	0.13	0.03	-0.71	0.00	0.00	-0.01	-0.49	-0.26	-0.12

28

A

29

A

30

A

Frequencies --	671.7280	674.4960	736.3658
Red. masses --	4.7341	5.4219	5.4493
Frc consts --	1.2586	1.4533	1.7409
IR Inten --	10.4683	0.3058	79.0514
Raman Activ --	5.0313	0.3383	0.1718
Depolar (P) --	0.1604	0.7155	0.6001
Depolar (U) --	0.2764	0.8342	0.7501

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	0.13	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.08
2	6	0.17	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.27
3	6	0.03	-0.14	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.00	0.08
4	6	0.01	-0.12	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.02	-0.02	-0.13
5	1	0.18	-0.03	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.02	-0.02	0.07
6	6	-0.16	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07
7	6	0.03	0.12	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.13
8	1	0.18	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.07
9	6	-0.07	0.12	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.05	-0.02	0.31
10	8	-0.11	-0.12	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.02	0.01	-0.09
11	6	0.10	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.13	0.02
12	8	-0.08	0.02	0.11	0.00	-0.01	0.00	0.05	-0.02	0.04
13	8	-0.08	-0.01	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.03	0.02
14	6	-0.08	-0.11	0.00	0.01	0.00	0.00	0.04	-0.02	0.31
15	8	-0.10	0.12	0.02	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.09
16	8	0.13	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.10
17	1	0.44	-0.26	-0.07	-0.03	0.01	-0.01	0.08	-0.04	0.40
18	7	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.39	-0.05	0.00	0.01	0.00
19	1	-0.07	0.05	0.26	0.00	0.17	-0.04	0.05	-0.09	0.00
20	7	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.27	0.03	0.00	0.00	0.00
21	1	0.02	0.00	-0.03	0.00	0.13	-0.02	0.00	-0.05	0.01
22	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.01	0.00
24	6	0.01	0.01	0.00	0.00	0.18	-0.02	0.00	0.00	0.00
25	1	0.01	0.01	0.00	0.00	0.27	-0.03	0.00	0.01	0.00
26	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.31	0.04	0.00	-0.01	0.00
27	1	0.00	-0.03	0.00	0.01	-0.71	0.09	0.00	-0.01	0.00
28	8	0.13	0.02	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.10
29	1	-0.16	0.00	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.04	0.49
30	1	0.45	0.23	0.08	-0.02	-0.01	-0.01	-0.11	-0.04	0.41

31

A

32

A

33

A

Frequencies --	744.1085	765.9607	768.1628
Red. masses --	4.9917	3.1659	1.3711
Frc consts --	1.6284	1.0944	0.4767
IR Inten --	9.4573	31.9210	37.5534
Raman Activ --	18.9309	0.8721	0.0774
Depolar (P) --	0.0283	0.7397	0.7478
Depolar (U) --	0.0551	0.8504	0.8557

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

4	6	0.06	0.09	0.00	0.11	-0.07	0.02	-0.03	0.02	-0.01
5	1	-0.04	0.03	-0.01	0.15	-0.05	-0.19	-0.05	0.02	0.06
6	6	0.26	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.03	0.00	-0.01	-0.01
7	6	0.04	-0.09	0.00	-0.12	-0.06	0.02	0.04	0.02	-0.01
8	1	-0.05	-0.03	-0.03	-0.15	-0.04	-0.17	0.05	0.01	0.06
9	6	-0.08	0.12	-0.02	0.04	-0.02	-0.06	-0.01	0.01	0.02
10	8	-0.12	-0.07	-0.02	0.03	0.00	0.03	-0.01	0.00	-0.01
11	6	-0.16	0.02	0.02	0.01	0.33	-0.04	0.00	-0.10	0.01
12	8	0.05	-0.03	-0.17	0.00	-0.06	0.02	0.00	0.02	-0.01
13	8	0.06	0.02	0.17	-0.01	-0.07	0.01	0.00	0.03	0.00
14	6	-0.09	-0.11	0.03	-0.04	-0.01	-0.07	0.01	0.00	0.02
15	8	-0.12	0.08	0.02	-0.03	0.01	0.03	0.01	0.00	-0.01
16	8	0.10	-0.07	-0.02	0.02	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00
17	1	0.39	-0.28	-0.06	0.08	-0.06	-0.07	-0.03	0.02	0.02
18	7	0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01	0.00	0.02	0.00
19	1	0.05	-0.06	-0.37	0.00	-0.21	0.04	0.00	0.07	-0.01
20	7	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.04	0.00
21	1	-0.01	0.00	0.03	0.00	-0.26	0.03	0.00	-0.12	0.02
22	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.07	0.01
23	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.30	-0.04	-0.01	0.45	-0.06
24	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.01	0.00	-0.08	0.01
25	1	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.56	-0.07	-0.01	0.81	-0.10
26	6	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.03	0.00
27	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.14	-0.02	0.00	0.24	-0.03
28	8	0.10	0.06	0.03	-0.03	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
29	1	0.26	0.00	-0.01	0.00	0.24	-0.25	0.00	-0.07	0.08
30	1	0.39	0.26	0.09	-0.09	-0.06	-0.07	0.03	0.02	0.02

34

35

36

A

A

A

Frequencies --	789.5997	804.7294	825.3019
Red. masses --	1.7758	7.5816	1.1813
Frc consts --	0.6523	2.8927	0.4741
IR Inten --	47.2697	2.4221	64.8777
Raman Activ --	0.3418	0.1789	0.1976
Depolar (P) --	0.7483	0.5356	0.7090
Depolar (U) --	0.8561	0.6976	0.8297

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	-0.05	0.00	-0.01	-0.24	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.01	0.19	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00
3	6	0.01	0.00	-0.05	0.00	0.01	0.23	0.00	0.00	0.00
4	6	0.02	-0.01	-0.03	0.00	0.01	0.03	0.01	-0.01	0.00
5	1	0.03	0.00	0.51	-0.02	-0.01	-0.35	0.01	-0.01	0.00
6	6	0.00	0.00	-0.11	0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.02	-0.01	-0.03	0.01	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00
8	1	-0.03	0.00	0.49	0.00	0.01	0.40	0.00	0.00	0.01
9	6	0.00	0.00	0.02	-0.09	-0.01	0.45	0.00	0.00	0.01
10	8	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.00
11	6	0.01	0.08	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00
12	8	-0.03	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	8	0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
14	6	0.00	0.00	0.03	-0.07	0.01	-0.44	0.00	0.00	-0.01
15	8	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.12	0.00	0.00	0.00
16	8	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01	0.11	0.00	0.00	0.00
17	1	0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.25	0.00	0.00	-0.01
18	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00
19	1	-0.04	-0.05	0.03	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.10	0.01
20	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00
21	1	0.01	-0.05	0.00	0.00	-0.08	0.01	-0.01	0.90	-0.12
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.10	0.01
23	1	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.36	-0.05

24	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00
25	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00
26	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.01
27	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.13	0.02
28	8	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.11	0.00	0.00	0.00
29	1	0.01	0.05	0.65	0.04	-0.01	0.03	0.00	0.02	0.01
30	1	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.26	-0.01	-0.01	0.01

37

A

38

A

39

A

Frequencies --	832.0654	863.0575	886.9482
Red. masses --	6.0185	3.7533	1.1754
Frc consts --	2.4550	1.6472	0.5448
IR Inten --	10.0322	0.4857	18.4837
Raman Activ --	4.9925	0.4649	0.3703
Depolar (P) --	0.0576	0.7499	0.7380
Depolar (U) --	0.1088	0.8571	0.8493

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.10	-0.08	0.00	0.00	0.01	0.22	0.00	-0.01	0.00
2	6	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.20	0.00	-0.01	0.00
3	6	-0.09	0.09	-0.01	0.00	0.01	0.22	0.00	-0.01	0.00
4	6	-0.09	0.23	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	0.00
5	1	-0.32	0.11	-0.01	0.00	0.00	0.29	0.00	0.01	0.00
6	6	0.25	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.11	-0.22	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.00
8	1	-0.34	-0.08	0.00	-0.01	0.00	0.28	0.00	0.01	0.00
9	6	-0.02	0.03	-0.01	0.03	0.01	-0.18	0.00	0.00	0.00
10	8	-0.03	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00
11	6	0.25	-0.01	-0.04	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00
12	8	0.01	0.03	0.24	0.03	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
13	8	0.00	-0.03	-0.24	-0.03	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00
14	6	-0.02	-0.03	0.02	-0.03	0.01	-0.19	0.00	0.00	0.00
15	8	-0.03	0.02	0.00	0.01	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00
16	8	0.02	-0.04	-0.01	0.01	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
17	1	0.06	-0.08	-0.01	-0.01	-0.01	-0.06	-0.01	0.01	0.00
18	7	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
19	1	0.03	0.08	0.51	0.03	0.02	-0.02	0.00	0.02	0.00
20	7	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00
21	1	0.01	0.04	-0.04	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.47	0.06
22	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.01
23	1	0.01	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.65	-0.08
24	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01
25	1	0.01	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.33	0.04
26	6	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.01
27	1	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.47	0.06
28	8	0.03	0.04	0.01	-0.01	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
29	1	0.25	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.76	0.00	-0.01	0.00
30	1	0.07	0.07	0.02	0.01	0.00	-0.06	0.01	0.01	0.00

40

A

41

A

42

A

Frequencies --	902.7842	918.2416	941.1231
Red. masses --	6.3392	1.3441	6.3637
Frc consts --	3.0440	0.6677	3.3209
IR Inten --	4.9920	8.8771	3.1181
Raman Activ --	5.3333	0.1183	5.4465
Depolar (P) --	0.7474	0.7402	0.7431
Depolar (U) --	0.8554	0.8507	0.8526

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	0.25	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.01	0.29	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.06	0.25	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

4	6	0.11	-0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	-0.05	-0.16	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.12	-0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	1	0.04	-0.18	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.08	-0.04	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	8	0.13	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	-0.24	0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
12	8	-0.01	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02
13	8	0.01	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
14	6	-0.09	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	8	-0.12	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	8	0.10	-0.16	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.27	-0.29	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	7	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.16	-0.01	-0.04
19	1	-0.01	0.16	-0.02	0.00	-0.06	0.01	0.01	0.00	0.01
20	7	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.18	0.00	0.01
21	1	0.00	-0.10	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.04	-0.04	-0.22
22	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.05	-0.01	-0.06	0.04	0.36
23	1	0.00	0.09	-0.01	0.00	-0.33	0.04	-0.26	0.05	0.31
24	6	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.10	0.01	0.42	0.01	0.03
25	1	0.00	-0.06	0.01	0.00	0.43	-0.05	0.44	-0.01	-0.02
26	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.02	0.01	-0.05	-0.32
27	1	0.00	-0.02	0.00	0.01	-0.81	0.10	-0.12	-0.02	-0.32
28	8	-0.11	-0.16	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.01	0.34	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	-0.29	-0.27	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

43

44

45

A

A

A

Frequencies --	956.6282	981.5591	1008.6459
Red. masses --	3.1237	1.4044	1.0998
Frc consts --	1.6843	0.7972	0.6592
IR Inten --	40.3462	0.0173	103.4630
Raman Activ --	3.1298	0.0111	0.2430
Depolar (P) --	0.3394	0.7467	0.7203
Depolar (U) --	0.5068	0.8550	0.8374

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	-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	0.04	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.00
5	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.71	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	0.00
8	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.67	0.00	0.00	0.01
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
10	8	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	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01
12	8	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.01
13	8	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
15	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	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	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00
18	7	-0.20	0.02	0.14	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00
19	1	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.01	0.98	-0.13
20	7	0.16	0.02	0.16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.33	-0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.01
22	6	0.10	-0.02	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.43	-0.03	-0.27	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00



24	6	0.01	-0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.03	0.06	0.58	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00
26	6	-0.11	-0.02	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
27	1	0.27	-0.03	-0.21	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00
28	8	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	-0.05	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00

46

A

47

A

48

A

Frequencies --	1022.4054	1068.0212	1079.5025
Red. masses --	1.3594	1.3951	1.5005
Frc consts --	0.8372	0.9376	1.0303
IR Inten --	0.8597	14.1728	89.9351
Raman Activ --	0.0266	2.9769	1.7822
Depolar (P) --	0.4602	0.5927	0.7480
Depolar (U) --	0.6303	0.7443	0.8558

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	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	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
5	1	0.01	0.00	0.47	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
6	6	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
8	1	-0.01	0.02	0.55	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	8	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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
14	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	8	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	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
18	7	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.09	0.01	0.12
19	1	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.03	0.00	0.01	0.01
20	7	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.01	-0.05	-0.02	-0.01	-0.05
21	1	0.00	0.00	0.00	-0.20	0.01	0.09	0.01	-0.01	-0.10
22	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.07	0.01	0.04
23	1	0.00	0.00	0.00	0.14	0.00	0.02	0.78	0.03	0.23
24	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.01	0.08	-0.06	-0.01	-0.06
25	1	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.10	0.83	-0.04	-0.04	-0.33
26	6	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.01	-0.07	0.00	0.00	-0.04
27	1	0.00	0.00	0.00	0.41	-0.01	-0.13	0.41	-0.01	-0.10
28	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	-0.01	-0.67	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

49

A

50

A

51

A

Frequencies --	1099.9775	1147.6967	1178.6511
Red. masses --	3.6664	5.4318	2.1339
Frc consts --	2.6137	4.2155	1.7466
IR Inten --	36.2416	45.9180	100.7700
Raman Activ --	25.1438	7.0272	18.2634
Depolar (P) --	0.0827	0.0528	0.1640
Depolar (U) --	0.1527	0.1004	0.2818

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	0.10	0.00	-0.11	0.21	-0.01	0.01	0.00	0.00
2	6	0.19	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.16	-0.02	-0.01
3	6	0.03	-0.10	0.00	-0.13	-0.20	0.01	0.02	0.01	0.00

4	6	-0.05	0.25	0.00	-0.05	-0.12	0.00	-0.05	0.02	0.00
5	1	0.32	0.46	-0.01	-0.30	-0.27	0.02	-0.22	-0.06	0.00
6	6	-0.07	0.01	0.00	0.23	-0.02	0.00	0.04	-0.03	0.00
7	6	-0.07	-0.24	0.00	-0.05	0.12	0.00	-0.07	0.01	0.00
8	1	0.37	-0.53	0.02	-0.40	0.36	-0.03	-0.48	0.26	-0.02
9	6	0.02	0.07	0.01	0.08	0.17	0.02	0.00	0.00	0.00
10	8	0.02	0.00	0.00	0.11	-0.03	0.02	0.01	0.00	0.00
11	6	0.01	0.01	0.03	0.01	0.00	0.00	0.03	0.01	0.04
12	8	-0.04	-0.01	-0.07	-0.01	0.00	-0.01	-0.04	-0.01	-0.07
13	8	-0.03	0.01	0.06	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.01	0.04
14	6	0.02	-0.08	-0.01	0.06	-0.17	-0.01	-0.02	0.07	0.01
15	8	0.03	0.00	0.00	0.11	0.03	-0.02	-0.03	-0.01	0.00
16	8	-0.05	0.06	0.01	-0.11	0.14	0.02	0.05	-0.04	-0.01
17	1	0.08	-0.03	-0.01	0.20	-0.08	-0.04	-0.17	0.11	0.03
18	7	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.06
19	1	-0.04	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.04
20	7	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.08	0.00	0.01
21	1	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01	-0.05	-0.25	0.03	0.23
22	6	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.07	-0.01	-0.09
23	1	-0.08	0.00	-0.02	-0.06	0.00	0.00	0.24	0.00	-0.06
24	6	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.09	0.00	-0.04
25	1	0.00	0.01	0.06	-0.01	0.00	0.01	0.09	0.02	0.16
26	6	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.02
27	1	-0.01	0.00	0.01	0.05	0.00	0.00	-0.44	0.01	0.09
28	8	-0.05	-0.06	-0.01	-0.13	-0.14	-0.03	0.00	0.00	0.00
29	1	-0.09	0.04	0.00	0.25	-0.07	0.00	0.03	-0.31	0.01
30	1	0.07	0.02	0.01	0.22	0.09	0.05	0.03	0.02	0.01

52

53

54

A

A

A

Frequencies --	1179.6295	1183.7091	1208.0740
Red. masses --	1.9485	2.0676	1.5214
Frc consts --	1.5975	1.7069	1.3083
IR Inten --	66.4296	315.2288	313.3065
Raman Activ --	5.3436	0.8049	9.4591
Depolar (P) --	0.1232	0.5641	0.7485
Depolar (U) --	0.2194	0.7213	0.8562

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.06	0.04	0.00
2	6	0.11	-0.02	0.00	0.12	0.06	-0.01	-0.01	0.03	0.00
3	6	0.03	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.07	0.05	0.00
4	6	-0.03	0.02	0.00	-0.07	-0.05	0.00	0.03	0.04	0.00
5	1	-0.13	-0.02	0.00	-0.45	-0.25	0.01	0.18	0.12	0.00
6	6	0.01	-0.03	0.00	0.04	0.06	0.00	-0.01	-0.06	0.00
7	6	-0.05	0.01	0.00	-0.02	-0.04	0.00	-0.01	0.03	0.00
8	1	-0.37	0.20	-0.01	-0.10	0.01	0.01	-0.13	0.10	0.00
9	6	0.00	0.01	0.00	-0.04	-0.12	-0.01	-0.01	-0.06	-0.01
10	8	0.01	0.00	0.00	-0.05	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00
11	6	0.02	0.01	0.02	0.03	-0.01	0.03	0.00	0.01	0.00
12	8	-0.03	-0.01	-0.04	-0.03	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00
13	8	-0.02	0.00	0.03	-0.02	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00
14	6	-0.02	0.07	0.01	0.02	-0.07	0.00	0.01	-0.07	-0.01
15	8	-0.03	-0.01	0.00	0.04	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.00
16	8	0.05	-0.05	-0.01	-0.05	0.04	0.01	-0.07	0.04	0.01
17	1	-0.16	0.10	0.03	0.21	-0.15	-0.04	0.35	-0.27	-0.06
18	7	-0.02	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.03	-0.02	-0.07	-0.03	0.02	-0.02	0.00	0.01	0.00
20	7	0.09	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
21	1	0.28	-0.03	-0.28	0.03	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
22	6	-0.08	0.01	0.09	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.32	0.00	0.04	-0.05	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00

24	6	-0.09	0.01	0.05	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.09	-0.03	-0.19	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
26	6	0.06	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
27	1	0.53	-0.01	-0.09	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	8	-0.01	0.00	0.00	0.10	0.07	0.02	0.07	0.03	0.01
29	1	0.00	-0.30	0.01	0.06	0.63	-0.01	-0.03	-0.72	0.00
30	1	0.05	0.04	0.01	-0.34	-0.21	-0.08	-0.33	-0.22	-0.07

55

A

56

A

57

A

Frequencies --	1217.4363	1231.9354	1256.0451
Red. masses --	3.6666	1.7996	1.7240
Frc consts --	3.2019	1.6092	1.6025
IR Inten --	41.5219	18.2754	0.7600
Raman Activ --	38.9926	27.3819	1.8933
Depolar (P) --	0.0607	0.1140	0.5802
Depolar (U) --	0.1144	0.2047	0.7343

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.02	0.00	-0.10	0.13	0.00	0.13	-0.01	0.00
2	6	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.11	0.00
3	6	-0.01	-0.02	0.00	-0.07	-0.11	0.00	-0.14	-0.03	0.00
4	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.04	0.00
5	1	-0.03	-0.01	0.00	0.17	0.08	-0.01	0.67	0.28	-0.01
6	6	0.01	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00
7	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.03	-0.05	0.00
8	1	-0.03	0.01	0.00	0.28	-0.14	0.02	-0.54	0.25	-0.01
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.02	-0.05	0.00
10	8	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.00
11	6	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.00
12	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
14	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.03	0.00	0.02	-0.05	0.00
15	8	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.02	0.02	0.00
16	8	0.01	0.00	0.00	0.08	-0.02	-0.01	0.00	0.02	0.00
17	1	-0.05	0.04	0.01	-0.47	0.38	0.09	-0.14	0.12	0.03
18	7	0.13	-0.02	-0.16	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.03	0.00
20	7	0.06	0.04	0.27	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.02	0.06	0.44	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
22	6	0.01	0.01	0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.54	0.04	0.28	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
24	6	-0.17	-0.01	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.20	-0.01	-0.03	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
26	6	-0.06	-0.03	-0.22	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
27	1	-0.34	-0.03	-0.21	0.03	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
28	8	0.01	0.00	0.00	0.08	0.01	0.02	0.01	0.02	0.00
29	1	0.02	0.01	0.00	0.08	-0.06	0.00	0.00	0.11	0.00
30	1	-0.04	-0.03	-0.01	-0.52	-0.37	-0.12	0.04	0.04	0.01

58

A

59

A

60

A

Frequencies --	1320.6289	1332.8494	1368.3502
Red. masses --	1.6927	5.9039	3.8322
Frc consts --	1.7394	6.1794	4.2276
IR Inten --	34.3351	0.6540	271.9121
Raman Activ --	31.6668	12.4888	5.6087
Depolar (P) --	0.2042	0.7499	0.0687
Depolar (U) --	0.3392	0.8571	0.1285

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	-0.26	-0.14	0.00	-0.08	-0.06	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	-0.01	-0.10	0.00	-0.02
3	6	0.00	0.00	0.00	0.25	-0.16	0.00	-0.09	0.07	0.01

4	6	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.10	0.00	0.05	-0.05	0.00
5	1	-0.01	0.00	0.00	0.18	0.08	0.00	0.30	0.08	-0.01
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.23	0.00	0.02	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.19	-0.12	0.00	0.03	0.05	0.00
8	1	-0.01	0.00	0.00	-0.15	0.08	-0.01	0.33	-0.12	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.05	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01
10	8	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.04	0.01	0.31	0.01	0.16
12	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.03	-0.21
13	8	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.07	0.01	0.07
14	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.05	-0.01	0.00	-0.02	0.00
15	8	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
16	8	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00
17	1	-0.02	0.01	0.00	-0.31	0.28	0.06	0.02	-0.02	0.00
18	7	0.08	0.02	0.13	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
19	1	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.05	0.00	-0.01	0.09	0.70
20	7	0.05	-0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01
21	1	0.38	-0.06	-0.52	-0.01	0.01	0.01	-0.03	0.01	0.06
22	6	-0.11	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
23	1	0.09	0.01	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.00	-0.02
24	6	-0.05	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.02
25	1	-0.09	0.04	0.30	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	-0.10
26	6	0.03	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.03
27	1	-0.64	0.00	0.04	0.01	0.00	0.00	-0.05	-0.01	-0.03
28	8	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.40	0.00	0.03	-0.04	0.00
30	1	-0.01	-0.01	0.00	0.30	0.24	0.07	0.09	0.08	0.02

61

62

63

A

A

A

Frequencies --	1381.2525	1392.8422	1416.2379
Red. masses --	2.5524	2.8170	2.9169
Frc consts --	2.8691	3.2198	3.4470
IR Inten --	231.0886	6.8511	76.1215
Raman Activ --	1.1551	19.9617	9.8404
Depolar (P) --	0.7500	0.1993	0.1513
Depolar (U) --	0.8571	0.3324	0.2628

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.07	0.00	-0.09	0.07	0.00	0.02	0.02	0.00
2	6	-0.02	0.01	0.00	0.07	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
3	6	0.00	-0.06	0.00	-0.10	-0.08	0.00	0.02	-0.02	0.00
4	6	-0.07	-0.04	0.00	-0.03	-0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00
5	1	0.25	0.13	-0.01	0.30	0.14	-0.01	-0.06	-0.02	0.00
6	6	-0.01	0.05	0.00	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.08	-0.05	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00
8	1	-0.24	0.15	-0.01	0.22	-0.12	0.01	-0.06	0.02	0.00
9	6	0.05	0.23	0.02	-0.04	-0.19	-0.02	0.00	-0.01	0.00
10	8	-0.05	-0.03	-0.01	0.05	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
11	6	0.02	0.00	0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.06	0.00	-0.04
12	8	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.02	0.00	0.01
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00
14	6	-0.03	0.20	0.01	-0.04	0.23	0.02	0.00	0.01	0.00
15	8	0.04	-0.03	-0.01	0.06	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
16	8	-0.02	-0.06	0.00	-0.03	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.39	-0.35	-0.07	0.46	-0.41	-0.09	0.00	0.00	0.00
18	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.16	0.02	0.15
19	1	0.00	0.01	0.05	-0.01	-0.01	-0.11	0.02	0.02	0.19
20	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.14
21	1	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.31	0.04	0.31
22	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.13	0.01	0.08
23	1	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.62	-0.02	-0.12

24	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.01	0.07
25	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.06	-0.05	-0.39
26	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.02	-0.13
27	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.07	-0.03	-0.20
28	8	0.02	-0.07	0.00	-0.02	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.17	0.00	0.09	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
30	1	-0.49	-0.38	-0.11	0.40	0.31	0.09	0.01	0.00	0.00

64

A

65

A

66

A

Frequencies --	1454.4942	1502.0561	1505.5010
Red. masses --	4.1260	2.5939	2.4600
Frc consts --	5.1429	3.4480	3.2851
IR Inten --	24.3309	3.8038	3.6320
Raman Activ --	34.3836	4.3616	8.3585
Depolar (P) --	0.6153	0.2903	0.2939
Depolar (U) --	0.7618	0.4499	0.4543

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.01	0.00	-0.06	0.17	0.00	-0.14	-0.09	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.09	0.00	0.14	-0.06	0.00
3	6	0.01	-0.01	0.00	0.15	-0.01	0.00	-0.01	0.18	0.00
4	6	0.00	0.01	0.00	-0.09	0.07	0.00	-0.11	-0.05	0.00
5	1	-0.03	-0.01	0.00	0.11	0.20	0.00	0.49	0.27	-0.01
6	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.17	0.00	0.05	-0.10	0.00
7	6	0.00	-0.01	0.00	0.15	-0.02	0.00	0.04	0.08	0.00
8	1	-0.03	0.01	0.00	-0.42	0.34	-0.01	0.13	0.03	0.00
9	6	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.07	-0.01	0.00	0.05	0.00
10	8	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00
11	6	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.02	0.03
12	8	0.01	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.03
13	8	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.02
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.08	0.00
15	8	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.05	0.04	0.01
18	7	-0.12	0.01	0.06	-0.01	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.03
19	1	0.01	0.00	0.03	0.03	0.03	0.38	-0.05	-0.09	-0.63
20	7	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01
21	1	-0.11	0.03	0.26	0.04	-0.01	-0.05	-0.07	0.01	0.08
22	6	-0.09	-0.03	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
23	1	0.21	-0.02	-0.15	0.02	0.00	0.00	-0.04	0.00	-0.01
24	6	-0.02	0.05	0.36	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01
25	1	0.04	-0.07	-0.54	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.03
26	6	0.20	-0.02	-0.19	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02
27	1	-0.51	-0.02	-0.11	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.02
28	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.60	-0.01	0.08	0.33	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.06	0.04	0.02	-0.02	-0.01	0.00

67

A

68

A

69

A

Frequencies --	1537.6826	1546.9871	1590.9958
Red. masses --	2.1452	2.5815	2.6627
Frc consts --	2.9884	3.6399	3.9712
IR Inten --	18.1301	60.2346	18.4715
Raman Activ --	10.2354	3.9435	8.2400
Depolar (P) --	0.7498	0.2019	0.6157
Depolar (U) --	0.8570	0.3359	0.7622

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

4	6	-0.04	-0.03	0.00	0.03	0.02	0.00	0.01	0.01	0.00
5	1	0.15	0.06	0.00	-0.10	-0.05	0.00	-0.02	-0.01	0.00
6	6	0.03	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
7	6	-0.03	0.03	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00
8	1	0.13	-0.06	0.00	-0.09	0.05	0.00	-0.02	0.01	0.00
9	6	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
10	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.11	-0.02	-0.12	0.10	0.01	0.08	0.05	0.00	-0.01
12	8	0.06	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00
13	8	-0.01	0.01	0.06	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.01
14	6	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
15	8	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	1	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
18	7	-0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.16	0.00	0.01
19	1	0.06	0.10	0.75	-0.07	-0.09	-0.67	-0.05	-0.03	-0.20
20	7	-0.12	0.01	0.06	-0.16	0.01	0.06	-0.08	0.01	0.09
21	1	0.23	-0.06	-0.44	0.14	-0.05	-0.42	0.40	-0.07	-0.58
22	6	0.12	0.00	-0.03	0.22	0.00	0.01	-0.09	-0.02	-0.14
23	1	-0.10	-0.01	-0.09	-0.29	-0.02	-0.13	0.29	-0.01	-0.08
24	6	-0.05	0.00	0.03	-0.11	0.00	0.01	0.10	0.02	0.13
25	1	-0.05	-0.01	-0.08	-0.12	-0.02	-0.12	0.16	-0.02	-0.20
26	6	0.06	0.00	0.00	0.12	0.00	-0.03	-0.21	-0.01	-0.02
27	1	-0.05	0.00	0.02	-0.23	0.00	0.01	0.38	-0.01	-0.13
28	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.04	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
30	1	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00

70  
A

71  
A

72  
A

Frequencies --	1657.2191	1666.9224	1801.8087
Red. masses --	7.5034	6.3713	7.6991
Frc consts --	12.1413	10.4305	14.7268
IR Inten --	67.8906	6.6709	276.2578
Raman Activ --	40.1278	19.8467	24.4109
Depolar (P) --	0.7500	0.7500	0.2354
Depolar (U) --	0.8571	0.8571	0.3810

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	0.26	0.00	-0.29	-0.04	0.00	-0.02	0.00	0.00
2	6	0.00	-0.35	0.01	0.18	0.01	0.00	0.06	-0.01	-0.02
3	6	-0.07	0.26	0.00	-0.28	0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00
4	6	-0.10	-0.23	0.00	0.33	0.13	0.00	0.01	0.00	0.00
5	1	0.28	-0.06	0.00	-0.43	-0.28	0.01	-0.02	-0.01	0.00
6	6	0.00	0.42	0.00	-0.18	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.13	-0.25	0.00	0.31	-0.12	0.00	0.01	-0.01	0.00
8	1	-0.32	-0.01	0.00	-0.34	0.29	-0.01	-0.02	0.01	0.00
9	6	0.01	-0.05	0.00	-0.02	0.02	-0.01	0.05	-0.01	0.01
10	8	-0.01	0.01	0.00	0.04	-0.01	0.01	-0.03	0.00	-0.01
11	6	0.00	0.04	-0.01	-0.04	-0.01	-0.05	-0.30	0.09	0.54
12	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.10
13	8	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.02	0.19	-0.05	-0.32
14	6	-0.02	-0.05	0.00	-0.02	-0.01	0.01	0.04	0.00	0.00
15	8	0.01	0.01	0.00	0.04	0.01	-0.01	-0.02	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	1	-0.03	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00
18	7	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00
19	1	0.00	-0.04	0.01	0.01	0.01	0.05	0.14	0.07	0.57
20	7	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.03
21	1	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.04	0.13	-0.04	-0.28
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.02
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.02

24	6	0.00	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	0.01	0.00	0.00	-0.02
26	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00
28	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	-0.03	-0.47	0.00	-0.21	0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
30	1	0.03	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.02	0.01	0.00
		73			74			75			
		A			A			A			
Frequencies --		1847.9354				1861.1166				3028.6340	
Red. masses --		10.4904				10.4408				1.0745	
Frc consts --		21.1064				21.3074				5.8072	
IR Inten --		29.5365				744.7051				2777.4662	
Raman Activ --		25.6960				95.0616				487.5985	
Depolar (P) --		0.7500				0.0956				0.3339	
Depolar (U) --		0.8571				0.1746				0.5007	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	0.06	-0.01	0.00	-0.08	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.06	-0.01	0.00	-0.08	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	1	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.50	0.11	-0.09	0.50	-0.11	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00
10	8	0.32	-0.05	0.06	-0.31	0.05	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.02	0.01	0.05	-0.01	-0.05	0.00	0.00	-0.01	0.00
12	8	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.06	0.00	0.00	0.01
13	8	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	0.01
14	6	0.52	0.07	-0.07	0.51	0.08	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00
15	8	-0.33	-0.03	0.05	-0.32	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00
16	8	-0.05	0.00	0.01	-0.05	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.25	-0.21	-0.05	0.24	-0.20	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00
18	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.04	0.00	-0.02	-0.01	-0.09	0.99	-0.02	-0.04	-0.04
20	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01
21	1	0.00	0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.04	-0.04	-0.01	-0.05	-0.05
22	6	0.00	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	0.00
24	6	0.00	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	0.00
26	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02
28	8	0.04	0.00	0.01	-0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	-0.26	-0.19	-0.06	0.25	0.19	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00
		76			77			78			
		A			A			A			
Frequencies --		3215.7144				3238.2455				3247.8452	
Red. masses --		1.0893				1.0938				1.0949	
Frc consts --		6.6365				6.7576				6.8046	
IR Inten --		4.5602				1.3300				1.7735	
Raman Activ --		82.5126				103.0388				145.8926	
Depolar (P) --		0.5224				0.2958				0.1529	
Depolar (U) --		0.6863				0.4566				0.2652	
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	0.00
2	6	0.00	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	0.00

4	6	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.04	-0.07	0.00
5	1	-0.11	0.20	0.00	-0.12	0.23	0.00	-0.43	0.83	0.00
6	6	-0.08	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.03	0.00	0.00
7	6	0.02	0.02	0.00	-0.04	-0.07	0.00	0.01	0.01	0.00
8	1	-0.18	-0.29	0.00	0.48	0.79	-0.01	-0.09	-0.15	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	8	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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	8	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	8	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	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	7	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	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	0.00	0.00	0.00
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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.91	-0.03	0.00	0.27	-0.01	0.00	-0.30	0.01	0.00
30	1	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 --	3266.6606	3281.1495	3297.7933
Red. masses --	1.0936	1.0957	1.1083
Frc consts --	6.8755	6.9500	7.1013
IR Inten --	2.5810	0.6993	0.0027
Raman Activ --	79.4813	57.1616	173.4142
Depolar (P) --	0.5629	0.5974	0.1211
Depolar (U) --	0.7204	0.7480	0.2160

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	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	8	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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	8	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	8	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	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
20	7	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	-0.01	0.01	0.00	0.01
22	6	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01	-0.06	-0.01	0.01	0.06
23	1	-0.04	0.02	0.14	-0.18	0.09	0.67	0.18	-0.08	-0.66



24	6	-0.04	0.00	-0.01	-0.05	0.00	0.00	-0.07	0.00	-0.01
25	1	0.42	0.01	0.03	0.59	0.01	0.04	0.68	0.02	0.05
26	6	0.01	0.01	0.08	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.02
27	1	-0.14	-0.12	-0.87	0.06	0.05	0.38	0.03	0.03	0.21
28	8	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

82

83

84

A

A

A

Frequencies --	3477.0674	3852.3619	3853.6365
Red. masses --	1.0874	1.0647	1.0648
Frc consts --	7.7458	9.3100	9.3165
IR Inten --	972.0908	148.0809	90.7402
Raman Activ --	186.0570	92.1618	153.9378
Depolar (P) --	0.2455	0.2643	0.2543
Depolar (U) --	0.3942	0.4181	0.4055

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	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	8	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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	8	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	8	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	-0.01	0.00	-0.04	-0.05	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.08	0.11	-0.01	0.57	0.81	-0.05
18	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	7	-0.07	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.82	0.08	0.56	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	1	-0.01	0.00	0.01	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	0.00	0.00
25	1	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	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	8	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.05	0.00	0.00	0.01	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	-0.51	0.84	-0.07	0.07	-0.12	0.01