

## SUPPLEMENTARY MATERIAL S2

### RUBESCIN E VIBRATIONAL PARAMETER

#### Vibrational frequencies, IR intensities and Raman activities

#### 1. freq=raman b3lyp/6-311g(d,p) nosymm geom=connectivity

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 --	20.0024	25.2474	31.5312
Red. masses --	3.8035	4.5580	5.5102
Frc consts --	0.0009	0.0017	0.0032
IR Inten --	0.4638	0.4535	0.4340
Raman Activ --	1.8092	2.3066	1.9416
Depolar (P) --	0.7116	0.7450	0.7384
Depolar (U) --	0.8315	0.8539	0.8495

  

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.02	0.03
2	6	-0.01	-0.02	0.03	0.03	0.01	-0.02	0.01	-0.05	0.06
3	6	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01	-0.04	0.02	-0.02	0.04
4	6	0.01	0.03	-0.02	0.01	0.00	-0.03	0.03	-0.01	0.02
5	6	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.02	0.02
6	6	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.03	-0.02	0.02
7	8	0.00	-0.03	0.07	0.00	0.03	-0.06	0.04	-0.07	0.11
8	6	-0.01	-0.02	-0.04	0.07	-0.02	0.07	-0.02	-0.02	-0.05
9	6	0.01	0.01	-0.05	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.03
10	1	0.01	0.03	-0.04	-0.02	0.01	0.02	0.03	0.02	-0.04
11	8	0.01	0.00	-0.07	0.04	-0.01	0.03	-0.01	-0.01	-0.07
12	6	0.01	0.02	-0.05	0.01	0.00	-0.04	0.01	-0.01	-0.01
13	1	0.01	0.04	-0.06	-0.02	0.02	-0.07	0.02	0.00	-0.02
14	6	0.00	-0.02	0.00	-0.03	0.02	0.05	0.06	0.07	-0.02
15	8	-0.02	-0.06	-0.01	-0.10	0.06	0.12	0.11	0.18	-0.02
16	6	0.00	0.00	-0.06	0.03	-0.01	0.13	0.00	0.00	-0.08
17	1	-0.01	-0.02	-0.07	0.06	-0.02	0.16	-0.02	-0.01	-0.12
18	1	0.01	0.02	-0.07	0.00	0.00	0.12	0.03	0.03	-0.10
19	1	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.01	0.14	0.01	0.01	-0.06
20	6	0.00	0.00	-0.02	0.04	-0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.01
21	1	-0.01	-0.02	-0.02	0.08	0.00	-0.01	-0.03	-0.05	0.00
22	6	0.01	0.03	0.02	-0.02	-0.03	0.00	0.04	0.02	0.04
23	1	0.01	0.03	0.03	-0.02	-0.05	0.01	0.04	0.03	0.05
24	1	0.00	0.05	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.03	0.05	0.03
25	1	0.01	0.04	0.04	-0.04	-0.01	-0.01	0.05	0.02	0.07
26	6	0.00	0.01	0.02	0.00	0.02	-0.06	0.02	-0.02	0.04
27	1	0.00	-0.01	0.03	0.01	0.05	-0.08	0.02	-0.03	0.05
28	1	0.00	0.02	0.03	-0.01	-0.01	-0.08	0.02	0.00	0.05

29	6	-0.02	-0.02	-0.07	0.09	-0.02	0.06	-0.05	-0.03	-0.08
30	1	-0.03	-0.04	-0.06	0.13	-0.02	0.03	-0.08	-0.05	-0.06
31	1	-0.02	-0.03	-0.10	0.09	-0.02	0.10	-0.06	-0.02	-0.12
32	6	-0.03	-0.04	-0.03	0.12	-0.02	0.08	-0.05	-0.04	-0.04
33	1	-0.04	-0.05	-0.04	0.16	-0.04	0.11	-0.08	-0.05	-0.06
34	6	-0.03	-0.04	0.01	0.10	-0.01	0.04	-0.03	-0.06	0.01
35	1	-0.04	-0.06	0.02	0.13	-0.01	0.04	-0.05	-0.08	0.03
36	6	0.01	0.07	-0.02	0.01	0.00	-0.03	0.04	0.02	0.02
37	1	0.01	0.08	-0.04	0.03	0.01	-0.03	0.02	0.02	0.01
38	1	0.02	0.07	0.00	0.01	0.01	-0.03	0.06	0.01	0.03
39	1	0.01	0.07	-0.02	0.01	-0.01	-0.04	0.04	0.05	0.01
40	6	0.00	0.01	0.03	0.00	0.02	-0.06	0.02	-0.02	0.05
41	1	0.00	-0.01	0.05	0.00	0.03	-0.06	0.02	-0.03	0.06
42	6	0.00	-0.02	-0.01	-0.04	0.06	-0.01	0.03	-0.04	0.01
43	1	0.00	-0.03	-0.01	-0.06	0.09	0.00	0.03	-0.06	0.02
44	1	0.00	-0.02	-0.03	-0.03	0.07	0.03	0.03	-0.04	-0.01
45	1	0.00	-0.02	-0.01	-0.05	0.06	-0.04	0.03	-0.05	0.02
46	6	0.00	0.04	-0.04	0.01	-0.02	0.02	0.02	-0.04	0.05
47	1	0.00	0.05	-0.05	0.01	-0.03	0.03	0.02	-0.06	0.07
48	6	0.00	0.02	-0.03	-0.01	-0.01	0.05	0.02	-0.03	0.05
49	1	0.00	0.03	-0.04	0.00	-0.03	0.07	0.02	-0.05	0.06
50	1	-0.01	0.01	-0.05	-0.03	0.01	0.06	0.03	0.00	0.08
51	6	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.02	0.00	0.01
52	1	0.01	0.02	0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.03
53	6	0.00	-0.04	0.03	-0.02	0.03	0.02	0.08	0.10	-0.13
54	1	0.00	-0.03	0.05	0.01	0.02	-0.03	0.07	0.08	-0.21
55	6	-0.01	-0.06	0.02	-0.06	0.05	0.07	0.11	0.17	-0.13
56	1	-0.01	-0.08	0.04	-0.07	0.07	0.07	0.14	0.22	-0.19
57	6	-0.01	-0.04	-0.03	-0.08	0.04	0.11	0.08	0.12	0.04
58	1	-0.01	-0.04	-0.05	-0.10	0.05	0.15	0.08	0.11	0.13
59	8	0.00	0.03	0.03	-0.02	0.01	-0.05	0.03	-0.01	0.05
60	8	0.01	0.01	-0.06	0.04	-0.04	-0.07	-0.01	-0.03	-0.01
61	8	0.01	0.05	-0.01	0.02	-0.03	-0.01	0.02	-0.06	0.02
62	6	0.00	0.03	-0.02	0.04	-0.04	-0.07	-0.06	-0.01	-0.01
63	6	-0.01	0.00	0.03	-0.06	-0.03	-0.07	-0.11	-0.02	0.00
64	6	0.10	-0.04	0.18	-0.03	-0.02	0.01	-0.13	0.02	0.02
65	8	0.00	0.08	-0.02	0.11	-0.04	-0.05	-0.06	0.00	-0.01
66	1	0.19	-0.03	0.24	0.07	-0.01	0.07	-0.11	0.04	0.03
67	6	0.10	-0.08	0.27	-0.12	-0.01	0.03	-0.20	0.03	0.03
68	1	0.00	-0.07	0.19	-0.22	-0.02	-0.05	-0.23	-0.01	0.02
69	1	0.06	-0.16	0.42	-0.16	0.01	0.15	-0.21	0.07	0.05
70	1	0.26	-0.03	0.29	-0.04	-0.02	0.01	-0.22	0.02	0.03
71	6	-0.15	0.01	-0.08	-0.18	-0.04	-0.17	-0.15	-0.05	-0.02
72	1	-0.14	0.02	-0.18	-0.12	-0.11	-0.22	-0.10	-0.11	-0.03
73	1	-0.26	0.00	-0.02	-0.26	0.05	-0.12	-0.15	-0.01	-0.01
74	1	-0.13	0.01	-0.12	-0.26	-0.06	-0.26	-0.21	-0.07	-0.05

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	42.7727	50.0760	53.6326
Red. masses --	4.3466	4.5918	4.6941
Frc consts --	0.0047	0.0068	0.0080
IR Inten --	0.3353	0.3019	0.6349

			Raman Activ --	1.5162		1.0605		2.2891			
			Depolar (P) --	0.7498		0.6123		0.7100			
			Depolar (U) --	0.8570		0.7595		0.8304			
	Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	-0.03	0.02	-0.01	0.03	-0.02	-0.02	0.00	
2	6	-0.04	0.03	-0.06	0.06	-0.07	0.08	-0.05	-0.02	-0.01	
3	6	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.01	
4	6	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00	-0.03	0.01	0.02	0.00	
5	6	0.01	0.01	0.02	0.01	0.00	-0.04	0.01	0.04	-0.01	
6	6	0.01	0.00	0.03	0.01	0.03	-0.06	0.01	0.03	0.00	
7	8	-0.08	0.05	-0.10	0.11	-0.10	0.15	-0.06	-0.02	0.00	
8	6	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.02	-0.01	-0.06	-0.02	
9	6	0.01	-0.02	0.02	0.02	-0.01	-0.02	0.04	-0.04	0.01	
10	1	0.01	-0.04	0.02	0.02	0.00	-0.02	0.03	-0.06	0.01	
11	8	0.02	-0.01	0.03	0.02	-0.02	-0.04	0.07	-0.05	0.03	
12	6	0.01	-0.01	0.01	0.02	0.00	-0.02	0.04	0.00	0.01	
13	1	0.02	0.00	0.01	0.03	-0.01	-0.01	0.06	0.00	0.01	
14	6	0.02	0.02	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	
15	8	0.15	-0.04	-0.14	-0.04	-0.01	0.00	-0.08	-0.10	0.04	
16	6	0.00	-0.04	0.00	0.01	-0.02	-0.02	0.00	-0.12	-0.05	
17	1	0.01	-0.03	0.01	0.01	-0.04	-0.03	0.00	-0.12	-0.06	
18	1	0.00	-0.06	0.02	0.03	0.01	-0.04	0.03	-0.15	-0.03	
19	1	0.00	-0.04	-0.02	0.00	-0.01	0.02	-0.02	-0.13	-0.09	
20	6	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.00	
21	1	0.01	0.02	0.00	0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.01	0.01	
22	6	-0.01	-0.05	-0.06	0.00	0.04	0.08	-0.03	-0.05	-0.01	
23	1	-0.01	-0.05	-0.08	0.00	0.02	0.13	-0.03	-0.05	-0.02	
24	1	0.01	-0.08	-0.04	-0.02	0.07	0.06	-0.02	-0.06	-0.01	
25	1	-0.01	-0.06	-0.08	-0.02	0.06	0.11	-0.04	-0.04	-0.02	
26	6	-0.01	0.00	0.07	0.02	0.03	-0.13	-0.01	0.03	0.01	
27	1	-0.05	-0.01	0.09	0.05	0.07	-0.17	-0.01	0.04	0.01	
28	1	0.01	0.03	0.09	-0.02	-0.02	-0.17	-0.02	0.05	0.01	
29	6	0.03	0.00	0.03	0.00	-0.04	-0.04	0.04	-0.05	0.01	
30	1	0.03	0.02	0.03	-0.01	-0.06	-0.04	0.03	-0.01	0.02	
31	1	0.03	-0.01	0.04	0.00	-0.04	-0.07	0.05	-0.08	0.01	
32	6	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.06	0.01	-0.06	-0.03	-0.04	
33	1	0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.07	-0.01	-0.08	-0.03	-0.06	
34	6	-0.02	0.03	-0.04	0.03	-0.08	0.05	-0.09	-0.01	-0.04	
35	1	-0.03	0.05	-0.06	0.03	-0.11	0.07	-0.13	0.00	-0.05	
36	6	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.01	0.00	
37	1	0.05	-0.01	0.01	-0.05	-0.01	-0.03	0.02	0.02	0.00	
38	1	-0.01	0.00	0.01	0.02	-0.02	-0.04	-0.03	0.02	0.00	
39	1	0.01	-0.05	0.01	0.00	0.04	-0.02	-0.01	-0.02	0.01	
40	6	-0.02	-0.01	0.04	0.02	0.02	-0.09	-0.02	0.01	0.02	
41	1	-0.03	-0.01	0.03	0.03	0.02	-0.08	-0.03	0.00	0.03	
42	6	0.02	-0.04	0.02	0.00	0.09	-0.04	0.03	0.03	0.00	
43	1	0.03	-0.06	0.02	-0.01	0.13	-0.06	0.03	0.04	-0.01	
44	1	0.03	-0.04	-0.01	0.01	0.09	0.00	0.04	0.03	0.00	
45	1	0.02	-0.05	0.04	0.00	0.10	-0.06	0.03	0.02	0.01	
46	6	0.03	0.03	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.02	0.07	-0.04	
47	1	0.04	0.04	-0.01	-0.01	-0.04	0.02	0.02	0.08	-0.06	
48	6	0.03	0.04	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.06	-0.06	

49	1	0.04	0.07	-0.02	-0.01	-0.04	0.00	0.03	0.10	-0.07
50	1	0.05	0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.04	0.04	-0.08
51	6	0.01	0.03	0.02	0.01	0.00	-0.04	0.02	0.04	-0.01
52	1	0.00	0.05	0.03	0.03	-0.02	-0.05	0.03	0.07	0.02
53	6	-0.12	0.04	0.18	-0.14	0.02	0.12	0.15	-0.07	-0.07
54	1	-0.27	0.07	0.35	-0.21	0.04	0.21	0.27	-0.08	-0.13
55	6	-0.04	0.00	0.08	-0.15	0.02	0.12	0.09	-0.12	-0.04
56	1	-0.09	-0.01	0.15	-0.22	0.03	0.20	0.14	-0.17	-0.06
57	6	0.19	-0.03	-0.18	0.04	-0.01	-0.08	-0.12	-0.03	0.06
58	1	0.33	-0.05	-0.35	0.13	-0.03	-0.18	-0.25	-0.01	0.12
59	8	0.01	-0.01	0.02	-0.04	0.00	-0.06	-0.02	0.02	0.02
60	8	0.02	-0.02	0.01	0.03	0.02	-0.02	0.06	0.03	0.01
61	8	0.01	0.04	0.02	0.00	-0.05	-0.05	0.01	0.09	-0.01
62	6	0.01	-0.01	0.01	0.02	0.05	0.02	0.08	0.04	0.04
63	6	-0.05	0.00	0.00	0.01	0.03	0.05	0.00	0.04	0.04
64	6	-0.07	0.02	0.02	-0.07	0.08	0.01	-0.07	0.11	0.03
65	8	0.05	-0.02	0.02	0.01	0.08	0.01	0.14	0.05	0.05
66	1	-0.02	0.03	0.05	-0.11	0.13	-0.04	-0.06	0.14	0.03
67	6	-0.14	0.04	0.01	-0.10	0.09	0.02	-0.19	0.14	0.00
68	1	-0.18	0.03	-0.02	-0.03	0.02	0.09	-0.18	0.09	0.02
69	1	-0.15	0.08	0.05	-0.07	0.15	-0.09	-0.18	0.25	-0.04
70	1	-0.13	0.02	-0.01	-0.24	0.09	0.05	-0.29	0.11	0.00
71	6	-0.11	-0.02	-0.05	0.08	-0.04	0.12	-0.01	-0.02	0.04
72	1	-0.10	-0.02	-0.10	0.11	-0.08	0.17	0.00	-0.02	0.00
73	1	-0.16	-0.03	-0.03	0.16	-0.02	0.08	-0.02	-0.06	0.04
74	1	-0.11	-0.02	-0.05	0.03	-0.06	0.15	-0.02	-0.02	0.09

7

8

9

A

A

A

Frequencies --	71.4079	76.5080	90.6128
Red. masses --	4.4575	4.6773	4.8824
Frc consts --	0.0134	0.0161	0.0236
IR Inten --	4.1341	0.0831	1.4905
Raman Activ --	0.2454	1.3810	0.4617
Depolar (P) --	0.7196	0.7296	0.3180
Depolar (U) --	0.8369	0.8436	0.4825

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.02	0.03	-0.03	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00
2	6	0.02	0.01	0.03	-0.03	0.00	0.01	0.02	-0.02	0.01
3	6	0.01	0.00	0.01	-0.03	0.03	-0.03	0.00	-0.01	-0.03
4	6	-0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.03	0.03
5	6	-0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.01	0.05	0.04	0.03	0.01
6	6	0.01	0.00	-0.02	-0.04	0.06	0.04	0.03	0.09	-0.02
7	8	0.14	-0.05	0.12	-0.03	0.00	0.02	0.04	-0.03	0.02
8	6	-0.04	0.04	-0.03	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.01
9	6	0.01	0.00	0.07	-0.01	0.01	-0.02	0.02	-0.02	0.02
10	1	0.00	-0.02	0.06	-0.01	0.02	-0.02	0.04	-0.03	0.01
11	8	0.01	0.01	0.09	0.00	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	0.01
12	6	0.00	0.00	0.06	-0.01	0.03	-0.03	0.03	-0.03	0.06
13	1	-0.01	-0.01	0.06	-0.01	0.03	-0.04	0.04	-0.04	0.07
14	6	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	0.08	0.04	0.06	0.02
15	8	-0.01	0.01	0.01	0.16	-0.09	-0.11	0.01	-0.07	-0.01
16	6	0.00	-0.06	-0.13	-0.02	-0.02	0.01	0.01	0.01	0.01

17	1	-0.03	-0.01	-0.16	-0.01	-0.05	0.01	0.01	-0.02	0.00
18	1	0.05	-0.15	-0.07	-0.02	-0.01	0.00	0.02	0.03	-0.01
19	1	0.00	-0.10	-0.24	-0.04	-0.02	0.03	0.00	0.01	0.03
20	6	-0.01	0.02	0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.01
21	1	-0.04	0.04	0.07	-0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.02
22	6	0.01	0.03	0.04	-0.05	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01
23	1	0.03	0.06	0.06	-0.06	-0.02	0.02	-0.01	-0.03	0.02
24	1	-0.02	0.04	0.05	-0.03	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.01
25	1	0.02	0.02	0.03	-0.07	0.03	0.02	-0.03	0.00	0.01
26	6	0.02	0.01	-0.07	-0.02	0.06	-0.08	0.00	0.09	-0.10
27	1	0.04	0.03	-0.09	0.00	0.13	-0.13	0.00	0.14	-0.12
28	1	0.00	-0.03	-0.09	-0.05	-0.02	-0.13	-0.01	0.04	-0.12
29	6	-0.02	0.06	0.06	0.01	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.00
30	1	-0.03	0.12	0.08	0.02	-0.02	-0.03	-0.02	-0.01	0.01
31	1	-0.01	0.04	0.06	0.01	-0.03	-0.02	-0.01	0.01	-0.01
32	6	-0.16	0.11	-0.10	-0.01	-0.03	0.01	0.01	-0.01	0.01
33	1	-0.25	0.18	-0.17	0.00	-0.04	0.01	0.01	-0.01	0.01
34	6	-0.14	0.10	-0.07	-0.02	-0.02	0.01	0.02	-0.02	0.01
35	1	-0.22	0.15	-0.11	-0.02	-0.03	0.02	0.03	-0.02	0.02
36	6	-0.03	-0.04	0.03	0.03	0.02	-0.02	0.00	-0.10	0.03
37	1	-0.06	-0.05	0.04	0.03	0.01	-0.01	-0.01	-0.12	0.06
38	1	-0.03	-0.05	0.01	0.06	0.01	-0.02	-0.01	-0.12	-0.02
39	1	-0.03	-0.02	0.05	0.04	0.04	-0.05	0.00	-0.11	0.04
40	6	0.02	0.01	-0.04	-0.03	0.06	-0.07	-0.01	0.06	-0.11
41	1	0.04	0.03	-0.05	-0.02	0.06	-0.07	-0.01	0.09	-0.15
42	6	0.01	0.05	0.00	-0.08	0.17	0.07	0.02	0.13	-0.01
43	1	0.01	0.07	-0.01	-0.10	0.22	0.06	-0.01	0.17	0.00
44	1	0.01	0.05	0.04	-0.08	0.17	0.16	0.04	0.14	0.03
45	1	0.01	0.06	-0.01	-0.09	0.19	0.02	0.01	0.12	-0.04
46	6	-0.02	-0.03	0.02	-0.04	-0.05	0.13	0.08	0.07	-0.01
47	1	-0.02	-0.03	0.03	-0.05	-0.07	0.16	0.10	0.05	-0.01
48	6	-0.01	-0.03	0.01	-0.08	-0.06	0.19	0.09	0.12	-0.03
49	1	-0.02	-0.05	0.01	-0.06	-0.14	0.25	0.10	0.17	-0.05
50	1	-0.02	-0.01	0.03	-0.14	0.01	0.25	0.13	0.09	-0.06
51	6	0.00	-0.02	-0.01	-0.05	-0.02	0.11	0.05	0.11	0.00
52	1	0.01	-0.03	-0.03	-0.01	-0.08	0.06	0.07	0.13	0.03
53	6	-0.04	0.00	0.01	0.06	-0.05	0.03	0.11	0.00	0.05
54	1	-0.05	0.00	0.02	0.04	-0.04	0.07	0.16	0.02	0.08
55	6	-0.04	0.02	0.02	0.17	-0.09	-0.08	0.09	-0.07	0.03
56	1	-0.06	0.03	0.03	0.25	-0.11	-0.16	0.12	-0.13	0.04
57	6	0.01	0.00	-0.01	0.05	-0.05	0.00	-0.01	0.01	-0.01
58	1	0.03	-0.01	-0.02	0.04	-0.04	-0.02	-0.07	0.02	-0.04
59	8	-0.01	-0.02	-0.03	-0.06	0.04	-0.05	-0.04	-0.04	-0.11
60	8	0.01	0.00	0.05	0.01	0.02	-0.04	-0.02	-0.05	0.08
61	8	-0.02	-0.04	0.00	0.02	-0.09	0.05	0.01	0.07	0.00
62	6	0.07	-0.04	0.02	0.03	0.02	-0.03	-0.13	-0.05	0.04
63	6	0.02	-0.01	-0.04	0.03	0.01	-0.03	-0.09	-0.03	0.01
64	6	0.06	-0.04	-0.01	0.03	0.02	-0.02	-0.06	-0.08	0.00
65	8	0.14	-0.11	0.03	0.04	0.02	-0.03	-0.23	-0.06	0.02
66	1	0.14	-0.09	0.05	0.04	0.02	-0.02	-0.06	-0.12	0.01
67	6	0.03	-0.01	-0.06	0.02	0.01	0.00	0.01	-0.08	-0.04
68	1	-0.09	0.07	-0.17	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.07

69	1	-0.02	-0.04	0.09	0.02	0.00	0.02	0.00	-0.14	0.02
70	1	0.18	-0.05	-0.13	0.03	0.02	0.01	0.11	-0.09	-0.07
71	6	-0.08	0.04	-0.13	0.03	0.01	-0.03	-0.11	0.01	-0.01
72	1	-0.09	0.06	-0.19	0.11	-0.11	0.06	-0.23	0.19	-0.13
73	1	-0.17	0.06	-0.09	0.08	0.17	-0.02	-0.19	-0.21	-0.01
74	1	-0.06	0.05	-0.19	-0.10	-0.04	-0.12	0.10	0.08	0.11

		10		11		12
		A		A		A
Frequencies --		104.4721		119.0906		123.1672
Red. masses --		2.5173		1.1730		2.4880
Frc consts --		0.0162		0.0098		0.0222
IR Inten --		0.6525		0.9543		0.3141
Raman Activ --		1.0657		0.6192		1.0485
Depolar (P) --		0.5994		0.7438		0.7454
Depolar (U) --		0.7495		0.8531		0.8541

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.01	0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
3	6	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.00
4	6	0.01	0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.02
5	6	0.00	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
6	6	0.01	0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.00
7	8	0.02	0.02	0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.00
8	6	0.02	0.00	0.02	0.01	-0.01	0.01	-0.03	0.04	-0.03
9	6	0.02	0.01	0.03	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01
10	1	0.00	0.01	0.05	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.02
11	8	0.04	0.01	0.05	0.02	-0.01	0.01	-0.06	0.02	-0.04
12	6	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.02
13	1	-0.02	0.04	-0.06	0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.02
14	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.03	0.00
15	8	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.01
16	6	0.03	-0.07	-0.02	0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.14	-0.03
17	1	0.02	-0.03	-0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.02	0.09	-0.06
18	1	0.04	-0.13	0.03	0.01	-0.05	0.01	0.00	0.23	-0.09
19	1	0.02	-0.09	-0.09	0.00	-0.04	-0.02	0.01	0.17	0.08
20	6	0.03	0.01	0.03	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.01	-0.01
21	1	0.03	0.02	0.03	0.01	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.00
22	6	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.03	0.00
23	1	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.04	-0.01
24	1	-0.03	-0.02	0.03	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.04	-0.01
25	1	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.04	0.02	0.01
26	6	0.01	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.01
27	1	0.02	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.02	0.02
28	1	0.00	0.03	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.03	0.02
29	6	0.05	0.01	0.06	0.02	-0.01	0.01	-0.09	0.03	-0.06
30	1	0.07	0.04	0.05	0.03	0.00	0.01	-0.14	0.00	-0.03
31	1	0.06	0.00	0.08	0.03	-0.02	0.02	-0.11	0.06	-0.11
32	6	-0.04	0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
33	1	-0.07	0.07	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.02
34	6	-0.06	0.07	-0.04	-0.01	0.01	-0.01	0.04	-0.03	0.03
35	1	-0.11	0.11	-0.07	-0.02	0.01	-0.01	0.08	-0.05	0.05
36	6	0.00	0.05	0.01	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.03	0.02

37	1	0.01	0.07	-0.01	0.00	0.02	0.00	-0.02	-0.05	0.03
38	1	-0.02	0.07	0.02	0.00	0.02	0.01	-0.01	-0.05	0.00
39	1	-0.01	0.03	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.02
40	6	0.01	0.02	0.02	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.01
41	1	0.01	0.01	0.03	0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.03	-0.03
42	6	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.00
43	1	-0.02	0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00
44	1	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.01	-0.01
45	1	-0.01	0.00	-0.03	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00
46	6	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.02	0.00
47	1	-0.02	0.00	0.03	-0.01	-0.01	0.02	0.02	0.01	0.02
48	6	-0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.04	0.06	-0.03
49	1	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.03	0.09	-0.05
50	1	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.08	0.04	-0.04
51	6	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.05	-0.01
52	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.07	0.01
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.01	0.02
54	1	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.06	0.02	0.03
55	6	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.01
56	1	0.00	-0.02	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.02	-0.05	0.02
57	6	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.01	-0.02
58	1	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.02	-0.03
59	8	0.00	0.03	0.03	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.02	-0.02
60	8	0.04	-0.07	-0.06	0.01	0.00	-0.01	-0.03	-0.02	0.03
61	8	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	0.02	0.00
62	6	-0.04	-0.04	-0.06	-0.02	0.01	0.00	0.05	-0.06	0.01
63	6	-0.01	-0.07	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.03	-0.05	0.00
64	6	-0.04	-0.05	-0.02	-0.02	0.01	-0.02	0.01	-0.03	0.00
65	8	-0.10	-0.01	-0.07	-0.05	0.02	-0.01	0.12	-0.10	0.03
66	1	-0.08	0.01	-0.07	-0.02	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.00
67	6	-0.02	-0.09	0.08	-0.01	0.01	-0.01	-0.05	-0.04	0.05
68	1	0.14	-0.26	0.25	-0.37	0.22	-0.34	-0.17	-0.04	-0.04
69	1	0.05	-0.04	-0.16	-0.16	-0.19	0.49	-0.10	-0.06	0.20
70	1	-0.27	-0.01	0.20	0.54	-0.03	-0.14	0.07	-0.03	0.04
71	6	0.06	-0.11	0.04	0.03	0.00	0.03	0.06	-0.07	0.02
72	1	0.23	-0.35	0.26	0.08	-0.08	0.12	0.26	-0.36	0.25
73	1	0.22	0.21	0.03	0.10	0.10	0.02	0.21	0.32	0.03
74	1	-0.22	-0.20	-0.13	-0.05	-0.03	-0.01	-0.27	-0.18	-0.20

		13			14			15		
		A			A			A		
	Frequencies --	135.9039			145.8491			166.4368		
	Red. masses --	3.0160			2.0576			2.8850		
	Frc consts --	0.0328			0.0258			0.0471		
	IR Inten --	1.1957			0.2125			1.4916		
	Raman Activ --	1.0141			0.5359			1.0724		
	Depolar (P) --	0.7131			0.6401			0.6134		
	Depolar (U) --	0.8325			0.7806			0.7604		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.02	-0.02	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.06	-0.03
2	6	0.05	0.00	0.00	0.03	-0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.00
3	6	-0.02	0.00	-0.04	-0.01	-0.02	-0.04	0.01	0.03	0.00
4	6	-0.02	-0.01	-0.04	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	0.01	0.02

5	6	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01
6	6	-0.06	-0.03	0.05	-0.02	-0.03	0.02	0.02	0.02	-0.01
7	8	0.12	-0.04	0.05	0.08	-0.05	0.03	-0.06	0.04	0.01
8	6	0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.02
9	6	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.02	-0.06
10	1	-0.05	-0.01	-0.01	-0.03	-0.03	-0.02	0.01	-0.01	-0.08
11	8	-0.01	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.06
12	6	-0.03	-0.02	-0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02
13	1	-0.05	-0.01	-0.06	-0.01	-0.01	0.02	0.05	0.00	0.04
14	6	-0.04	0.00	0.07	0.00	0.00	0.03	0.02	0.02	-0.04
15	8	0.06	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.01	-0.04	-0.01	-0.01
16	6	-0.01	-0.02	0.02	-0.04	-0.07	0.05	-0.05	-0.14	0.03
17	1	0.00	0.04	0.06	-0.02	-0.01	0.12	-0.01	0.00	0.13
18	1	-0.04	-0.08	0.06	-0.10	-0.16	0.11	-0.13	-0.31	0.15
19	1	0.00	-0.04	-0.05	-0.05	-0.10	-0.04	-0.04	-0.20	-0.18
20	6	-0.01	0.02	-0.02	-0.02	0.00	-0.03	-0.02	0.04	-0.08
21	1	0.01	0.02	-0.04	-0.01	0.01	-0.04	0.00	0.05	-0.09
22	6	-0.01	0.05	0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.05	0.17	0.00
23	1	-0.01	0.04	0.03	-0.04	-0.04	-0.01	-0.06	-0.05	-0.04
24	1	-0.01	0.08	-0.01	0.03	0.04	-0.04	0.27	0.31	-0.18
25	1	-0.01	0.07	0.03	-0.04	0.05	0.03	-0.01	0.33	0.26
26	6	-0.04	-0.03	0.06	-0.02	-0.03	0.04	0.01	0.02	0.03
27	1	-0.10	-0.04	0.10	-0.07	-0.04	0.07	-0.01	0.00	0.06
28	1	0.03	-0.02	0.10	0.03	-0.02	0.06	0.03	0.06	0.06
29	6	0.03	0.03	0.03	0.04	-0.01	0.04	0.11	-0.01	0.01
30	1	0.07	0.05	0.01	0.09	0.02	0.01	0.22	0.04	-0.05
31	1	0.04	0.02	0.08	0.06	-0.03	0.09	0.14	-0.05	0.12
32	6	0.01	0.04	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.02
33	1	-0.01	0.06	-0.02	0.01	0.02	0.00	0.01	-0.04	-0.02
34	6	0.02	0.03	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.03	0.01
35	1	0.02	0.03	-0.02	0.03	0.00	-0.02	0.03	-0.06	0.04
36	6	-0.01	-0.02	-0.04	0.00	-0.05	-0.02	0.00	0.00	0.02
37	1	0.01	-0.01	-0.04	0.01	-0.06	0.00	-0.02	-0.01	0.03
38	1	-0.02	-0.01	-0.04	0.00	-0.06	-0.04	0.02	-0.01	0.01
39	1	-0.01	-0.04	-0.05	0.00	-0.06	-0.03	0.01	0.03	0.02
40	6	-0.03	-0.01	-0.03	-0.02	-0.02	-0.03	0.01	0.03	0.00
41	1	-0.04	0.01	-0.06	-0.03	0.00	-0.06	0.00	0.05	-0.02
42	6	-0.10	-0.05	0.03	-0.01	-0.06	0.01	0.02	-0.01	-0.02
43	1	-0.11	-0.07	0.05	0.00	-0.09	0.02	0.04	-0.05	-0.01
44	1	-0.10	-0.05	0.01	-0.02	-0.06	-0.02	0.01	-0.02	-0.06
45	1	-0.10	-0.05	0.01	-0.01	-0.06	0.02	0.03	-0.01	-0.01
46	6	0.02	0.07	-0.05	0.03	0.02	-0.03	-0.02	-0.03	0.05
47	1	0.05	0.09	-0.11	0.05	0.02	-0.05	-0.04	-0.05	0.09
48	6	0.00	0.04	-0.01	0.03	0.02	-0.03	-0.01	-0.01	0.02
49	1	0.03	0.08	0.01	0.04	0.07	-0.04	-0.02	-0.03	0.01
50	1	-0.03	0.00	-0.06	0.05	-0.01	-0.06	0.01	0.02	0.06
51	6	-0.05	0.01	0.07	0.00	0.01	0.02	0.01	0.02	-0.03
52	1	-0.05	0.04	0.10	-0.01	0.04	0.05	0.00	0.00	-0.05
53	6	-0.02	0.01	0.02	0.01	0.00	0.01	0.02	0.01	-0.01
54	1	-0.04	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01	0.04	0.01	0.00
55	6	0.05	0.01	-0.03	0.02	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.01
56	1	0.09	0.02	-0.08	0.04	0.00	-0.01	-0.03	-0.03	0.04



57	6	0.00	0.01	0.05	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.01	-0.04
58	1	0.00	0.01	0.06	0.01	0.00	0.03	-0.03	0.01	-0.05
59	8	0.01	-0.03	-0.06	0.01	-0.04	-0.05	0.04	0.01	-0.01
60	8	-0.01	-0.03	-0.07	-0.04	0.04	0.02	-0.09	0.03	0.07
61	8	0.01	0.11	0.03	0.01	0.04	0.01	-0.02	-0.06	-0.01
62	6	0.02	-0.02	-0.03	-0.03	0.04	0.01	-0.02	-0.02	0.02
63	6	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.05	-0.01	-0.04	-0.01	0.00
64	6	-0.05	0.00	-0.01	0.03	0.03	0.00	-0.04	-0.01	-0.01
65	8	0.07	0.00	-0.03	-0.04	0.03	0.01	0.06	-0.09	0.04
66	1	-0.08	0.04	-0.05	0.05	0.01	0.02	-0.07	-0.01	-0.03
67	6	-0.02	-0.02	0.03	0.00	0.03	0.00	0.01	-0.04	0.03
68	1	-0.13	0.03	-0.06	0.02	0.00	0.03	0.04	-0.05	0.05
69	1	-0.07	-0.12	0.19	0.01	0.08	-0.03	0.02	-0.10	0.01
70	1	0.16	-0.01	0.02	-0.06	0.03	0.01	0.03	-0.01	0.06
71	6	0.06	-0.12	0.06	-0.02	0.11	-0.03	0.00	-0.03	0.03
72	1	-0.10	0.11	-0.11	0.19	-0.19	0.22	-0.04	0.03	0.01
73	1	0.02	-0.49	0.01	0.09	0.57	0.01	0.01	-0.12	0.01
74	1	0.32	-0.04	0.34	-0.35	0.00	-0.35	0.06	-0.01	0.11

		16				17				18		
		A				A				A		
Frequencies --		169.3944				187.5221				190.1561		
Red. masses --		4.3090				1.9453				2.6596		
Frc consts --		0.0728				0.0403				0.0567		
IR Inten --		0.5194				0.6522				1.1203		
Raman Activ --		1.5299				1.2945				0.2790		
Depolar (P) --		0.3876				0.3518				0.5338		
Depolar (U) --		0.5587				0.5205				0.6961		
Atom	AN	X	Y	Z		X	Y	Z		X	Y	Z
1	6	-0.03	-0.02	0.02		0.00	0.00	0.02		0.00	0.01	0.00
2	6	-0.02	0.01	0.00		-0.04	0.01	0.02		0.00	0.00	0.03
3	6	-0.02	-0.03	0.00		0.00	-0.01	0.00		-0.01	-0.01	-0.02
4	6	0.00	-0.02	-0.04		0.01	-0.01	-0.01		-0.01	-0.02	-0.02
5	6	0.03	-0.06	-0.01		0.01	-0.02	-0.01		-0.01	-0.02	-0.01
6	6	0.05	0.00	-0.04		0.02	-0.03	-0.01		-0.03	0.00	0.00
7	8	0.04	-0.03	0.02		-0.08	0.03	0.00		-0.05	0.02	0.02
8	6	-0.06	0.02	0.05		-0.03	0.01	0.01		0.00	0.02	-0.01
9	6	-0.07	0.03	0.00		-0.01	0.01	0.02		0.01	-0.02	0.04
10	1	-0.09	0.07	0.01		-0.02	0.01	0.02		-0.03	-0.05	0.05
11	8	-0.10	0.03	-0.02		0.00	0.01	0.02		0.06	-0.01	0.10
12	6	-0.07	0.01	-0.06		-0.01	0.01	0.00		0.00	-0.02	-0.02
13	1	-0.12	0.01	-0.06		-0.03	0.00	0.00		-0.04	0.00	-0.04
14	6	0.09	0.07	-0.01		0.02	-0.07	0.02		-0.01	0.07	0.00
15	8	-0.01	-0.04	0.04		0.05	0.03	0.04		-0.03	-0.03	-0.03
16	6	-0.12	0.01	0.13		-0.05	0.00	0.03		0.03	0.03	-0.06
17	1	-0.07	0.07	0.22		-0.03	-0.24	-0.04		0.01	-0.22	-0.19
18	1	-0.21	-0.04	0.17		0.06	0.18	-0.10		0.19	0.22	-0.20
19	1	-0.11	-0.01	0.07		-0.19	0.06	0.24		-0.08	0.09	0.16
20	6	-0.06	0.00	0.03		-0.02	0.01	0.02		0.01	0.01	0.00
21	1	-0.06	-0.02	0.02		-0.03	0.01	0.03		0.00	0.02	0.01
22	6	-0.06	-0.06	0.01		0.03	0.03	0.03		0.03	0.09	0.04
23	1	-0.06	-0.07	0.02		-0.15	-0.30	-0.06		-0.09	-0.15	-0.02
24	1	-0.07	-0.10	0.04		0.37	0.16	-0.17		0.28	0.22	-0.14

25	1	-0.08	-0.07	-0.03	-0.11	0.27	0.32	-0.04	0.26	0.29
26	6	-0.01	-0.01	-0.03	0.02	-0.02	-0.08	-0.04	0.00	0.07
27	1	0.01	0.01	-0.05	0.07	0.02	-0.13	-0.11	-0.05	0.14
28	1	-0.06	0.01	-0.05	-0.03	-0.08	-0.13	0.03	0.06	0.14
29	6	-0.04	0.01	0.03	-0.02	0.01	0.01	-0.01	0.03	0.04
30	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.02	-0.05	0.06	0.07
31	1	-0.04	0.00	0.06	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.03	0.00
32	6	-0.05	0.05	0.03	-0.04	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.00
33	1	-0.06	0.08	0.03	-0.06	0.01	0.00	-0.04	0.01	-0.02
34	6	-0.08	0.07	-0.03	-0.05	0.01	0.01	0.02	-0.02	0.03
35	1	-0.10	0.11	-0.06	-0.06	0.02	0.01	0.03	-0.03	0.05
36	6	0.05	0.02	-0.04	0.02	-0.04	-0.01	-0.01	-0.05	-0.03
37	1	0.06	0.03	-0.05	0.13	0.00	-0.01	0.05	-0.03	-0.02
38	1	0.08	0.03	-0.01	-0.06	0.02	0.00	-0.07	-0.01	-0.03
39	1	0.06	0.05	-0.07	0.01	-0.16	-0.04	-0.02	-0.13	-0.03
40	6	-0.02	-0.04	0.03	0.02	-0.02	-0.02	-0.03	0.00	-0.01
41	1	-0.02	-0.08	0.06	0.04	-0.03	0.00	-0.06	0.02	-0.05
42	6	0.09	-0.05	-0.05	0.02	0.03	0.01	-0.02	-0.08	-0.03
43	1	0.06	-0.04	-0.04	0.01	0.06	0.00	-0.02	-0.11	-0.01
44	1	0.15	-0.05	-0.08	0.02	0.03	0.06	0.00	-0.08	-0.09
45	1	0.07	-0.12	-0.04	0.01	0.04	0.00	-0.02	-0.12	-0.01
46	6	0.07	-0.09	0.06	0.03	0.02	-0.06	0.01	-0.05	0.05
47	1	0.10	-0.15	0.12	0.03	0.05	-0.11	0.02	-0.09	0.10
48	6	0.13	0.04	0.01	0.02	-0.02	-0.06	0.02	0.02	0.04
49	1	0.11	0.08	-0.04	0.02	0.00	-0.06	0.02	0.03	0.04
50	1	0.24	0.04	0.03	0.00	-0.06	-0.10	0.06	0.05	0.07
51	6	0.08	0.07	-0.03	0.03	-0.06	0.01	-0.01	0.06	0.00
52	1	0.06	0.08	-0.04	0.05	-0.04	0.03	-0.04	0.05	-0.02
53	6	0.11	0.03	0.06	-0.02	-0.03	-0.01	0.03	0.03	0.03
54	1	0.17	0.05	0.10	-0.05	-0.05	-0.05	0.07	0.05	0.06
55	6	0.05	-0.04	0.09	0.00	0.03	0.00	0.02	-0.03	0.01
56	1	0.04	-0.09	0.14	-0.02	0.08	-0.01	0.04	-0.08	0.02
57	6	0.02	0.03	-0.02	0.06	-0.03	0.05	-0.05	0.04	-0.03
58	1	-0.02	0.04	-0.06	0.10	-0.04	0.08	-0.09	0.04	-0.07
59	8	-0.05	0.01	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.01	-0.04	-0.04
60	8	-0.03	0.02	-0.08	0.01	0.01	-0.01	0.06	-0.04	-0.07
61	8	0.01	-0.14	-0.03	0.03	0.06	0.01	-0.01	-0.08	-0.02
62	6	0.01	0.03	-0.06	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.01	-0.01
63	6	-0.01	0.02	-0.04	-0.01	0.01	-0.03	0.04	-0.01	0.03
64	6	-0.02	0.04	-0.03	-0.02	0.02	-0.02	0.05	-0.02	0.03
65	8	0.06	0.04	-0.05	0.00	-0.01	-0.02	-0.04	0.09	-0.02
66	1	-0.05	0.08	-0.06	-0.03	0.04	-0.04	0.08	-0.04	0.06
67	6	0.02	0.01	0.04	0.00	-0.01	0.03	-0.01	0.03	-0.06
68	1	0.03	-0.01	0.05	0.00	-0.04	0.04	-0.03	0.07	-0.08
69	1	0.03	-0.06	0.05	0.00	-0.04	0.04	-0.01	0.11	-0.06
70	1	0.06	0.06	0.08	0.02	0.03	0.07	-0.04	-0.04	-0.12
71	6	0.03	-0.03	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.02
72	1	-0.05	0.09	-0.09	0.02	-0.02	0.01	-0.02	0.02	-0.06
73	1	0.01	-0.21	-0.04	0.04	0.00	-0.02	-0.06	-0.01	0.01
74	1	0.15	0.02	0.14	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01	-0.03

19

A

20

A

21

A

Frequencies --	199.4551	202.2237	209.2974
Red. masses --	2.8737	2.4440	2.6189
Frc consts --	0.0674	0.0589	0.0676
IR Inten --	3.7040	1.4409	0.4059
Raman Activ --	0.9640	0.6994	1.3572
Depolar (P) --	0.1838	0.3895	0.7479
Depolar (U) --	0.3106	0.5606	0.8557

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	-0.03	-0.03
2	6	-0.02	0.03	0.01	0.01	0.00	-0.05	0.04	-0.06	-0.02
3	6	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.02	0.03
4	6	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.02	-0.01	0.00	0.01
5	6	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.03	0.03	-0.01	0.00	0.03
6	6	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.03	0.02	0.01	0.02	0.02
7	8	-0.05	0.05	-0.01	0.14	-0.07	0.01	0.03	-0.05	-0.05
8	6	-0.01	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.06	0.02	-0.04
9	6	-0.01	0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.03	-0.03	-0.06	0.02
10	1	0.02	0.07	-0.03	0.03	0.01	-0.04	-0.07	-0.14	0.02
11	8	-0.08	0.03	-0.08	-0.02	0.00	-0.06	0.03	-0.04	0.12
12	6	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.01
13	1	-0.04	0.00	-0.03	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02
14	6	0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.02	-0.04	0.01	0.00	-0.02
15	8	0.03	0.01	0.02	-0.05	-0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.00
16	6	-0.03	-0.03	0.04	-0.04	0.01	0.09	-0.08	0.01	-0.01
17	1	-0.01	0.24	0.17	0.00	-0.29	0.04	-0.07	0.37	0.14
18	1	-0.19	-0.26	0.21	0.05	0.26	-0.09	-0.29	-0.25	0.19
19	1	0.08	-0.11	-0.22	-0.22	0.10	0.38	0.09	-0.08	-0.32
20	6	-0.01	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.06	-0.02	-0.05
21	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.08	-0.01	-0.03
22	6	0.01	0.05	0.04	0.02	-0.07	-0.08	0.08	0.04	-0.05
23	1	0.03	0.07	0.05	-0.14	-0.33	-0.18	0.03	-0.02	-0.11
24	1	-0.01	0.08	0.03	0.30	-0.03	-0.18	0.19	0.10	-0.13
25	1	0.03	0.05	0.05	-0.11	0.10	0.09	0.10	0.08	0.08
26	6	0.01	-0.01	-0.04	0.01	0.02	0.03	0.01	0.01	-0.03
27	1	0.04	0.01	-0.07	0.01	0.02	0.03	0.07	0.05	-0.08
28	1	-0.02	-0.04	-0.07	0.00	0.04	0.03	-0.06	-0.02	-0.08
29	6	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.02	-0.02	-0.08	0.03	0.03
30	1	0.06	-0.03	-0.06	0.06	-0.03	-0.05	-0.14	0.08	0.09
31	1	0.01	0.00	0.03	0.03	-0.03	0.01	-0.09	0.04	-0.02
32	6	-0.01	0.02	0.00	0.03	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.03
33	1	-0.02	0.02	0.00	0.05	0.01	0.02	0.00	0.03	-0.03
34	6	-0.03	0.03	0.00	-0.04	0.05	-0.07	0.11	-0.07	0.02
35	1	-0.06	0.04	-0.01	-0.05	0.08	-0.10	0.19	-0.11	0.06
36	6	0.00	0.02	0.00	0.04	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.01
37	1	-0.04	0.01	0.00	0.18	0.06	0.00	0.11	0.07	-0.02
38	1	0.04	0.00	0.01	-0.06	0.08	0.05	-0.11	0.09	0.05
39	1	0.01	0.07	0.01	0.03	-0.14	-0.03	-0.02	-0.13	0.01
40	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.04	0.00	-0.02	0.05
41	1	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.06	0.01	-0.06	0.09
42	6	-0.01	0.02	-0.01	0.02	0.03	0.03	0.05	0.09	0.06
43	1	-0.04	0.05	0.00	0.02	0.04	0.02	0.04	0.16	0.02
44	1	0.01	0.02	0.01	0.02	0.04	0.04	0.09	0.09	0.13

45	1	-0.02	0.00	-0.04	0.02	0.04	0.03	0.04	0.06	0.04
46	6	0.02	0.00	-0.03	-0.04	0.02	0.03	-0.02	0.02	0.01
47	1	0.02	0.01	-0.04	-0.06	0.03	0.04	-0.02	0.02	0.01
48	6	0.02	0.00	-0.03	-0.05	0.00	0.04	-0.02	0.00	0.00
49	1	0.02	0.02	-0.04	-0.05	-0.06	0.05	-0.02	-0.01	0.00
50	1	0.03	-0.02	-0.05	-0.08	0.03	0.07	-0.02	0.01	0.01
51	6	0.01	-0.02	0.00	-0.02	0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.01
52	1	0.03	-0.01	0.02	-0.04	-0.01	-0.04	-0.01	0.00	-0.02
53	6	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.01	0.00	-0.01
54	1	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.01
55	6	0.01	0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00
56	1	0.01	0.03	-0.01	-0.04	-0.02	0.01	-0.03	0.00	0.02
57	6	0.02	-0.01	0.03	-0.03	0.01	-0.05	0.00	0.00	-0.02
58	1	0.04	-0.01	0.04	-0.04	0.01	-0.06	0.00	0.00	-0.03
59	8	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.04	0.05	-0.01	0.01	0.07
60	8	0.01	-0.06	-0.03	-0.01	-0.01	0.02	0.05	-0.01	-0.04
61	8	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.03	-0.02	0.02	0.03
62	6	0.04	-0.04	0.03	0.01	-0.02	0.02	0.01	0.01	-0.03
63	6	0.13	-0.08	0.10	0.03	-0.03	0.04	0.02	0.00	-0.03
64	6	0.14	-0.09	0.12	0.04	-0.04	0.04	0.01	0.02	-0.01
65	8	-0.07	0.05	0.01	-0.02	-0.01	0.01	-0.03	0.03	-0.04
66	1	0.23	-0.14	0.19	0.07	-0.06	0.06	0.02	0.04	-0.02
67	6	-0.09	0.04	-0.09	-0.03	0.01	-0.03	-0.01	0.01	0.01
68	1	-0.19	0.10	-0.18	-0.06	0.03	-0.06	-0.02	-0.01	0.01
69	1	-0.12	0.31	-0.05	-0.04	0.09	-0.02	-0.01	0.01	0.03
70	1	-0.20	-0.14	-0.26	-0.06	-0.05	-0.09	0.00	0.02	0.03
71	6	0.01	-0.05	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.01	-0.02	-0.03
72	1	0.02	-0.05	-0.07	0.00	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	-0.06
73	1	-0.09	-0.02	0.05	-0.03	-0.03	0.02	0.00	-0.04	-0.03
74	1	0.01	-0.05	-0.07	0.01	-0.02	0.00	0.02	-0.01	-0.01

22

23

24

A

A

A

Frequencies --	213.3295	231.0043	233.6059
Red. masses --	4.0031	4.0642	2.7829
Frc consts --	0.1073	0.1278	0.0895
IR Inten --	1.1328	3.5498	2.8837
Raman Activ --	0.6416	0.8619	1.8858
Depolar (P) --	0.2495	0.4002	0.2612
Depolar (U) --	0.3994	0.5716	0.4142

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.02	0.00	-0.02	0.03	-0.01	0.06	-0.03	0.06
2	6	0.02	-0.02	-0.02	-0.04	0.02	0.01	-0.01	0.02	0.03
3	6	0.02	0.00	0.03	-0.01	0.01	-0.03	0.03	-0.05	0.03
4	6	0.00	0.02	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00
5	6	0.01	0.00	-0.08	0.00	0.02	0.06	-0.01	-0.03	0.01
6	6	-0.01	0.01	-0.06	0.03	0.00	0.05	-0.03	-0.01	0.01
7	8	0.03	-0.02	-0.04	-0.04	0.01	0.06	-0.03	0.03	0.03
8	6	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.05	-0.02	0.05
9	6	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.02	0.01
10	1	-0.06	-0.04	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.03	0.12	0.02
11	8	0.03	-0.02	0.04	0.03	0.00	0.01	-0.08	0.02	-0.08
12	6	-0.02	-0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.04	-0.01	-0.02	-0.01

13	1	-0.02	0.01	-0.06	-0.04	0.04	-0.08	-0.04	-0.03	-0.01
14	6	-0.04	0.01	0.07	0.06	-0.03	-0.08	-0.06	0.05	0.00
15	8	0.05	0.00	-0.01	-0.04	0.01	0.03	-0.04	-0.01	-0.06
16	6	-0.01	0.00	-0.02	-0.04	0.05	0.06	0.09	0.00	-0.01
17	1	-0.01	-0.03	-0.03	-0.02	0.20	0.14	0.06	0.28	0.05
18	1	0.01	0.02	-0.03	-0.17	-0.03	0.12	-0.02	-0.20	0.14
19	1	-0.02	0.00	0.00	0.05	0.02	-0.03	0.26	-0.07	-0.24
20	6	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.05	-0.02	0.07
21	1	-0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.06	-0.04	0.06
22	6	0.04	-0.01	-0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.15	-0.05	-0.01
23	1	-0.01	-0.09	-0.04	0.01	0.08	-0.01	0.06	-0.13	-0.14
24	1	0.13	0.02	-0.06	-0.07	0.00	0.02	0.34	-0.03	-0.08
25	1	0.01	0.05	0.07	0.01	-0.02	-0.07	0.15	0.01	0.12
26	6	0.01	0.00	-0.07	0.00	0.01	0.04	0.01	-0.01	-0.01
27	1	0.11	0.00	-0.13	-0.08	0.03	0.08	0.04	-0.01	-0.03
28	1	-0.08	-0.02	-0.13	0.07	0.02	0.08	-0.01	-0.03	-0.03
29	6	-0.01	0.01	0.02	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03	-0.02
30	1	-0.03	0.03	0.04	-0.07	-0.02	0.00	0.01	-0.11	-0.05
31	1	-0.01	0.01	0.00	-0.04	0.00	-0.08	-0.03	0.00	-0.01
32	6	0.01	0.01	-0.02	-0.02	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.03
33	1	0.00	0.03	-0.02	0.00	-0.05	0.03	-0.02	0.00	0.02
34	6	0.04	-0.01	-0.01	-0.07	0.01	0.00	-0.06	0.04	0.00
35	1	0.05	-0.01	0.00	-0.08	0.02	-0.01	-0.13	0.09	-0.04
36	6	-0.02	0.09	-0.02	0.07	-0.02	-0.02	0.04	-0.09	-0.02
37	1	0.05	0.16	-0.09	0.11	-0.03	0.01	0.25	-0.02	-0.01
38	1	-0.09	0.16	0.05	0.08	-0.02	-0.02	-0.12	0.02	0.01
39	1	-0.03	0.01	-0.01	0.07	-0.04	-0.07	0.02	-0.32	-0.08
40	6	0.02	-0.02	0.07	-0.01	0.03	-0.08	0.02	-0.02	0.01
41	1	0.04	-0.09	0.16	-0.03	0.08	-0.14	0.00	-0.03	0.01
42	6	-0.12	0.02	-0.09	0.12	0.00	0.08	-0.06	0.05	0.03
43	1	-0.18	0.02	-0.04	0.14	0.03	0.04	-0.08	0.08	0.03
44	1	-0.14	0.02	-0.08	0.18	0.00	0.08	-0.07	0.05	0.08
45	1	-0.14	0.03	-0.18	0.12	-0.05	0.13	-0.07	0.07	-0.01
46	6	0.04	-0.01	-0.04	-0.03	0.03	0.02	0.02	-0.01	0.00
47	1	0.06	-0.03	-0.02	-0.05	0.07	-0.01	0.04	-0.01	-0.01
48	6	0.04	0.02	-0.02	-0.04	-0.03	0.02	0.02	0.03	0.00
49	1	0.06	0.06	-0.01	-0.06	-0.10	0.03	0.03	0.07	0.00
50	1	0.05	0.00	-0.04	-0.09	0.00	0.05	0.04	0.01	-0.01
51	6	0.00	0.01	0.02	0.02	-0.02	-0.03	-0.04	0.03	0.01
52	1	0.04	0.02	0.05	-0.01	-0.04	-0.06	-0.06	0.05	0.02
53	6	-0.01	0.01	0.05	0.02	-0.02	-0.06	-0.04	0.03	0.00
54	1	-0.01	0.01	0.06	0.02	-0.03	-0.08	-0.02	0.04	0.02
55	6	0.05	0.00	0.00	-0.05	0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.04
56	1	0.09	-0.01	-0.05	-0.11	0.03	0.07	0.02	-0.04	-0.06
57	6	-0.01	0.01	0.05	0.04	-0.02	-0.05	-0.08	0.03	-0.03
58	1	0.00	0.01	0.05	0.05	-0.02	-0.04	-0.10	0.03	-0.06
59	8	-0.02	0.08	0.12	0.02	-0.05	-0.11	0.02	-0.05	0.02
60	8	-0.06	-0.04	-0.03	0.07	-0.07	-0.10	0.01	-0.01	-0.02
61	8	0.02	-0.02	-0.08	0.02	0.06	0.08	-0.01	0.00	0.02
62	6	-0.05	-0.01	0.06	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.02	-0.01
63	6	-0.11	-0.02	0.10	-0.11	-0.02	0.07	-0.03	0.03	-0.02
64	6	-0.07	-0.10	0.04	-0.09	-0.08	0.01	-0.03	0.04	-0.03

65	8	0.12	0.04	0.09	0.11	0.12	0.03	0.03	0.03	0.00
66	1	-0.12	-0.21	0.04	-0.16	-0.17	-0.01	-0.05	0.05	-0.04
67	6	0.07	-0.07	-0.12	0.09	-0.07	-0.12	0.03	0.01	0.02
68	1	0.15	0.08	-0.10	0.18	0.08	-0.08	0.06	0.00	0.04
69	1	0.10	-0.11	-0.21	0.13	-0.16	-0.21	0.04	-0.06	0.00
70	1	0.07	-0.14	-0.20	0.12	-0.12	-0.17	0.06	0.05	0.06
71	6	-0.08	0.05	0.12	-0.09	-0.01	0.09	0.00	0.04	0.00
72	1	-0.04	-0.03	0.24	-0.04	-0.09	0.18	0.00	0.04	0.03
73	1	-0.02	0.22	0.12	-0.04	0.12	0.09	0.02	0.06	-0.01
74	1	-0.16	0.03	-0.01	-0.17	-0.03	0.01	-0.01	0.04	-0.01

		25			26			27		
		A			A			A		
Frequencies --		236.0090			255.9978			261.9659		
Red. masses --		3.0995			2.6410			2.9252		
Frc consts --		0.1017			0.1020			0.1183		
IR Inten --		2.7079			1.2634			3.7322		
Raman Activ --		0.8405			1.2407			1.5100		
Depolar (P) --		0.2101			0.7376			0.7083		
Depolar (U) --		0.3473			0.8490			0.8292		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.02	-0.02	-0.01	0.01	-0.02	-0.04	0.06	-0.06
2	6	-0.07	0.01	0.00	-0.03	0.01	-0.04	-0.06	0.02	0.02
3	6	0.02	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.02	0.03	-0.02
4	6	0.02	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.01
5	6	0.03	0.05	-0.08	-0.03	-0.05	0.04	-0.02	-0.04	0.03
6	6	0.01	0.03	-0.06	-0.02	-0.03	0.03	-0.01	-0.02	0.02
7	8	-0.02	-0.02	0.09	0.03	-0.02	-0.03	-0.03	0.00	0.16
8	6	-0.02	-0.01	0.01	0.04	-0.05	0.01	0.02	0.01	0.00
9	6	0.03	-0.01	0.02	0.02	-0.04	-0.02	-0.02	0.03	-0.02
10	1	0.01	-0.06	0.02	0.01	-0.07	-0.02	-0.06	-0.02	-0.01
11	8	0.11	-0.03	0.06	0.07	-0.06	0.00	0.05	0.02	0.05
12	6	0.05	0.02	0.03	0.01	-0.02	0.00	-0.04	0.02	-0.02
13	1	0.05	0.01	0.04	0.04	-0.01	0.00	-0.04	0.01	-0.01
14	6	-0.02	-0.01	0.03	-0.03	-0.01	0.03	0.00	-0.02	0.00
15	8	0.03	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01
16	6	-0.08	0.11	0.12	0.02	0.07	0.07	0.06	0.02	-0.04
17	1	-0.04	0.36	0.28	0.03	0.07	0.08	0.02	-0.02	-0.12
18	1	-0.32	0.00	0.21	-0.04	0.15	0.01	0.12	0.09	-0.09
19	1	0.09	0.08	0.01	0.08	0.10	0.16	0.08	0.05	0.03
20	6	-0.02	0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.04	-0.01	0.06	-0.04
21	1	-0.02	0.03	0.00	0.03	0.00	-0.05	0.03	0.08	-0.07
22	6	0.06	-0.01	-0.08	0.04	0.13	0.01	0.04	-0.02	-0.18
23	1	0.05	0.03	-0.16	0.06	0.16	0.03	0.09	0.18	-0.26
24	1	0.09	-0.04	-0.06	0.00	0.22	-0.05	-0.05	-0.15	-0.04
25	1	0.10	-0.04	-0.09	0.10	0.12	0.09	0.15	-0.17	-0.35
26	6	0.02	0.03	0.04	-0.01	-0.03	-0.02	-0.02	-0.02	-0.05
27	1	-0.03	-0.04	0.11	0.03	0.00	-0.06	0.05	0.02	-0.11
28	1	0.08	0.11	0.10	-0.04	-0.07	-0.05	-0.08	-0.08	-0.10
29	6	-0.05	-0.03	-0.03	0.01	-0.06	-0.03	0.09	0.04	0.05
30	1	-0.16	-0.05	0.04	-0.04	-0.09	-0.01	0.16	0.11	0.03
31	1	-0.07	-0.02	-0.16	0.00	-0.05	-0.09	0.12	-0.01	0.14
32	6	-0.02	-0.05	0.03	0.04	-0.04	0.00	0.00	-0.05	0.04

33	1	0.02	-0.10	0.05	0.08	-0.07	0.03	0.05	-0.13	0.06
34	6	-0.11	0.02	-0.03	-0.10	0.07	-0.09	-0.02	-0.05	0.04
35	1	-0.14	0.03	-0.04	-0.16	0.11	-0.13	0.04	-0.09	0.08
36	6	-0.03	-0.03	0.00	-0.06	0.06	0.05	0.05	-0.03	-0.03
37	1	0.06	0.00	0.00	-0.35	-0.03	0.04	0.24	0.03	-0.03
38	1	-0.13	0.01	-0.02	0.14	-0.08	0.01	-0.07	0.06	0.01
39	1	-0.04	-0.15	0.01	-0.03	0.36	0.13	0.03	-0.22	-0.09
40	6	0.02	0.04	-0.02	0.00	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.02
41	1	0.00	0.06	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.05
42	6	-0.07	-0.04	-0.12	0.00	0.05	0.07	0.01	0.02	0.04
43	1	-0.05	-0.16	-0.07	-0.01	0.12	0.03	-0.02	0.09	0.03
44	1	-0.17	-0.05	-0.20	0.03	0.05	0.14	0.07	0.03	0.09
45	1	-0.05	0.03	-0.12	-0.01	0.04	0.05	-0.01	-0.02	0.02
46	6	0.01	0.01	-0.02	-0.02	-0.04	0.02	0.00	-0.04	0.02
47	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.07	0.05	0.00	-0.05	0.03
48	6	-0.03	-0.03	0.05	0.06	0.04	-0.09	0.06	0.02	-0.08
49	1	-0.01	-0.11	0.11	0.03	0.22	-0.21	0.02	0.16	-0.18
50	1	-0.13	0.02	0.08	0.24	-0.05	-0.17	0.21	-0.05	-0.14
51	6	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
52	1	0.05	-0.05	-0.01	-0.02	0.08	0.07	-0.01	0.05	0.04
53	6	-0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.01
54	1	-0.02	-0.01	0.02	-0.03	-0.01	0.01	-0.02	-0.02	-0.02
55	6	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00
56	1	0.04	0.00	-0.03	0.03	0.01	-0.04	-0.01	0.02	-0.01
57	6	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.00	0.02	0.01	-0.01	0.01
58	1	0.01	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.02	0.02
59	8	0.04	0.00	-0.03	0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.05	0.02
60	8	0.02	0.01	0.04	0.03	-0.01	-0.01	-0.07	0.02	0.00
61	8	0.04	-0.02	-0.08	-0.08	-0.05	0.02	-0.03	-0.04	0.03
62	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.02	0.00	-0.01
63	6	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.01
64	6	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.03	-0.03	0.03
65	8	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
66	1	0.02	0.03	0.00	-0.02	0.02	-0.02	0.05	-0.03	0.04
67	6	-0.02	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01
68	1	-0.03	-0.02	0.02	0.03	0.01	0.01	-0.05	0.00	-0.03
69	1	-0.02	0.02	0.04	0.02	-0.03	-0.01	-0.03	0.06	0.00
70	1	-0.02	0.02	0.04	0.03	0.02	0.02	-0.05	-0.04	-0.04
71	6	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.00
72	1	0.00	0.01	-0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01
73	1	0.00	-0.04	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.04	0.00
74	1	0.03	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.02	-0.02	0.02

	28			29			30		
	A			A			A		
Frequencies --	266.7847				273.3051			284.1968	
Red. masses --	3.6000				2.9346			2.6795	
Frc consts --	0.1510				0.1292			0.1275	
IR Inten --	2.0513				0.2297			0.3323	
Raman Activ --	0.5285				1.3514			0.3686	
Depolar (P) --	0.6458				0.7488			0.7500	
Depolar (U) --	0.7848				0.8564			0.8571	
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	6	-0.01	0.01	0.00	-0.05	0.00	-0.02	-0.01	0.02	0.00
2	6	0.01	0.02	0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.03	0.03	0.00
3	6	-0.01	0.00	-0.04	-0.07	-0.01	-0.03	-0.03	0.05	-0.02
4	6	0.05	-0.02	-0.04	-0.03	-0.01	-0.04	0.01	0.02	0.01
5	6	0.04	-0.06	0.00	-0.02	0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.02
6	6	-0.03	-0.06	0.02	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.01	0.01
7	8	-0.01	0.03	0.01	0.05	-0.02	-0.02	0.04	0.02	0.00
8	6	-0.01	0.02	-0.02	0.07	-0.03	0.03	0.01	0.02	-0.03
9	6	0.05	0.02	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.07	0.03	0.01
10	1	0.05	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.12	0.05	-0.01
11	8	0.11	0.00	0.03	0.00	-0.03	-0.01	0.03	0.03	-0.06
12	6	0.04	0.00	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0.06	0.02	0.05
13	1	0.04	-0.02	0.04	0.00	-0.03	0.01	0.06	0.02	0.04
14	6	-0.07	0.05	-0.02	0.06	0.01	-0.01	-0.04	-0.05	0.04
15	8	-0.07	-0.01	-0.09	0.02	0.00	0.05	0.04	0.01	0.01
16	6	-0.05	0.04	0.04	0.14	0.06	-0.04	-0.02	-0.01	-0.01
17	1	-0.02	0.09	0.11	0.08	0.22	-0.08	0.01	0.13	0.08
18	1	-0.14	0.00	0.06	0.11	0.00	0.01	-0.12	-0.15	0.10
19	1	-0.04	0.03	0.00	0.30	0.04	-0.11	0.01	-0.06	-0.17
20	6	0.00	0.02	-0.01	0.02	-0.02	0.00	0.03	0.02	0.01
21	1	-0.02	0.03	0.01	0.07	0.00	-0.04	0.01	0.04	0.04
22	6	-0.07	0.05	0.06	-0.03	0.12	0.03	-0.11	-0.04	0.03
23	1	-0.03	0.06	0.14	0.00	0.15	0.04	-0.17	-0.20	0.04
24	1	-0.14	0.06	0.07	-0.04	0.21	-0.05	0.01	-0.03	-0.01
25	1	-0.08	0.05	0.04	0.03	0.12	0.12	-0.23	0.08	0.08
26	6	-0.04	-0.06	-0.05	-0.06	-0.01	-0.04	-0.04	0.01	0.03
27	1	0.04	0.00	-0.13	-0.02	0.05	-0.09	-0.07	0.01	0.04
28	1	-0.12	-0.13	-0.12	-0.14	-0.02	-0.09	-0.02	0.03	0.05
29	6	0.00	0.01	-0.03	0.01	-0.04	0.00	-0.03	0.00	-0.08
30	1	-0.07	0.02	0.02	0.01	-0.08	-0.01	-0.08	-0.04	-0.05
31	1	-0.01	0.00	-0.11	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.02	-0.15
32	6	0.00	0.01	-0.02	0.05	-0.02	0.03	0.03	0.02	-0.02
33	1	-0.02	0.02	-0.03	0.09	-0.06	0.05	0.04	0.01	-0.02
34	6	0.00	0.01	0.00	-0.05	0.06	-0.04	0.05	0.00	0.01
35	1	-0.02	0.01	0.00	-0.08	0.09	-0.07	0.07	-0.03	0.03
36	6	0.18	-0.05	-0.07	-0.06	-0.08	-0.04	0.00	-0.08	0.01
37	1	-0.01	-0.18	0.02	0.13	-0.01	-0.04	0.24	0.00	0.02
38	1	0.43	-0.21	-0.10	-0.23	0.03	-0.04	-0.22	0.04	0.01
39	1	0.22	0.22	-0.15	-0.08	-0.29	-0.05	-0.03	-0.36	-0.02
40	6	-0.03	-0.05	0.04	-0.08	-0.05	0.04	-0.04	0.03	0.01
41	1	-0.02	-0.12	0.12	-0.07	-0.12	0.11	-0.03	0.01	0.03
42	6	-0.02	-0.02	0.04	0.08	-0.05	-0.02	0.03	-0.04	0.00
43	1	-0.09	0.10	0.04	0.04	0.03	-0.02	0.05	-0.07	-0.01
44	1	0.11	-0.01	0.11	0.23	-0.04	-0.04	0.04	-0.05	-0.05
45	1	-0.06	-0.13	-0.01	0.05	-0.19	0.00	0.04	-0.07	0.05
46	6	0.09	-0.01	-0.04	-0.01	0.03	-0.02	-0.04	-0.04	0.05
47	1	0.13	0.02	-0.12	0.00	0.04	-0.05	-0.07	-0.07	0.12
48	6	0.04	-0.02	0.03	-0.06	-0.03	0.07	0.03	0.03	-0.08
49	1	0.09	-0.02	0.09	-0.04	-0.19	0.16	-0.02	0.19	-0.21
50	1	0.00	0.00	0.05	-0.21	0.05	0.14	0.22	-0.06	-0.15
51	6	-0.04	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01
52	1	-0.07	0.01	-0.01	0.02	-0.06	-0.05	0.03	0.05	0.06



53	6	-0.06	0.03	-0.03	0.06	0.00	0.01	-0.05	-0.03	0.00
54	1	-0.05	0.04	-0.01	0.08	0.00	0.02	-0.09	-0.04	-0.02
55	6	-0.04	-0.01	-0.07	0.02	0.00	0.05	0.00	0.01	-0.03
56	1	-0.01	-0.05	-0.08	-0.01	0.00	0.09	0.02	0.04	-0.07
57	6	-0.10	0.02	-0.06	0.05	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.06
58	1	-0.13	0.03	-0.09	0.05	0.01	0.00	0.03	-0.04	0.09
59	8	-0.05	0.08	0.07	-0.10	0.06	0.06	-0.05	0.08	0.02
60	8	0.01	0.01	0.05	-0.03	0.01	0.02	0.10	0.00	0.03
61	8	0.13	0.02	0.05	0.01	0.04	-0.01	-0.06	-0.07	-0.02
62	6	-0.01	-0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.03	0.01	0.01
63	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
64	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.01
65	8	-0.02	-0.05	0.02	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.01	0.00
66	1	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.05	0.01	-0.03
67	6	-0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.05	0.01	-0.02
68	1	-0.03	-0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.01	0.08	0.04	0.00
69	1	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.02	0.06	-0.05	-0.05
70	1	-0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.07	0.02	-0.02
71	6	0.00	0.00	0.01	0.01	0.02	0.00	-0.04	-0.06	-0.01
72	1	0.00	0.00	0.02	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.11	-0.04
73	1	0.01	0.02	0.01	0.01	0.03	0.00	-0.05	-0.06	0.00
74	1	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.02	-0.01	-0.09	-0.08	0.01

		31		32		33
		A		A		A
Frequencies --		292.5305		297.2987		303.2679
Red. masses --		2.3890		1.5186		1.4858
Frc consts --		0.1205		0.0791		0.0805
IR Inten --		2.3003		0.2628		0.2706
Raman Activ --		0.9255		0.7062		0.2252
Depolar (P) --		0.7417		0.5957		0.6361
Depolar (U) --		0.8517		0.7466		0.7776

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.02	0.03	0.01	0.00	0.01	-0.02	-0.01	-0.01
2	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00
3	6	0.00	0.03	-0.01	0.01	0.02	0.01	-0.02	0.01	0.00
4	6	0.01	0.03	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00	0.02	0.00
5	6	0.00	-0.01	0.04	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00
6	6	-0.01	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01
7	8	0.02	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.01
8	6	0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.02
9	6	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02
10	1	-0.08	0.01	0.03	0.00	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02
11	8	0.07	-0.04	0.05	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.01
12	6	-0.03	0.02	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01
13	1	-0.02	0.03	-0.04	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.01	0.02
14	6	0.03	-0.02	-0.03	-0.04	0.02	0.04	0.00	-0.02	0.01
15	8	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.01
16	6	0.06	0.01	-0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.06	0.01	-0.04
17	1	0.03	0.17	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.02	0.13	-0.05
18	1	0.00	-0.09	0.05	-0.02	-0.03	0.01	0.05	-0.08	0.03
19	1	0.15	-0.02	-0.15	-0.01	-0.02	-0.03	0.14	-0.02	-0.14
20	6	0.02	-0.03	0.03	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.03

21	1	0.03	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01	0.02
22	6	-0.03	-0.03	0.05	0.01	-0.04	-0.02	0.04	-0.05	-0.07
23	1	-0.09	-0.15	0.05	-0.02	-0.09	-0.05	-0.10	-0.25	-0.20
24	1	0.08	0.02	-0.01	0.08	-0.05	-0.03	0.30	-0.01	-0.18
25	1	-0.11	0.07	0.14	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.08	0.11
26	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.04	-0.03	0.02	-0.01
27	1	-0.04	0.02	0.01	0.03	0.02	-0.07	-0.04	0.02	0.00
28	1	0.05	-0.03	0.01	0.01	-0.06	-0.06	-0.01	0.02	0.00
29	6	-0.06	-0.03	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.02
30	1	-0.17	-0.09	0.05	-0.03	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.02
31	1	-0.09	0.01	-0.14	-0.02	0.00	-0.03	-0.03	0.03	0.03
32	6	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03
33	1	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.02	0.04
34	6	-0.01	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.02
35	1	-0.03	0.04	-0.03	0.01	-0.01	0.01	0.03	-0.01	0.02
36	6	0.10	0.12	-0.01	-0.02	0.08	0.03	0.04	0.02	-0.01
37	1	0.30	0.24	-0.09	0.02	0.13	-0.03	-0.33	-0.16	0.08
38	1	-0.01	0.25	0.13	-0.07	0.13	0.08	0.39	-0.22	-0.10
39	1	0.09	-0.06	-0.08	-0.02	0.03	0.05	0.09	0.45	-0.01
40	6	0.00	0.05	-0.07	0.02	0.03	-0.05	-0.03	0.02	-0.02
41	1	0.02	0.08	-0.10	0.04	0.07	-0.07	-0.03	0.02	-0.01
42	6	-0.04	-0.03	0.01	0.07	-0.08	-0.01	0.02	-0.04	-0.03
43	1	0.10	-0.26	0.01	-0.20	0.26	0.05	0.05	-0.11	-0.02
44	1	-0.29	-0.05	-0.09	0.60	-0.05	0.05	-0.01	-0.05	-0.10
45	1	0.04	0.18	0.09	-0.08	-0.57	-0.12	0.03	-0.03	0.02
46	6	-0.01	-0.01	0.04	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
47	1	-0.02	-0.01	0.04	0.00	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.00
48	6	0.03	0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00
49	1	0.00	0.10	-0.11	-0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.00	-0.01
50	1	0.13	-0.03	-0.07	-0.03	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00
51	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
52	1	-0.03	0.03	0.01	0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00
53	6	0.01	-0.01	-0.03	-0.03	0.01	0.03	0.00	-0.01	0.00
54	1	0.01	-0.01	-0.04	-0.03	0.01	0.04	-0.02	-0.01	-0.01
55	6	-0.02	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
56	1	-0.05	0.01	0.03	0.06	-0.02	-0.05	0.00	0.01	-0.01
57	6	0.02	-0.01	-0.02	-0.04	0.01	0.02	0.01	-0.01	0.02
58	1	0.03	-0.01	-0.01	-0.04	0.01	0.02	0.02	-0.01	0.03
59	8	-0.03	0.01	-0.06	0.00	-0.01	-0.04	-0.05	0.03	-0.01
60	8	-0.11	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.01
61	8	0.00	-0.01	0.04	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00
62	6	-0.04	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
63	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.04	-0.03	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
65	8	0.01	-0.05	0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00
66	1	0.07	-0.02	0.04	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
67	6	-0.06	-0.01	0.02	-0.02	-0.01	0.02	0.02	0.01	-0.01
68	1	-0.11	-0.05	0.00	-0.04	-0.03	0.01	0.03	0.02	0.00
69	1	-0.08	0.07	0.06	-0.03	0.00	0.03	0.02	-0.01	-0.02
70	1	-0.09	-0.03	0.01	-0.03	0.00	0.03	0.02	0.01	-0.01
71	6	0.04	0.07	0.01	0.02	0.05	0.01	-0.01	-0.04	0.00
72	1	-0.02	0.15	0.04	-0.02	0.09	0.03	0.01	-0.07	-0.02

73	1	0.05	0.02	0.00	0.02	0.03	0.00	-0.02	-0.03	0.00
74	1	0.14	0.10	0.02	0.07	0.07	0.00	-0.05	-0.05	0.00
		34			35			36		
		A			A			A		
Frequencies --		309.4370			318.4041			324.3715		
Red. masses --		2.7679			2.4153			2.3640		
Frc consts --		0.1562			0.1443			0.1465		
IR Inten --		1.4908			1.0386			2.7224		
Raman Activ --		0.8910			0.6364			1.5504		
Depolar (P) --		0.1500			0.6941			0.7497		
Depolar (U) --		0.2609			0.8195			0.8569		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.01	0.02	0.00	-0.03	0.01	-0.03	-0.01	-0.02
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	-0.02	-0.03	-0.01
3	6	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.01
4	6	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.01
5	6	-0.01	-0.02	0.01	0.03	0.05	-0.01	0.02	0.01	0.00
6	6	-0.01	-0.03	0.01	0.04	0.07	-0.03	0.02	0.02	-0.03
7	8	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.04	-0.04	-0.01	-0.04	-0.02
8	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.01	0.00	0.01
9	6	-0.02	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	0.00	-0.01	-0.03	0.01
10	1	-0.05	0.00	0.01	-0.06	-0.02	0.01	0.03	-0.05	-0.01
11	8	0.03	-0.02	0.02	-0.03	-0.02	0.03	-0.09	0.00	-0.01
12	6	-0.02	0.03	0.00	-0.02	0.00	-0.02	0.02	-0.02	0.02
13	1	0.03	-0.01	0.04	-0.01	-0.02	0.00	0.02	-0.01	0.00
14	6	-0.02	0.05	0.01	-0.03	-0.08	0.01	-0.09	-0.01	0.07
15	8	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.05
16	6	0.01	-0.01	0.00	0.04	0.02	0.00	0.00	0.02	0.00
17	1	0.00	-0.02	-0.02	0.01	0.02	-0.05	-0.01	-0.01	-0.04
18	1	0.02	0.01	-0.01	0.07	0.04	-0.02	0.03	0.08	-0.04
19	1	0.01	0.00	0.02	0.07	0.03	0.02	0.02	0.05	0.07
20	6	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.03	0.01	-0.02	-0.01	-0.02
21	1	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.04	-0.01	-0.01	0.02	-0.02
22	6	0.02	-0.01	0.02	0.00	0.04	0.05	0.02	0.07	-0.01
23	1	0.04	0.03	0.03	0.06	0.12	0.10	0.08	0.20	0.01
24	1	-0.02	-0.02	0.04	-0.09	0.07	0.05	-0.10	0.08	0.00
25	1	0.04	-0.03	-0.01	0.06	0.00	0.05	0.11	-0.02	-0.04
26	6	0.02	-0.04	-0.06	0.00	0.08	0.11	-0.01	0.03	-0.03
27	1	0.08	0.01	-0.12	-0.13	-0.02	0.23	-0.01	0.04	-0.04
28	1	0.00	-0.13	-0.12	0.08	0.24	0.23	-0.02	0.03	-0.03
29	6	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.04	0.03	0.02	0.05
30	1	-0.04	-0.03	0.02	0.01	0.00	0.03	0.13	0.07	-0.01
31	1	-0.01	-0.02	-0.03	-0.01	0.00	0.07	0.05	-0.01	0.18
32	6	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.01
33	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.00	-0.03	0.00	0.01
34	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.00
35	1	-0.03	0.02	-0.02	-0.04	0.04	-0.04	0.00	0.00	-0.01
36	6	-0.02	0.06	0.01	0.11	-0.01	-0.05	0.04	0.06	0.01
37	1	0.11	0.16	-0.06	0.18	0.00	-0.03	0.19	0.15	-0.05
38	1	-0.14	0.17	0.08	0.11	0.01	-0.01	-0.05	0.16	0.11
39	1	-0.04	-0.08	0.01	0.11	-0.05	-0.12	0.03	-0.07	-0.02
40	6	0.04	0.00	-0.04	-0.03	0.00	0.02	-0.01	0.02	-0.02

41	1	0.06	0.02	-0.05	-0.08	0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.03
42	6	0.03	-0.06	0.01	0.01	0.08	-0.04	0.14	-0.04	-0.02
43	1	0.11	-0.14	-0.01	-0.22	0.36	0.02	0.41	-0.33	-0.11
44	1	-0.03	-0.06	-0.04	0.34	0.11	0.08	-0.15	-0.06	-0.18
45	1	0.07	-0.01	0.09	-0.11	-0.20	-0.20	0.28	0.21	0.23
46	6	0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.03	0.00	0.01
47	1	0.04	0.02	-0.06	-0.04	-0.01	0.08	0.03	0.00	0.00
48	6	0.00	-0.01	0.02	0.01	0.02	-0.03	0.02	0.00	0.02
49	1	0.02	-0.04	0.06	0.00	0.05	-0.06	0.03	-0.01	0.03
50	1	-0.05	0.01	0.03	0.07	0.00	-0.03	0.02	0.01	0.03
51	6	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00
52	1	-0.03	-0.01	0.00	0.09	0.01	0.01	0.07	-0.01	0.02
53	6	0.00	0.03	0.03	-0.07	-0.05	-0.04	-0.10	0.00	0.03
54	1	0.02	0.04	0.06	-0.12	-0.07	-0.08	-0.13	-0.01	0.02
55	6	0.02	-0.01	0.00	-0.03	0.01	-0.05	0.00	0.00	-0.07
56	1	0.04	-0.04	-0.01	-0.03	0.06	-0.08	0.07	0.00	-0.15
57	6	-0.04	0.03	-0.01	0.00	-0.05	0.03	-0.08	-0.01	0.05
58	1	-0.06	0.04	-0.03	0.05	-0.06	0.07	-0.08	-0.01	0.08
59	8	0.01	-0.02	-0.03	0.02	-0.03	0.00	-0.03	-0.01	-0.01
60	8	-0.08	0.10	0.06	-0.07	0.04	0.02	0.07	-0.03	0.00
61	8	0.01	0.03	0.03	0.03	-0.03	-0.04	0.05	0.00	0.00
62	6	0.00	0.05	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.01
63	6	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.01	0.05	0.03	0.01	0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.01
65	8	-0.03	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01
66	1	-0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.02
67	6	0.10	0.07	-0.06	0.02	0.03	-0.01	-0.01	-0.02	0.01
68	1	0.15	0.16	-0.05	0.03	0.05	-0.01	-0.01	-0.03	0.01
69	1	0.13	0.03	-0.12	0.03	0.03	-0.03	-0.01	-0.04	0.02
70	1	0.11	0.02	-0.11	0.02	0.01	-0.03	0.00	0.01	0.03
71	6	-0.07	-0.24	-0.02	-0.02	-0.06	-0.01	0.00	0.04	0.00
72	1	0.10	-0.45	-0.13	0.03	-0.11	-0.04	-0.02	0.07	0.02
73	1	-0.09	-0.20	-0.01	-0.02	-0.06	-0.01	0.00	0.05	0.01
74	1	-0.32	-0.32	0.03	-0.08	-0.08	0.01	0.04	0.05	-0.02

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	334.6182	347.1844	356.8677
Red. masses --	3.2377	2.5962	3.9452
Frc consts --	0.2136	0.1844	0.2960
IR Inten --	0.4004	0.2931	0.7302
Raman Activ --	0.5418	1.3363	3.3523
Depolar (P) --	0.6220	0.6948	0.2033
Depolar (U) --	0.7669	0.8199	0.3380

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

9	6	-0.03	0.04	-0.03	0.02	0.01	-0.02	0.05	-0.01	-0.07
10	1	-0.10	0.05	0.01	0.02	0.00	-0.01	0.04	-0.04	-0.08
11	8	0.11	-0.01	0.02	0.02	0.03	0.00	0.09	0.00	-0.03
12	6	-0.06	0.03	-0.06	0.01	-0.02	-0.02	0.03	-0.04	-0.04
13	1	-0.07	0.01	-0.04	0.01	-0.05	0.02	0.06	-0.06	-0.02
14	6	-0.07	0.01	0.07	-0.01	0.00	0.01	0.02	-0.03	-0.01
15	8	0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.01	0.03
16	6	-0.02	-0.04	0.01	0.03	0.05	-0.02	-0.05	0.11	0.05
17	1	0.01	-0.07	0.03	0.03	0.18	0.04	0.01	0.14	0.16
18	1	-0.01	-0.04	0.01	-0.06	-0.04	0.05	-0.21	0.16	0.01
19	1	-0.06	-0.04	0.01	0.09	0.02	-0.12	-0.02	0.13	0.12
20	6	0.01	0.00	0.02	0.03	0.01	-0.01	0.02	-0.02	-0.04
21	1	0.00	-0.05	0.01	0.03	0.01	-0.02	-0.02	-0.08	-0.03
22	6	0.03	-0.05	0.03	-0.08	-0.07	-0.01	0.11	-0.07	0.05
23	1	0.03	-0.07	0.03	-0.20	-0.32	-0.03	0.12	-0.03	0.01
24	1	0.04	-0.09	0.06	0.13	-0.03	-0.09	0.10	-0.12	0.09
25	1	0.01	-0.05	0.00	-0.25	0.10	0.11	0.14	-0.11	0.01
26	6	0.03	0.03	0.01	-0.05	-0.03	0.07	-0.08	0.04	-0.03
27	1	0.03	0.02	0.01	-0.13	-0.10	0.15	-0.07	0.10	-0.07
28	1	0.01	0.06	0.01	0.00	0.08	0.15	-0.13	0.03	-0.06
29	6	-0.03	-0.03	-0.04	0.03	0.05	0.00	0.16	0.05	-0.01
30	1	-0.13	-0.08	0.02	0.05	0.07	-0.01	0.29	0.19	-0.06
31	1	-0.05	-0.01	-0.17	0.04	0.04	0.03	0.23	-0.06	0.15
32	6	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.04	0.06	-0.11
33	1	-0.01	0.04	-0.03	0.02	-0.03	-0.01	-0.20	0.15	-0.24
34	6	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.03	0.01	0.01
35	1	-0.02	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.07	0.03	-0.02
36	6	-0.05	-0.12	-0.06	-0.09	0.13	-0.02	0.06	0.03	0.01
37	1	-0.22	-0.26	0.06	-0.11	0.22	-0.16	0.06	0.06	-0.02
38	1	0.07	-0.27	-0.22	-0.13	0.20	0.08	0.10	0.04	0.08
39	1	-0.03	0.03	-0.04	-0.10	0.14	0.06	0.07	0.07	-0.03
40	6	0.02	-0.03	0.03	-0.05	-0.06	0.02	-0.09	-0.04	0.00
41	1	-0.01	-0.07	0.06	-0.08	-0.05	0.00	-0.11	-0.04	-0.01
42	6	0.19	0.03	0.02	0.07	0.11	0.08	-0.02	-0.05	-0.04
43	1	0.38	-0.09	-0.09	0.15	0.21	-0.05	-0.01	-0.11	0.00
44	1	0.06	0.02	-0.03	0.04	0.12	0.24	-0.02	-0.05	-0.14
45	1	0.27	0.14	0.22	0.11	0.20	0.13	-0.02	-0.08	-0.01
46	6	-0.04	0.02	0.01	0.06	-0.02	-0.07	-0.06	0.02	0.03
47	1	-0.06	0.01	0.04	0.10	-0.03	-0.09	-0.09	0.02	0.06
48	6	-0.04	0.02	0.00	0.03	-0.02	0.01	-0.05	0.02	0.00
49	1	-0.05	0.00	-0.01	0.07	-0.06	0.08	-0.07	0.00	-0.01
50	1	-0.05	0.03	0.01	-0.04	0.01	0.03	-0.05	0.03	0.01
51	6	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00
52	1	0.07	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.00
53	6	-0.06	0.01	0.06	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.02	-0.01
54	1	-0.07	0.01	0.07	-0.01	0.00	0.01	0.01	-0.03	-0.02
55	6	0.03	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02
56	1	0.10	-0.01	-0.10	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.03	0.03
57	6	-0.05	0.01	0.07	-0.01	0.00	0.00	0.04	-0.02	0.01
58	1	-0.06	0.01	0.08	-0.01	0.00	0.00	0.06	-0.02	0.03
59	8	0.04	0.00	0.03	0.01	-0.07	-0.01	-0.16	-0.10	0.01
60	8	-0.12	0.05	-0.04	-0.01	0.02	0.03	-0.02	0.00	0.01

61	8	-0.06	0.01	-0.02	0.05	-0.02	-0.05	-0.07	0.02	0.01
62	6	-0.05	0.02	-0.04	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00
63	6	-0.02	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
64	6	0.04	-0.06	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.00
65	8	0.03	0.01	-0.02	-0.01	-0.04	0.01	-0.01	-0.01	0.01
66	1	0.07	-0.08	0.06	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.00
67	6	-0.05	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00
68	1	-0.09	-0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.01
69	1	-0.06	0.07	0.01	0.00	0.01	0.00	0.02	0.01	0.00
70	1	-0.09	-0.08	-0.05	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.03	0.00
71	6	0.02	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01
72	1	-0.01	0.05	0.05	0.00	-0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.01
73	1	0.06	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
74	1	0.07	0.03	0.05	-0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.01

		40		41		42
		A		A		A
Frequencies --		359.4360		376.4872		385.0408
Red. masses --		3.0891		4.2492		3.9238
Frc consts --		0.2351		0.3549		0.3427
IR Inten --		1.0513		0.6057		0.8025
Raman Activ --		0.2212		1.5014		1.7490
Depolar (P) --		0.1757		0.3697		0.2334
Depolar (U) --		0.2990		0.5398		0.3785

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

29	6	0.10	0.07	0.07	-0.03	0.00	0.01	0.03	-0.04	0.00
30	1	0.25	0.20	0.00	-0.03	-0.02	0.01	0.06	-0.04	-0.02
31	1	0.14	0.03	0.28	-0.04	0.02	0.01	0.05	-0.07	0.01
32	6	-0.04	-0.03	-0.05	-0.02	0.00	0.00	-0.13	0.05	-0.01
33	1	-0.13	-0.04	-0.12	-0.05	0.03	-0.01	-0.31	0.22	-0.14
34	6	-0.06	-0.04	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.01	-0.06	0.02
35	1	-0.10	0.00	-0.05	-0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.03	-0.06
36	6	-0.03	-0.07	0.00	0.20	0.07	-0.15	-0.11	0.02	-0.08
37	1	-0.08	-0.13	0.06	0.31	0.11	-0.15	-0.13	0.02	-0.09
38	1	-0.04	-0.12	-0.10	0.29	0.09	0.01	-0.17	0.03	-0.13
39	1	-0.04	-0.07	0.03	0.21	0.08	-0.33	-0.12	-0.01	0.00
40	6	0.09	0.05	-0.01	0.02	-0.06	0.00	-0.03	0.05	-0.06
41	1	0.09	0.03	0.02	0.01	-0.08	0.02	-0.04	0.01	-0.02
42	6	0.00	-0.03	0.02	0.02	0.04	0.02	0.02	-0.01	0.11
43	1	-0.02	-0.03	0.04	0.06	0.10	-0.05	0.07	0.07	0.02
44	1	0.02	-0.03	0.00	0.03	0.04	0.12	0.08	0.00	0.18
45	1	-0.01	-0.05	0.00	0.04	0.07	0.06	0.03	-0.04	0.19
46	6	-0.02	0.00	0.02	-0.15	0.01	-0.07	0.02	-0.03	-0.02
47	1	-0.03	0.01	0.02	-0.20	0.01	-0.02	0.05	-0.04	-0.03
48	6	0.00	0.00	-0.01	-0.13	-0.03	-0.09	0.02	0.01	-0.01
49	1	-0.02	0.04	-0.05	-0.17	-0.04	-0.13	0.04	0.09	-0.02
50	1	0.03	-0.02	-0.03	-0.15	-0.06	-0.13	0.08	-0.03	-0.04
51	6	-0.01	0.00	0.01	-0.04	-0.03	-0.02	-0.04	0.00	0.03
52	1	-0.02	0.00	0.00	-0.05	-0.04	-0.04	-0.09	0.04	0.04
53	6	0.00	0.02	0.01	0.08	0.06	0.11	0.03	-0.01	-0.03
54	1	0.02	0.02	0.03	0.14	0.09	0.19	0.04	-0.01	-0.04
55	6	0.01	0.00	0.00	0.09	-0.01	0.08	-0.01	0.00	0.02
56	1	0.02	-0.02	0.00	0.13	-0.06	0.08	-0.05	0.01	0.05
57	6	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.08	0.03	0.03	-0.01	-0.02
58	1	-0.03	0.02	-0.02	-0.05	0.09	0.00	0.04	-0.01	-0.02
59	8	0.09	0.10	0.00	0.08	0.00	-0.01	-0.06	0.15	-0.04
60	8	-0.02	0.00	-0.01	0.08	-0.01	0.05	0.03	0.05	0.04
61	8	-0.02	0.00	0.02	-0.15	0.00	-0.08	0.05	-0.04	-0.03
62	6	-0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.03	0.04	-0.01	0.01	-0.01
63	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.04	0.00	-0.01
64	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.02	-0.05	0.02
65	8	0.00	0.01	-0.01	-0.04	-0.08	0.03	0.00	-0.04	0.00
66	1	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.01	0.04	-0.08	0.05
67	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.04	-0.01
68	1	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	0.02	-0.05	-0.04	-0.03
69	1	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.03	0.00	-0.03	0.02	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	0.02	-0.06	-0.07	-0.04
71	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.03
72	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.02	0.07
73	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.02	0.05	-0.02	0.00
74	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.02	0.02	0.01	0.07

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	392.4550	416.2717	429.8296
Red. masses --	5.8096	3.9237	3.6909
Frc consts --	0.5272	0.4006	0.4018
IR Inten --	5.2528	7.0349	2.6759

Raman Activ --		2.2976			2.9785			2.6095		
Depolar (P) --		0.2054			0.4448			0.4032		
Depolar (U) --		0.3407			0.6158			0.5746		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.10	0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.04
2	6	0.08	0.11	0.04	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.06	-0.02
3	6	0.03	0.05	-0.07	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.06
4	6	-0.03	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.01	-0.08
5	6	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	0.04	0.01
6	6	-0.04	0.01	0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.05	0.02
7	8	-0.04	0.18	0.17	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.05	-0.01
8	6	0.06	-0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.03
9	6	-0.07	-0.19	-0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.08	0.03
10	1	-0.08	-0.27	-0.04	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.16	0.05
11	8	-0.15	-0.14	0.06	0.01	-0.01	0.00	0.07	0.06	-0.01
12	6	-0.02	-0.10	-0.04	0.00	0.01	0.02	-0.05	-0.01	-0.04
13	1	0.09	-0.09	-0.03	0.03	-0.01	0.06	-0.14	-0.01	-0.05
14	6	0.02	-0.04	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.05	-0.01
15	8	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
16	6	-0.02	-0.06	0.05	0.01	0.01	0.00	0.02	0.00	0.03
17	1	0.05	-0.22	0.10	0.00	0.01	0.00	0.03	0.00	0.04
18	1	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.04
19	1	-0.16	-0.04	0.14	0.02	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.02
20	6	0.04	-0.09	-0.08	-0.01	-0.01	-0.01	0.03	0.04	0.05
21	1	0.04	-0.14	-0.10	-0.01	-0.02	-0.01	0.04	0.06	0.04
22	6	0.10	-0.02	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.02
23	1	0.13	0.03	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.02	0.00
24	1	0.03	-0.09	0.08	0.01	-0.02	0.02	-0.02	0.04	-0.05
25	1	0.11	-0.08	-0.10	0.02	-0.02	0.00	-0.05	0.04	0.01
26	6	-0.03	0.03	0.02	-0.01	-0.01	0.02	0.03	0.02	-0.06
27	1	-0.06	0.02	0.04	-0.05	-0.04	0.06	0.14	0.13	-0.18
28	1	0.04	0.02	0.05	0.03	0.02	0.06	-0.13	-0.08	-0.18
29	6	-0.11	-0.02	0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03
30	1	-0.17	-0.07	0.06	0.02	0.00	0.00	-0.06	-0.06	0.00
31	1	-0.18	0.12	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.12
32	6	0.10	0.02	-0.10	0.00	0.00	-0.01	-0.07	0.02	0.02
33	1	0.09	0.03	-0.10	-0.01	0.01	-0.01	-0.15	0.09	-0.05
34	6	0.04	0.06	-0.07	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.01
35	1	-0.07	0.05	-0.06	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.03
36	6	-0.04	0.04	-0.09	0.02	0.01	0.01	-0.06	0.04	-0.10
37	1	-0.08	0.05	-0.13	0.04	0.01	0.01	-0.10	0.05	-0.14
38	1	-0.02	0.04	-0.06	0.02	0.01	0.02	-0.05	0.04	-0.07
39	1	-0.04	0.09	-0.06	0.02	-0.01	-0.01	-0.06	0.08	-0.06
40	6	-0.01	0.06	-0.03	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.08	0.04
41	1	-0.04	0.00	0.03	0.00	0.02	-0.01	-0.02	-0.12	0.07
42	6	0.03	-0.02	0.04	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.01
43	1	0.08	-0.04	0.01	0.01	0.04	-0.01	0.02	-0.11	0.03
44	1	0.06	-0.03	0.00	0.01	0.01	0.04	-0.01	-0.03	-0.12
45	1	0.04	-0.06	0.12	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.05	0.02
46	6	0.03	-0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.02	0.09
47	1	0.07	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.12
48	6	0.02	0.04	0.03	-0.01	-0.02	-0.01	0.02	0.09	0.06



49	1	0.04	0.07	0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.10	0.04
50	1	0.06	0.03	0.03	-0.02	-0.02	-0.02	0.08	0.11	0.09
51	6	-0.02	0.03	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.07	0.02
52	1	-0.03	0.05	0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.09	0.05
53	6	0.00	-0.03	-0.05	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.04	-0.05
54	1	-0.02	-0.04	-0.08	0.01	0.01	0.02	-0.05	-0.06	-0.09
55	6	-0.03	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.04	0.01	-0.02
56	1	-0.06	0.03	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.06	0.04	-0.02
57	6	0.03	-0.04	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.05	0.00
58	1	0.06	-0.04	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.05	-0.05	0.02
59	8	-0.02	0.16	-0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.11	-0.03	0.01
60	8	0.00	-0.04	0.00	-0.06	0.08	0.06	-0.03	-0.08	-0.03
61	8	0.03	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.04
62	6	0.02	-0.04	0.04	0.05	0.04	0.10	0.04	-0.07	0.07
63	6	0.04	0.00	0.03	0.16	-0.08	0.07	0.14	-0.06	0.11
64	6	-0.03	0.06	-0.02	-0.03	-0.06	-0.22	-0.08	0.09	-0.05
65	8	-0.04	-0.05	0.04	0.01	0.22	0.09	-0.05	-0.07	0.06
66	1	-0.07	0.09	-0.05	-0.19	0.00	-0.34	-0.20	0.16	-0.15
67	6	0.03	0.05	0.01	-0.09	-0.20	-0.01	0.03	0.06	0.02
68	1	0.07	0.06	0.04	-0.14	-0.44	0.01	0.11	0.07	0.07
69	1	0.05	-0.04	0.00	-0.12	-0.28	0.10	0.06	-0.13	0.00
70	1	0.08	0.09	0.05	-0.03	0.01	0.19	0.13	0.14	0.09
71	6	-0.02	0.01	-0.02	0.00	-0.03	-0.10	-0.02	0.02	-0.02
72	1	0.01	-0.01	-0.05	0.02	-0.03	-0.31	-0.02	0.03	-0.15
73	1	-0.08	0.05	0.02	-0.26	-0.01	0.03	-0.24	0.11	0.10
74	1	-0.04	0.01	-0.08	-0.01	-0.03	-0.22	-0.01	0.03	-0.21

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	437.1112	451.0159	461.5318
Red. masses --	3.7708	2.9716	3.4617
Frc consts --	0.4245	0.3561	0.4345
IR Inten --	1.4877	2.9275	2.3465
Raman Activ --	1.6801	4.0628	0.5970
Depolar (P) --	0.6807	0.4080	0.6590
Depolar (U) --	0.8100	0.5795	0.7945

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.01	-0.04	0.06	-0.03	0.06	-0.01	0.02	-0.03
2	6	0.01	0.00	-0.01	-0.07	0.01	-0.03	0.01	-0.03	0.00
3	6	0.00	-0.06	-0.05	0.03	-0.01	0.02	0.02	0.04	0.03
4	6	-0.02	0.01	-0.06	0.00	-0.01	-0.03	0.02	-0.04	0.08
5	6	-0.01	0.06	0.00	-0.02	0.00	-0.03	-0.02	-0.10	-0.02
6	6	-0.01	0.04	0.02	-0.05	0.00	0.03	-0.06	-0.02	0.00
7	8	-0.03	0.02	0.05	0.03	-0.04	-0.06	-0.02	-0.02	0.00
8	6	0.01	0.00	0.01	-0.04	0.05	-0.06	0.03	-0.01	0.02
9	6	0.04	-0.04	0.04	0.01	0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.00
10	1	0.09	-0.04	0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00
11	8	-0.07	0.00	0.00	0.01	0.07	0.03	0.01	-0.01	0.00
12	6	0.06	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.01
13	1	0.10	-0.06	0.12	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.01
14	6	0.01	-0.04	-0.01	0.01	-0.03	-0.01	0.00	-0.05	0.00
15	8	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.02	0.01	0.01	0.02
16	6	0.01	-0.01	0.02	-0.09	-0.02	-0.07	0.04	0.00	0.04

17	1	0.02	-0.02	0.03	-0.07	-0.07	-0.07	0.05	0.00	0.06
18	1	0.01	-0.01	0.02	-0.03	-0.07	-0.04	0.01	0.01	0.03
19	1	-0.01	-0.01	0.02	-0.17	-0.04	-0.13	0.04	0.00	0.05
20	6	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.02	0.01	0.00
21	1	0.02	0.03	0.02	-0.07	-0.04	0.02	0.05	0.02	-0.02
22	6	-0.03	0.01	0.00	0.07	-0.04	0.10	-0.04	0.02	-0.03
23	1	-0.03	-0.03	0.03	0.10	0.00	0.13	-0.04	0.01	0.00
24	1	-0.03	0.04	-0.03	0.01	-0.04	0.12	-0.05	0.02	-0.02
25	1	-0.05	0.04	0.02	0.09	-0.06	0.06	-0.06	0.03	-0.04
26	6	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.02	-0.01
27	1	0.15	0.15	-0.23	0.01	0.02	-0.02	0.04	-0.04	-0.05
28	1	-0.19	-0.12	-0.23	0.02	-0.05	-0.02	-0.06	-0.06	-0.04
29	6	-0.03	0.01	0.02	0.02	0.12	0.00	-0.01	-0.03	-0.01
30	1	-0.04	-0.01	0.01	0.06	0.22	0.00	-0.06	-0.08	0.01
31	1	-0.05	0.05	0.02	0.05	0.06	0.08	-0.04	0.02	-0.07
32	6	0.01	0.00	-0.01	0.11	-0.14	0.08	-0.04	0.03	-0.03
33	1	0.01	0.01	-0.01	0.45	-0.46	0.32	-0.17	0.13	-0.12
34	6	0.01	0.00	-0.03	-0.11	0.03	-0.03	0.03	-0.02	0.01
35	1	0.01	0.01	-0.04	0.01	-0.08	0.06	-0.01	0.02	-0.03
36	6	-0.01	0.06	-0.08	0.01	0.00	-0.05	0.11	-0.02	0.10
37	1	-0.01	0.09	-0.13	0.02	-0.01	-0.04	0.16	-0.01	0.10
38	1	0.00	0.08	-0.02	0.02	-0.01	-0.05	0.12	-0.02	0.14
39	1	-0.01	0.07	-0.08	0.01	0.00	-0.07	0.11	-0.04	0.02
40	6	-0.01	-0.10	0.04	0.02	0.03	-0.02	0.01	0.08	0.02
41	1	-0.05	-0.14	0.07	0.01	0.02	-0.01	0.03	0.12	-0.01
42	6	-0.04	-0.05	-0.03	0.01	-0.03	0.05	0.02	-0.01	0.04
43	1	-0.07	-0.11	0.04	0.06	-0.02	0.01	0.09	0.01	-0.04
44	1	-0.01	-0.05	-0.13	0.04	-0.02	0.03	0.02	-0.01	0.07
45	1	-0.05	-0.11	-0.03	0.02	-0.05	0.13	0.05	0.01	0.13
46	6	-0.02	0.03	0.09	0.01	0.01	-0.02	0.10	0.02	-0.13
47	1	-0.02	0.00	0.13	0.04	-0.04	0.02	0.22	-0.09	-0.08
48	6	0.00	0.09	0.05	-0.01	0.07	0.04	0.01	0.11	0.10
49	1	-0.02	0.11	0.02	0.03	0.05	0.10	0.17	-0.13	0.40
50	1	0.07	0.10	0.07	-0.05	0.09	0.06	-0.29	0.27	0.24
51	6	-0.01	0.07	0.03	-0.04	0.04	0.04	-0.03	0.08	0.03
52	1	0.00	0.10	0.06	-0.05	0.07	0.06	-0.03	0.12	0.06
53	6	-0.01	-0.04	-0.05	0.01	-0.03	-0.03	-0.01	-0.05	-0.05
54	1	-0.03	-0.05	-0.09	0.00	-0.04	-0.06	-0.04	-0.07	-0.10
55	6	-0.03	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.03	0.01	-0.01
56	1	-0.06	0.04	0.00	-0.05	0.03	0.02	-0.06	0.05	0.00
57	6	0.03	-0.04	-0.01	0.03	-0.03	-0.01	0.04	-0.05	0.00
58	1	0.06	-0.05	0.01	0.05	-0.03	0.00	0.08	-0.06	0.03
59	8	0.10	-0.08	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.05	0.02	0.00
60	8	0.08	0.12	0.09	0.02	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01
61	8	-0.01	0.01	0.02	-0.04	-0.02	-0.06	-0.17	-0.02	-0.13
62	6	-0.01	0.08	-0.02	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.02
63	6	-0.11	0.05	-0.09	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.02
64	6	0.08	-0.11	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
65	8	0.02	0.06	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.03	-0.01
66	1	0.16	-0.19	0.08	-0.02	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.02
67	6	-0.06	-0.11	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
68	1	-0.14	-0.19	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00

69	1	-0.09	0.06	0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.00
70	1	-0.15	-0.15	-0.05	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
71	6	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01
72	1	0.02	-0.04	0.09	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.01
73	1	0.18	-0.11	-0.09	-0.02	0.01	0.01	0.04	-0.01	-0.02
74	1	0.00	-0.03	0.18	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.02

		49		50		51
		A		A		A
Frequencies --		475.6430		491.6461		508.9443
Red. masses --		3.2820		4.5672		4.4223
Frc consts --		0.4375		0.6504		0.6749
IR Inten --		1.2962		11.3566		1.2889
Raman Activ --		4.5398		3.7211		2.0690
Depolar (P) --		0.0541		0.1218		0.2446
Depolar (U) --		0.1026		0.2172		0.3931

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	-0.03	-0.05	-0.10	0.02	0.05	-0.04	0.02	0.05
2	6	-0.04	-0.11	-0.01	-0.07	0.01	0.13	-0.05	0.02	0.10
3	6	0.01	-0.02	-0.02	-0.03	0.03	0.09	-0.03	0.03	-0.03
4	6	0.03	-0.03	0.02	0.01	0.05	-0.01	-0.08	-0.03	-0.05
5	6	0.01	-0.01	0.02	0.02	0.08	-0.06	-0.06	-0.08	0.05
6	6	0.01	0.01	-0.01	-0.04	0.00	0.05	0.05	-0.03	-0.07
7	8	-0.08	-0.11	0.02	0.04	-0.04	-0.08	0.04	-0.02	-0.08
8	6	0.15	0.09	-0.02	0.04	0.06	0.03	0.02	0.04	-0.01
9	6	0.03	0.01	-0.03	-0.02	-0.10	-0.13	0.01	-0.05	-0.05
10	1	0.02	0.01	-0.03	-0.01	-0.23	-0.16	0.05	-0.11	-0.08
11	8	-0.01	0.11	0.04	0.02	-0.05	-0.01	0.04	-0.03	-0.03
12	6	0.02	-0.05	-0.02	0.07	-0.03	-0.05	0.01	-0.04	-0.01
13	1	0.04	-0.05	-0.02	0.18	-0.02	-0.04	0.05	-0.07	0.04
14	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
15	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01
16	6	0.06	-0.10	0.10	0.05	-0.03	0.02	-0.01	-0.01	0.00
17	1	0.20	-0.31	0.24	0.05	-0.10	-0.01	0.01	-0.05	0.00
18	1	0.08	-0.14	0.13	0.14	-0.08	0.05	0.03	-0.04	0.01
19	1	-0.24	-0.12	0.07	-0.04	-0.06	-0.04	-0.06	-0.02	-0.04
20	6	0.12	0.01	-0.05	-0.05	-0.03	-0.12	-0.01	-0.01	-0.06
21	1	0.15	-0.01	-0.08	0.01	-0.09	-0.18	-0.01	-0.03	-0.07
22	6	0.02	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03	0.02	-0.01	-0.01
23	1	0.07	0.07	0.07	-0.06	0.02	-0.15	0.00	0.03	-0.11
24	1	-0.08	0.05	0.00	0.04	-0.08	0.01	0.07	-0.08	0.03
25	1	0.05	-0.01	-0.03	0.01	-0.04	-0.06	0.06	-0.06	-0.04
26	6	-0.04	0.02	0.00	0.03	0.00	-0.03	0.06	-0.05	0.04
27	1	-0.06	0.01	0.02	0.15	0.09	-0.14	-0.11	-0.21	0.22
28	1	-0.05	0.05	0.02	-0.06	-0.15	-0.14	0.24	0.11	0.21
29	6	-0.09	0.16	-0.04	-0.02	0.02	-0.03	0.02	0.02	-0.05
30	1	-0.30	-0.01	0.06	-0.09	-0.06	-0.01	0.01	0.01	-0.04
31	1	-0.21	0.37	-0.25	-0.06	0.09	-0.12	0.02	0.02	-0.06
32	6	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.12	0.07	-0.03	0.04	0.05
33	1	-0.07	-0.06	-0.08	-0.17	0.09	-0.05	-0.07	-0.04	0.01
34	6	-0.04	0.00	0.00	-0.03	0.12	0.24	-0.05	0.07	0.17
35	1	-0.04	0.09	-0.08	-0.07	0.13	0.23	-0.07	0.04	0.19
36	6	0.00	0.00	0.06	0.00	-0.03	-0.03	-0.03	0.03	-0.11

37	1	-0.02	0.03	0.01	0.01	-0.09	0.06	-0.03	0.05	-0.15
38	1	-0.04	0.03	0.07	0.02	-0.08	-0.11	0.00	0.05	-0.04
39	1	-0.01	-0.01	0.10	0.00	-0.05	-0.07	-0.03	0.06	-0.14
40	6	-0.05	0.00	0.01	0.04	0.04	0.02	0.05	-0.04	-0.06
41	1	-0.07	-0.02	0.03	0.08	0.12	-0.05	0.08	-0.07	-0.01
42	6	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.04	0.09	-0.01	0.04	-0.11
43	1	-0.02	0.00	0.00	0.07	-0.03	0.03	-0.09	0.07	-0.05
44	1	-0.01	0.01	-0.02	0.05	-0.04	0.07	-0.06	0.05	-0.04
45	1	-0.01	0.01	-0.04	0.02	-0.07	0.19	-0.03	0.09	-0.25
46	6	-0.02	-0.01	0.00	-0.04	0.02	0.00	0.08	-0.02	0.04
47	1	-0.04	0.02	-0.02	-0.08	-0.01	0.07	0.19	-0.01	-0.06
48	6	-0.01	-0.05	-0.03	-0.04	0.03	-0.02	0.09	0.01	0.07
49	1	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06	0.17	-0.10	0.12	-0.18	0.18
50	1	0.00	-0.06	-0.04	0.07	-0.05	-0.10	-0.03	0.13	0.19
51	6	0.01	-0.03	-0.02	-0.06	0.01	0.06	0.09	0.01	-0.06
52	1	0.02	-0.05	-0.04	-0.09	0.04	0.07	0.12	0.00	-0.06
53	6	0.00	0.01	0.02	0.03	0.00	-0.02	-0.04	-0.01	0.00
54	1	0.01	0.02	0.04	0.04	0.00	-0.02	-0.06	-0.02	-0.01
55	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03
56	1	0.03	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.04	0.02	0.01	-0.05
57	6	-0.01	0.02	0.01	0.02	0.00	-0.02	-0.02	-0.02	0.02
58	1	-0.03	0.02	0.00	0.02	0.00	-0.03	-0.01	-0.02	0.04
59	8	-0.04	0.01	0.00	0.03	-0.09	0.01	-0.02	0.07	0.00
60	8	-0.03	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.07	0.03	0.03
61	8	0.00	0.01	0.04	0.11	-0.06	-0.12	-0.18	0.07	0.16
62	6	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.02	0.02	0.02
63	6	-0.01	0.02	-0.03	0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.02	-0.01
64	6	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.01
65	8	0.01	0.03	0.01	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	-0.02	0.02
66	1	0.04	-0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.03	-0.04	0.01
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00
68	1	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.05	-0.01
69	1	0.00	0.03	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01
70	1	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00
71	6	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01
72	1	0.02	-0.03	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.02
73	1	0.04	-0.03	-0.03	-0.03	0.02	0.02	0.03	-0.01	-0.01
74	1	-0.01	-0.02	0.02	0.00	0.02	-0.02	-0.03	-0.01	0.04

52	53	54
A	A	A

Frequencies --	538.3894	545.9651	556.9994
Red. masses --	5.2221	4.3998	4.5356
Frc consts --	0.8918	0.7727	0.8291
IR Inten --	17.1612	0.9299	7.3496
Raman Activ --	0.4714	3.7502	2.9236
Depolar (P) --	0.4373	0.0627	0.7428
Depolar (U) --	0.6085	0.1180	0.8524

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.02	-0.05	0.04	-0.05	-0.01	-0.04	0.05	0.02
2	6	0.00	-0.02	-0.04	0.02	-0.04	0.00	-0.01	0.01	-0.02
3	6	0.00	-0.08	-0.01	0.00	-0.01	-0.07	-0.02	0.00	0.18
4	6	0.06	-0.02	-0.03	0.05	0.08	0.04	-0.10	0.02	-0.02

5	6	0.08	0.09	0.02	0.03	0.00	0.02	-0.07	-0.02	-0.04
6	6	0.16	-0.02	0.13	0.04	-0.03	0.00	-0.06	0.00	-0.04
7	8	-0.05	0.01	0.07	-0.05	-0.01	0.04	0.01	0.00	0.00
8	6	-0.01	0.00	0.04	-0.01	0.03	0.04	0.08	-0.04	-0.06
9	6	0.00	0.01	-0.02	-0.05	-0.01	-0.07	0.00	0.03	0.04
10	1	0.01	-0.01	-0.02	-0.05	-0.12	-0.09	-0.02	0.06	0.05
11	8	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.04	0.04	0.04
12	6	0.03	-0.01	-0.02	0.05	0.15	0.02	-0.03	0.04	0.01
13	1	0.00	-0.03	0.00	0.16	0.15	0.03	-0.04	-0.01	0.06
14	6	0.02	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.02
15	8	-0.03	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01
16	6	0.03	-0.01	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.06	-0.01	0.06
17	1	-0.01	0.00	-0.04	-0.02	-0.02	-0.07	0.14	-0.03	0.18
18	1	0.08	-0.01	0.02	0.11	-0.04	0.02	-0.07	0.03	0.03
19	1	0.05	-0.01	0.00	0.02	-0.03	-0.05	0.02	0.01	0.13
20	6	-0.03	0.01	-0.02	-0.06	-0.02	-0.06	0.05	0.02	0.01
21	1	-0.01	0.02	-0.03	-0.04	-0.10	-0.10	0.07	0.05	0.01
22	6	-0.04	0.03	-0.05	0.04	-0.04	0.05	-0.05	0.04	-0.04
23	1	-0.02	0.02	0.02	0.05	-0.05	0.08	-0.05	0.03	-0.04
24	1	-0.08	0.08	-0.07	0.02	-0.03	0.05	-0.04	0.03	-0.03
25	1	-0.06	0.06	-0.01	0.03	-0.03	0.04	-0.05	0.04	-0.04
26	6	0.23	-0.03	0.04	-0.07	-0.05	-0.01	0.10	0.02	0.01
27	1	0.02	0.06	0.12	-0.06	0.00	-0.04	0.07	-0.13	0.10
28	1	0.43	-0.09	0.11	-0.14	-0.05	-0.04	0.23	0.05	0.09
29	6	-0.02	0.00	0.01	-0.02	0.02	0.01	-0.03	0.02	0.02
30	1	-0.04	-0.03	0.02	-0.03	-0.01	0.01	-0.08	-0.02	0.05
31	1	-0.02	0.01	-0.03	-0.03	0.03	-0.01	-0.08	0.12	-0.01
32	6	0.00	0.03	0.02	0.03	0.04	0.05	0.01	-0.07	-0.15
33	1	0.00	0.10	0.03	0.06	0.07	0.07	-0.07	-0.05	-0.22
34	6	0.03	0.00	-0.05	0.01	0.05	-0.03	0.02	-0.09	-0.07
35	1	0.06	0.05	-0.09	0.02	0.12	-0.09	-0.06	-0.12	-0.04
36	6	-0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.01	0.08	-0.01	-0.02	-0.11
37	1	-0.07	0.03	-0.09	0.01	-0.04	0.13	0.07	-0.08	0.02
38	1	-0.05	0.03	-0.03	-0.05	-0.02	-0.01	0.07	-0.07	-0.12
39	1	-0.02	0.02	0.08	0.00	-0.06	0.14	0.00	-0.03	-0.26
40	6	0.13	-0.10	-0.13	-0.07	-0.09	0.01	0.11	0.11	0.00
41	1	0.15	-0.19	-0.03	-0.09	-0.12	0.03	0.17	0.23	-0.09
42	6	-0.05	-0.06	0.15	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.04
43	1	-0.17	-0.09	0.28	-0.07	0.02	0.02	0.05	0.04	-0.10
44	1	-0.11	-0.06	0.15	-0.07	0.00	0.05	0.09	0.01	-0.05
45	1	-0.09	-0.02	-0.04	-0.03	0.05	-0.10	0.02	-0.05	0.05
46	6	0.01	0.08	0.03	0.01	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.00
47	1	-0.09	-0.01	0.23	0.00	-0.01	0.02	0.11	-0.01	-0.09
48	6	0.01	0.04	0.02	0.01	0.01	0.01	0.03	0.00	0.02
49	1	0.02	-0.06	0.08	0.01	-0.10	0.05	0.05	0.10	0.00
50	1	-0.12	0.08	0.04	-0.06	0.07	0.07	0.09	-0.05	-0.03
51	6	0.07	-0.01	0.04	0.05	0.01	-0.03	-0.05	-0.01	0.03
52	1	0.02	0.01	0.03	0.05	0.02	-0.03	-0.04	-0.01	0.03
53	6	-0.04	0.02	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.03	-0.01	-0.03
54	1	-0.07	0.02	0.01	-0.04	0.00	0.02	0.06	-0.01	-0.04
55	6	-0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.02
56	1	0.02	-0.02	-0.06	0.02	0.00	-0.03	-0.04	0.01	0.04

57	6	-0.05	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.02	0.03	0.00	-0.02
58	1	-0.08	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.03	0.05	-0.01	-0.05
59	8	-0.24	0.01	0.04	0.03	0.01	-0.05	-0.11	-0.13	0.09
60	8	0.00	0.00	0.00	0.05	0.16	0.02	0.05	0.12	0.02
61	8	-0.11	-0.02	-0.15	-0.05	0.01	0.00	0.02	0.00	0.04
62	6	-0.01	0.00	0.01	0.10	0.01	-0.12	0.08	0.02	-0.06
63	6	0.00	0.01	0.00	0.07	-0.14	0.14	0.03	-0.06	0.08
64	6	0.01	0.00	-0.01	-0.11	-0.02	0.07	-0.05	-0.02	0.04
65	8	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.07	-0.16	-0.01	-0.06	-0.09
66	1	0.01	0.00	-0.01	-0.26	0.05	-0.05	-0.14	0.00	-0.03
67	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	-0.04	-0.01
68	1	-0.01	-0.01	0.00	0.07	0.13	0.01	0.02	0.03	0.00
69	1	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.12	-0.08	0.00	-0.07	-0.04
70	1	0.00	0.01	0.01	0.05	-0.09	-0.09	0.01	-0.07	-0.05
71	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.05	0.08	-0.03	0.03	0.05
72	1	0.00	0.00	-0.01	-0.13	0.18	0.07	-0.07	0.09	0.05
73	1	0.00	-0.01	0.00	-0.22	0.19	0.19	-0.12	0.10	0.11
74	1	0.00	0.00	0.01	0.12	0.11	-0.20	0.04	0.06	-0.09

		55		56		57
		A		A		A
Frequencies --		568.8606		590.7602		604.9991
Red. masses --		4.1007		3.8287		3.9249
Frc consts --		0.7818		0.7873		0.8464
IR Inten --		7.2810		2.2255		11.1096
Raman Activ --		1.6465		8.0984		1.2338
Depolar (P) --		0.2158		0.0518		0.1665
Depolar (U) --		0.3550		0.0986		0.2854

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	-0.06	-0.06	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.03	0.04
2	6	0.02	-0.08	-0.08	-0.03	0.05	0.02	0.04	-0.01	0.02
3	6	0.08	-0.06	0.05	0.02	-0.01	-0.02	-0.02	0.03	0.04
4	6	0.01	-0.07	-0.03	0.04	-0.07	-0.05	-0.02	0.08	0.00
5	6	-0.03	-0.07	0.00	0.06	-0.03	0.04	0.03	0.00	0.02
6	6	-0.07	0.06	-0.01	0.06	0.09	0.10	0.05	0.00	0.05
7	8	-0.10	-0.04	0.10	0.05	0.01	-0.04	0.01	0.01	-0.02
8	6	-0.08	0.04	0.10	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.05	0.01
9	6	-0.04	0.01	-0.08	0.07	-0.03	0.06	-0.11	0.07	-0.08
10	1	0.00	-0.08	-0.11	0.05	0.05	0.08	-0.13	-0.04	-0.09
11	8	0.07	0.01	-0.04	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.07	0.03
12	6	0.00	-0.02	-0.01	0.03	-0.06	-0.02	-0.05	0.10	-0.04
13	1	-0.03	-0.05	0.03	0.01	-0.11	0.03	-0.06	0.13	-0.06
14	6	-0.02	0.01	0.02	0.03	0.01	-0.02	0.06	-0.01	-0.06
15	8	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.00	-0.02
16	6	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.01	-0.01	0.06	-0.01	0.03
17	1	-0.12	0.04	-0.21	0.00	0.00	0.05	0.03	0.02	0.00
18	1	0.19	-0.05	0.01	-0.09	0.01	-0.02	0.05	0.02	0.01
19	1	0.07	-0.03	-0.13	-0.07	0.01	0.01	0.13	0.00	0.07
20	6	-0.10	0.01	-0.06	0.06	-0.01	0.06	-0.06	0.02	-0.07
21	1	-0.08	-0.05	-0.10	0.03	0.06	0.11	-0.02	-0.08	-0.14
22	6	-0.02	-0.01	0.02	-0.02	0.02	-0.03	0.03	-0.04	0.05
23	1	0.01	-0.08	0.16	-0.02	0.05	-0.05	0.00	-0.06	-0.01
24	1	-0.09	0.04	-0.01	-0.01	0.05	-0.05	0.08	-0.11	0.10

25	1	-0.10	0.05	0.02	0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.04	-0.01
26	6	0.03	0.13	0.00	-0.01	0.20	0.00	-0.06	0.04	0.01
27	1	0.05	0.04	0.03	0.09	0.37	-0.15	0.06	0.17	-0.13
28	1	0.07	0.14	0.02	-0.20	0.10	-0.14	-0.22	-0.05	-0.12
29	6	0.02	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.04
30	1	0.02	-0.05	-0.04	0.03	0.03	-0.01	-0.07	-0.05	0.06
31	1	0.05	-0.10	-0.07	0.01	0.00	0.05	-0.04	0.02	-0.02
32	6	0.02	0.12	0.14	-0.03	-0.01	-0.01	0.01	-0.06	-0.06
33	1	0.10	0.25	0.22	-0.01	-0.09	-0.01	-0.06	0.01	-0.11
34	6	0.06	0.08	-0.07	-0.02	0.00	0.07	0.00	-0.05	-0.05
35	1	0.20	0.23	-0.20	-0.01	-0.08	0.14	-0.13	-0.03	-0.07
36	6	-0.02	-0.01	-0.05	-0.02	0.01	-0.07	-0.02	0.00	-0.05
37	1	-0.02	0.02	-0.10	-0.08	0.05	-0.18	0.00	-0.07	0.06
38	1	-0.02	0.02	-0.01	-0.05	0.05	-0.04	-0.03	-0.05	-0.16
39	1	-0.02	0.00	-0.03	-0.03	0.04	0.03	-0.02	-0.05	-0.08
40	6	0.03	0.14	0.02	-0.07	0.09	0.06	-0.05	0.06	0.06
41	1	-0.03	0.14	0.00	-0.15	0.09	0.03	-0.06	0.14	-0.03
42	6	0.01	0.00	-0.04	-0.03	-0.05	0.08	-0.04	-0.03	0.07
43	1	0.06	-0.06	-0.05	-0.10	-0.18	0.22	-0.11	-0.06	0.15
44	1	0.10	-0.01	-0.17	-0.03	-0.06	-0.12	-0.10	-0.04	0.05
45	1	0.02	-0.11	0.09	-0.06	-0.13	0.04	-0.06	0.00	-0.04
46	6	0.03	-0.04	-0.05	0.08	-0.01	-0.08	0.04	0.00	-0.03
47	1	0.07	0.00	-0.13	0.04	0.00	-0.04	0.03	-0.01	-0.01
48	6	0.01	-0.06	-0.01	0.06	-0.14	-0.04	0.04	-0.05	-0.02
49	1	0.06	0.07	0.00	0.14	-0.12	0.05	0.05	-0.19	0.05
50	1	0.03	-0.15	-0.11	-0.10	-0.20	-0.13	-0.07	0.03	0.05
51	6	-0.08	-0.05	0.05	0.02	-0.11	0.03	0.09	-0.02	-0.06
52	1	-0.07	-0.08	0.02	-0.01	-0.18	-0.05	0.05	-0.02	-0.09
53	6	0.04	0.00	-0.02	-0.01	0.03	0.02	-0.05	0.01	0.05
54	1	0.08	0.00	-0.03	-0.02	0.04	0.05	-0.11	0.02	0.10
55	6	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.02
56	1	-0.04	0.00	0.06	0.02	-0.03	-0.01	0.06	-0.01	-0.06
57	6	0.03	0.01	-0.03	-0.03	0.02	0.00	-0.05	0.01	0.04
58	1	0.04	0.01	-0.06	-0.10	0.03	0.01	-0.14	0.02	0.14
59	8	-0.01	-0.02	0.05	0.05	-0.01	0.00	0.03	-0.06	-0.02
60	8	0.07	0.00	0.00	-0.05	0.05	0.03	0.13	-0.02	-0.06
61	8	-0.04	0.01	0.07	-0.12	-0.01	-0.02	-0.03	-0.01	-0.02
62	6	0.02	0.01	0.03	0.02	0.01	-0.05	0.01	0.04	0.09
63	6	-0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.05	0.02	-0.01	0.11	0.01
64	6	0.01	-0.01	-0.01	-0.04	-0.01	0.03	0.08	0.00	-0.08
65	8	-0.02	-0.02	0.02	0.01	0.01	-0.06	-0.04	-0.10	0.10
66	1	0.03	-0.03	0.00	-0.07	0.03	0.00	0.08	-0.08	-0.05
67	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01
68	1	-0.02	-0.05	-0.01	0.03	0.07	0.00	-0.10	-0.22	-0.03
69	1	-0.01	0.00	0.01	0.01	-0.03	-0.04	-0.04	0.04	0.09
70	1	-0.02	0.00	0.02	0.02	-0.04	-0.04	-0.06	0.05	0.09
71	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.04	-0.01	0.04
72	1	0.01	-0.02	0.00	-0.03	0.05	0.03	0.04	-0.10	-0.06
73	1	0.02	-0.02	-0.01	-0.04	0.07	0.04	-0.03	-0.10	0.02
74	1	-0.04	-0.01	0.05	0.05	0.03	-0.09	-0.16	-0.06	0.19

58

A

59

A

60

A

Frequencies --	616.8961	619.5628	631.4857
Red. masses --	3.5399	3.5870	4.2551
Frc consts --	0.7937	0.8113	0.9998
IR Inten --	4.4856	14.5359	9.1836
Raman Activ --	1.6795	2.8210	2.2760
Depolar (P) --	0.3383	0.5603	0.4134
Depolar (U) --	0.5056	0.7182	0.5849

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.07	-0.05	0.03
2	6	0.05	0.03	0.05	-0.02	-0.01	-0.02	-0.07	-0.04	-0.04
3	6	0.00	-0.03	-0.08	-0.01	0.02	0.03	-0.07	0.06	0.02
4	6	0.02	-0.03	0.02	-0.01	0.02	-0.01	-0.03	0.17	0.03
5	6	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.09	-0.03
6	6	0.00	0.04	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.02	-0.03	-0.03
7	8	0.05	0.05	-0.06	-0.02	-0.02	0.02	-0.06	-0.06	0.06
8	6	0.01	-0.04	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.02	0.04	-0.04
9	6	-0.07	0.04	-0.05	0.02	-0.01	0.02	0.04	-0.03	0.05
10	1	-0.07	-0.06	-0.07	0.02	0.02	0.03	0.01	0.10	0.09
11	8	0.00	0.05	0.03	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	-0.08	-0.03
12	6	-0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.03	0.10	-0.04
13	1	-0.05	0.02	0.02	0.02	0.01	-0.02	0.10	0.19	-0.12
14	6	-0.09	0.04	0.12	-0.01	0.00	0.00	-0.05	0.03	0.08
15	8	-0.09	0.01	0.04	-0.18	0.04	0.19	-0.02	-0.01	-0.04
16	6	0.05	-0.01	0.03	-0.02	0.00	-0.01	-0.05	0.01	-0.03
17	1	0.02	0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.02	-0.06	0.06
18	1	0.04	0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.08	-0.01	-0.01
19	1	0.11	0.00	0.05	-0.04	0.00	-0.02	-0.16	0.00	-0.03
20	6	-0.04	0.04	-0.07	0.02	-0.02	0.03	0.06	-0.07	0.09
21	1	-0.01	-0.02	-0.11	0.01	0.00	0.04	0.03	-0.03	0.12
22	6	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01
23	1	-0.02	-0.07	0.00	0.01	0.03	0.00	0.04	0.12	-0.05
24	1	0.04	-0.09	0.06	-0.01	0.03	-0.02	0.02	0.08	-0.05
25	1	-0.06	0.00	-0.06	0.03	0.00	0.03	0.17	-0.06	0.11
26	6	0.03	0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.06	0.00
27	1	-0.07	0.04	0.05	0.03	0.00	-0.03	0.01	-0.03	-0.04
28	1	0.04	0.11	0.04	-0.04	-0.04	-0.02	-0.09	-0.05	-0.03
29	6	-0.02	-0.01	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.02	-0.02
30	1	-0.06	-0.04	0.04	0.02	0.02	-0.01	0.06	0.07	-0.04
31	1	-0.04	0.02	-0.03	0.01	-0.01	0.01	0.03	0.02	0.05
32	6	-0.04	-0.08	-0.01	0.02	0.03	0.00	0.08	0.08	-0.04
33	1	-0.13	-0.08	-0.08	0.05	0.03	0.03	0.17	0.05	0.03
34	6	-0.06	-0.05	0.03	0.02	0.02	-0.01	0.07	0.07	-0.04
35	1	-0.20	-0.06	0.04	0.07	0.02	-0.01	0.20	0.06	-0.03
36	6	0.02	0.00	0.08	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.02
37	1	0.00	0.04	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.07	-0.11	0.18
38	1	0.01	0.03	0.12	-0.01	-0.02	-0.06	0.01	-0.08	-0.18
39	1	0.02	0.02	0.11	-0.01	-0.01	-0.05	0.00	-0.07	-0.11
40	6	-0.02	-0.11	-0.02	0.00	0.04	0.01	-0.03	-0.03	0.02
41	1	-0.06	-0.22	0.07	0.01	0.09	-0.03	0.01	0.05	-0.04
42	6	0.03	0.02	-0.05	-0.01	-0.01	0.02	0.03	0.02	-0.03
43	1	0.07	-0.02	-0.07	-0.03	0.00	0.04	0.06	0.07	-0.09
44	1	0.09	0.02	-0.14	-0.04	-0.01	0.06	0.03	0.02	0.05



45	1	0.04	-0.05	0.04	-0.02	0.02	-0.02	0.04	0.05	-0.01
46	6	0.04	0.03	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.08	0.03	0.06
47	1	0.00	0.02	0.05	0.00	-0.01	-0.01	0.08	0.01	0.09
48	6	0.03	-0.06	0.02	0.00	0.01	-0.01	0.12	-0.08	0.05
49	1	0.08	0.19	-0.02	-0.02	-0.08	0.00	0.14	0.06	0.02
50	1	0.07	-0.26	-0.19	-0.03	0.07	0.06	0.11	-0.21	-0.10
51	6	-0.08	-0.10	0.15	0.03	0.02	-0.05	0.02	-0.11	0.10
52	1	-0.03	-0.16	0.12	0.02	0.04	-0.04	0.05	-0.17	0.07
53	6	0.05	0.02	-0.06	-0.12	0.02	0.12	0.05	0.02	-0.07
54	1	0.16	0.00	-0.15	-0.07	0.00	0.07	0.10	0.01	-0.13
55	6	0.01	0.00	-0.03	0.18	-0.03	-0.17	-0.05	0.00	0.01
56	1	0.03	-0.04	-0.03	0.50	-0.09	-0.50	-0.12	-0.02	0.10
57	6	0.08	-0.01	-0.12	0.13	-0.03	-0.12	0.00	0.00	-0.04
58	1	0.27	-0.04	-0.38	0.33	-0.06	-0.30	0.07	-0.01	-0.17
59	8	0.01	0.04	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.02	-0.05	-0.03
60	8	0.05	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.04	-0.05
61	8	-0.06	0.02	-0.03	0.01	-0.01	0.01	-0.11	0.04	-0.04
62	6	0.02	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.07	0.01	0.03
63	6	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	0.01
64	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01	-0.04
65	8	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.05
66	1	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.06
67	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
68	1	-0.02	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.09	-0.01
69	1	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.05	0.05
70	1	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.05	0.05
71	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01
72	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.05	-0.06
73	1	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.05	0.02
74	1	-0.03	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.03	0.07

	61	62	63
	A	A	A
Frequencies --	646.4378	668.8650	686.9578
Red. masses --	3.7871	4.6206	2.6209
Frc consts --	0.9324	1.2179	0.7287
IR Inten --	11.8100	12.8788	5.4224
Raman Activ --	0.5746	0.9188	1.4738
Depolar (P) --	0.7426	0.4769	0.2819
Depolar (U) --	0.8523	0.6458	0.4398

	Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.02	-0.04	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.01	
2	6	-0.03	0.03	-0.01	0.02	0.05	-0.02	-0.02	0.00	0.01	
3	6	0.03	-0.03	-0.03	0.04	-0.01	0.04	0.00	0.01	-0.01	
4	6	0.03	-0.07	0.00	0.17	0.03	-0.04	0.02	0.03	-0.01	
5	6	0.01	-0.05	0.03	0.05	-0.01	0.00	0.02	-0.07	0.07	
6	6	0.00	0.02	0.01	-0.02	-0.05	-0.03	0.09	0.00	0.03	
7	8	0.01	0.00	0.00	0.04	0.05	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	
8	6	0.02	0.04	-0.04	-0.08	-0.08	0.08	0.02	0.00	-0.02	
9	6	-0.01	-0.02	0.05	0.15	-0.02	-0.08	-0.02	0.01	0.01	
10	1	-0.09	0.14	0.12	0.13	-0.09	-0.08	-0.03	0.02	0.01	
11	8	-0.01	-0.09	-0.02	-0.05	0.13	0.04	0.00	-0.02	0.00	
12	6	-0.06	-0.03	-0.10	0.24	-0.04	-0.13	-0.02	0.06	0.02	

13	1	-0.10	-0.05	-0.08	0.37	-0.01	-0.16	-0.03	0.07	0.01
14	6	-0.02	0.00	0.01	-0.05	0.01	0.04	-0.16	0.03	0.15
15	8	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
16	6	-0.04	0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
17	1	0.03	-0.04	0.07	-0.13	0.09	-0.13	0.03	-0.01	0.03
18	1	-0.10	-0.01	-0.01	0.05	0.05	-0.03	-0.02	0.00	0.00
19	1	-0.14	0.01	-0.03	0.17	0.02	0.05	-0.01	0.00	0.01
20	6	0.08	-0.02	0.08	0.01	-0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
21	1	0.06	0.04	0.11	0.00	-0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
22	6	-0.03	0.03	-0.05	-0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.05	0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.02
24	1	-0.08	0.11	-0.10	-0.02	0.03	-0.04	0.01	0.01	-0.01
25	1	0.00	0.03	0.01	-0.03	0.03	0.00	0.03	-0.02	0.02
26	6	0.03	0.02	0.00	-0.06	-0.07	0.00	0.01	0.03	0.01
27	1	-0.02	0.00	0.04	-0.01	-0.13	0.00	0.03	0.08	-0.02
28	1	0.08	0.04	0.03	-0.03	-0.06	0.01	-0.03	0.02	-0.02
29	6	0.02	0.01	-0.03	-0.08	0.00	0.13	0.00	0.00	-0.01
30	1	0.06	0.05	-0.05	-0.10	-0.05	0.14	0.01	0.00	-0.01
31	1	0.03	0.01	0.04	-0.06	-0.07	0.04	0.00	0.01	0.01
32	6	-0.02	0.02	0.02	-0.07	-0.03	0.03	0.03	0.01	-0.04
33	1	0.03	-0.07	0.04	-0.05	0.03	0.06	0.03	-0.02	-0.04
34	6	-0.01	0.02	0.06	-0.01	-0.06	-0.02	0.01	0.02	0.01
35	1	0.08	-0.03	0.11	-0.01	-0.10	0.02	0.01	0.00	0.02
36	6	0.02	-0.02	0.11	-0.01	-0.01	-0.05	-0.02	0.01	-0.05
37	1	-0.04	0.01	0.03	-0.13	-0.04	-0.08	-0.04	-0.01	-0.04
38	1	-0.02	0.01	0.11	-0.15	-0.01	-0.21	-0.06	0.01	-0.09
39	1	0.01	-0.01	0.20	-0.04	-0.06	0.19	-0.03	-0.02	0.01
40	6	0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.07	0.02	-0.01	0.00	0.01
41	1	-0.01	-0.09	0.03	0.04	0.13	-0.03	-0.03	0.02	-0.01
42	6	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.01	-0.04	0.00	-0.02	0.04
43	1	-0.02	-0.03	0.02	0.04	0.08	-0.09	-0.12	-0.09	0.18
44	1	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.02	0.07	-0.12	-0.03	0.02
45	1	-0.01	-0.02	-0.02	0.03	0.07	-0.04	-0.04	0.04	-0.15
46	6	-0.04	-0.01	-0.04	-0.03	-0.05	0.02	-0.04	-0.04	-0.10
47	1	-0.05	0.00	-0.03	-0.05	-0.02	0.00	-0.04	-0.03	-0.12
48	6	-0.06	0.04	-0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.06	0.03	-0.07
49	1	-0.06	0.03	-0.01	-0.02	-0.04	0.02	-0.05	-0.19	0.03
50	1	-0.06	0.06	0.00	-0.01	0.07	0.07	-0.18	0.18	0.09
51	6	-0.03	0.05	-0.01	-0.01	0.03	-0.02	0.05	0.07	-0.07
52	1	-0.02	0.06	0.02	0.02	0.05	0.01	0.17	0.12	0.03
53	6	0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.01	-0.02	0.07	-0.02	-0.07
54	1	0.02	-0.01	-0.01	0.07	-0.02	-0.07	0.21	-0.05	-0.21
55	6	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.02	0.01	0.03
56	1	-0.01	0.01	0.01	-0.04	0.02	0.05	-0.14	0.03	0.14
57	6	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
58	1	0.04	-0.01	-0.01	0.13	-0.02	-0.10	0.44	-0.08	-0.44
59	8	-0.01	0.03	0.01	-0.02	-0.03	0.01	-0.01	-0.02	-0.01
60	8	0.04	0.08	-0.09	-0.08	-0.01	-0.03	0.01	-0.01	0.01
61	8	0.05	-0.02	0.01	-0.08	0.03	0.07	0.03	-0.05	0.04
62	6	0.02	0.10	-0.02	-0.10	0.03	-0.03	0.01	-0.01	0.02
63	6	0.05	0.12	0.10	0.05	0.02	0.05	-0.01	-0.02	-0.02
64	6	0.10	0.00	-0.10	0.05	0.01	-0.04	-0.02	0.00	0.02

65	8	-0.02	-0.14	-0.02	0.03	-0.03	0.00	-0.01	0.01	0.02
66	1	-0.06	-0.06	-0.19	-0.07	0.03	-0.13	0.03	0.00	0.05
67	6	-0.01	-0.06	-0.03	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	-0.16	-0.34	-0.07	-0.06	-0.10	-0.03	0.03	0.06	0.01
69	1	-0.07	0.08	0.14	-0.02	0.08	0.07	0.01	-0.03	-0.03
70	1	-0.09	0.05	0.10	-0.03	0.04	0.04	0.02	-0.01	-0.02
71	6	-0.11	0.03	0.15	-0.03	0.01	0.04	0.02	-0.01	-0.03
72	1	-0.01	-0.08	-0.08	0.02	-0.03	-0.08	0.00	0.01	0.01
73	1	-0.24	-0.05	0.19	-0.14	-0.01	0.09	0.06	0.00	-0.05
74	1	-0.26	-0.02	0.22	-0.09	-0.01	0.03	0.05	0.00	-0.03

		64		65		66
		A		A		A
Frequencies --		696.6059		703.3477		722.1832
Red. masses --		4.6657		3.6142		3.0487
Frc consts --		1.3339		1.0534		0.9368
IR Inten --		22.6411		4.4208		12.3489
Raman Activ --		0.8407		0.9355		2.6117
Depolar (P) --		0.7468		0.1529		0.5165
Depolar (U) --		0.8551		0.2653		0.6811

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

33	1	-0.15	-0.10	0.03	-0.14	0.02	0.11	-0.09	0.16	-0.14
34	6	-0.08	-0.03	0.06	-0.04	-0.06	-0.02	0.00	0.05	-0.02
35	1	-0.15	0.03	0.01	-0.07	0.06	-0.12	-0.42	0.34	-0.27
36	6	0.00	0.02	-0.04	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.01	-0.02
37	1	0.01	-0.08	0.13	0.02	0.00	-0.02	0.05	0.03	-0.02
38	1	-0.07	-0.04	-0.24	0.05	-0.01	0.02	0.07	0.01	0.08
39	1	-0.02	-0.09	-0.01	0.01	0.02	-0.10	0.00	0.05	-0.15
40	6	0.01	-0.05	0.02	-0.03	0.11	0.04	0.00	-0.02	0.00
41	1	-0.05	-0.09	0.04	0.03	0.23	-0.05	0.01	-0.02	0.00
42	6	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.02
43	1	0.03	-0.01	-0.03	-0.01	0.08	-0.02	-0.02	-0.03	0.06
44	1	0.04	0.01	-0.08	-0.07	-0.01	0.22	-0.01	-0.01	-0.02
45	1	0.00	-0.05	0.05	0.00	0.10	-0.04	-0.01	-0.02	0.01
46	6	0.01	-0.06	-0.07	-0.01	0.06	0.12	0.01	0.00	-0.03
47	1	0.08	-0.04	-0.16	-0.09	0.05	0.22	0.04	0.00	-0.06
48	6	-0.01	0.01	0.00	0.05	-0.04	0.01	0.00	0.00	-0.01
49	1	0.07	0.05	0.07	-0.07	-0.16	-0.09	0.01	-0.02	0.01
50	1	-0.01	0.01	0.00	0.05	0.01	0.06	-0.02	0.01	0.00
51	6	-0.07	0.02	0.01	0.12	-0.03	-0.05	0.01	0.00	-0.01
52	1	-0.10	0.02	0.00	0.17	-0.03	-0.02	0.02	0.01	-0.01
53	6	-0.01	-0.01	0.02	0.02	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
54	1	-0.04	0.00	0.06	0.07	-0.01	-0.11	0.01	0.00	0.00
55	6	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.05	0.00	-0.04	-0.09	0.00	0.08	-0.02	0.01	0.02
57	6	0.02	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.13	0.03	0.16	0.26	-0.05	-0.30	0.05	-0.01	-0.05
59	8	-0.10	-0.09	0.02	-0.03	-0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
60	8	-0.01	-0.06	-0.03	0.00	0.02	0.01	-0.03	-0.05	0.02
61	8	-0.03	-0.02	0.06	0.00	0.05	-0.07	0.02	-0.02	0.00
62	6	-0.13	-0.01	0.01	0.05	0.01	-0.01	-0.13	0.01	-0.09
63	6	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.05	0.02	0.04
64	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.07	0.00	-0.04
65	8	0.03	0.00	0.05	-0.01	0.00	-0.03	0.06	0.01	-0.07
66	1	-0.03	0.05	-0.04	0.01	-0.02	0.00	-0.13	0.07	-0.20
67	6	0.01	0.03	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.03	0.00
68	1	0.01	0.05	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	-0.09	-0.11	-0.04
69	1	0.01	0.05	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.16	0.10
70	1	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.05	0.04	0.03
71	6	0.03	-0.02	-0.04	-0.02	0.01	0.02	-0.04	0.01	0.07
72	1	0.03	-0.01	-0.06	-0.01	0.00	0.02	0.00	-0.02	-0.07
73	1	-0.01	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.02	-0.18	0.00	0.13
74	1	0.03	-0.02	-0.05	-0.03	0.01	0.03	-0.11	-0.01	0.05

	67	68	69
	A	A	A
Frequencies --	731.9101	738.9121	751.3513
Red. masses --	3.2317	1.4022	4.1687
Frc consts --	1.0200	0.4511	1.3866
IR Inten --	0.4609	11.6448	2.6045
Raman Activ --	5.8845	0.2055	2.4905
Depolar (P) --	0.0972	0.6713	0.2193
Depolar (U) --	0.1771	0.8033	0.3597
Atom AN	X Y Z	X Y Z	X Y Z

1	6	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.05	-0.04
2	6	0.12	-0.08	0.12	0.00	0.00	-0.01	-0.07	0.00	0.06
3	6	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.12	-0.09	0.01
4	6	0.08	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.16	-0.11	-0.05
5	6	0.04	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.08	0.02	-0.03
6	6	-0.01	-0.02	-0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.04	-0.05	-0.03
7	8	-0.03	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.05	0.00
8	6	0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01	-0.07
9	6	-0.02	0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.06	0.10	0.06
10	1	-0.13	0.16	0.08	0.01	-0.01	0.00	-0.04	0.04	0.05
11	8	-0.01	0.02	0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.01
12	6	-0.02	0.02	-0.11	0.00	-0.01	0.01	-0.06	0.08	0.12
13	1	-0.03	0.00	-0.09	-0.01	-0.02	0.01	-0.30	0.02	0.15
14	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
15	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.11	0.02	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01	0.01
17	1	-0.10	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.09	0.00	0.08
18	1	-0.10	0.01	-0.08	0.01	0.00	0.01	-0.06	0.04	-0.02
19	1	-0.11	0.02	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01	0.07
20	6	0.06	-0.05	0.05	0.00	0.01	0.00	-0.09	0.04	-0.05
21	1	0.06	-0.05	0.04	0.00	0.01	0.00	-0.09	0.07	-0.03
22	6	-0.07	0.05	-0.11	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.01
23	1	-0.08	0.07	-0.14	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.03	0.09
24	1	-0.04	0.06	-0.13	0.01	-0.02	0.02	-0.08	0.06	-0.04
25	1	-0.03	0.04	-0.08	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.02	0.01
26	6	-0.02	-0.03	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.07	-0.06	-0.01
27	1	0.01	-0.06	0.00	0.02	0.01	-0.01	-0.01	-0.11	-0.01
28	1	-0.01	-0.04	0.00	-0.03	-0.02	-0.01	-0.03	-0.10	0.00
29	6	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.09	0.02
30	1	0.01	0.02	0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.11	0.02
31	1	0.01	-0.04	0.06	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.03	0.01
32	6	0.13	-0.06	0.02	-0.01	0.00	0.01	0.09	0.04	-0.15
33	1	-0.09	0.10	-0.14	0.00	0.01	0.01	0.15	-0.16	-0.14
34	6	-0.02	0.06	0.04	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.10	0.10
35	1	-0.44	0.30	-0.18	0.02	-0.01	-0.01	0.02	-0.05	0.22
36	6	0.02	-0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.06
37	1	-0.07	-0.03	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.14	0.07	-0.27
38	1	-0.08	-0.01	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.08	-0.02
39	1	-0.01	-0.04	0.19	0.00	0.01	-0.02	-0.01	0.04	0.22
40	6	0.00	0.04	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.10	-0.01
41	1	0.02	0.07	-0.02	0.00	0.03	-0.01	-0.02	0.09	0.00
42	6	0.00	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
43	1	0.02	0.04	-0.06	-0.02	0.00	0.02	0.05	0.09	-0.13
44	1	0.01	0.01	0.01	-0.03	0.00	0.01	0.01	0.00	0.13
45	1	0.01	0.03	-0.02	0.00	0.02	-0.06	0.02	0.04	0.05
46	6	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.11
47	1	-0.05	0.00	0.05	-0.01	0.00	0.00	-0.18	0.03	0.22
48	6	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.01
49	1	-0.01	0.03	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.06	-0.03	-0.06
50	1	0.01	-0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.06	0.00	0.03
51	6	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01
52	1	-0.02	0.00	0.01	0.04	0.01	0.02	0.01	0.00	-0.01

53	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
54	1	0.02	0.00	-0.03	0.37	-0.07	-0.38	0.03	-0.01	-0.04
55	6	-0.01	0.00	0.01	-0.10	0.02	0.09	-0.01	0.00	0.01
56	1	0.06	-0.01	-0.06	0.47	-0.10	-0.47	0.04	-0.01	-0.04
57	6	0.01	0.00	-0.01	0.07	-0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.09	0.01	0.08	-0.33	0.06	0.32	0.00	0.00	0.00
59	8	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.02
60	8	0.01	0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	0.01
61	8	-0.02	0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.04	0.08	-0.02
62	6	0.13	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.01	-0.11	0.01	-0.04
63	6	-0.05	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.02
64	6	-0.06	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01
65	8	-0.06	-0.02	0.06	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.01	-0.02
66	1	0.13	-0.07	0.19	0.00	0.00	-0.01	-0.11	0.06	-0.12
67	6	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01
68	1	0.07	0.08	0.04	-0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.00	-0.02
69	1	0.02	-0.15	-0.09	0.00	0.01	0.01	0.00	0.09	0.04
70	1	0.04	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01
71	6	0.03	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
72	1	0.00	0.02	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05
73	1	0.16	0.00	-0.12	-0.01	0.00	0.01	-0.08	0.00	0.04
74	1	0.09	0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.03

	70	71	72
	A	A	A
Frequencies --	765.4691	772.7524	785.5698
Red. masses --	3.2031	4.1504	3.5510
Frc consts --	1.1058	1.4602	1.2911
IR Inten --	7.1326	40.1779	6.9214
Raman Activ --	7.3980	4.4199	1.8794
Depolar (P) --	0.1262	0.1782	0.2661
Depolar (U) --	0.2241	0.3025	0.4203

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

21	1	-0.03	0.08	0.00	-0.04	0.03	-0.01	-0.15	-0.14	0.09
22	6	0.02	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.02	-0.01
23	1	-0.02	-0.05	-0.02	0.02	-0.03	0.06	-0.01	0.20	-0.17
24	1	0.07	-0.12	0.11	-0.04	0.02	-0.01	0.01	0.17	-0.19
25	1	-0.03	-0.01	-0.06	-0.04	0.02	-0.01	0.24	-0.11	0.24
26	6	-0.04	-0.08	0.03	0.01	0.02	-0.01	-0.03	-0.01	-0.03
27	1	0.01	-0.02	-0.04	0.00	0.00	0.01	-0.09	-0.05	0.03
28	1	-0.10	-0.12	-0.02	0.02	0.03	0.01	0.07	-0.01	0.02
29	6	0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.03	0.01	0.01	0.20	-0.10
30	1	0.01	0.01	-0.02	-0.02	-0.05	0.02	0.09	0.36	-0.12
31	1	-0.01	0.03	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.06	0.14	0.03
32	6	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.03	0.00	-0.08	0.03
33	1	0.00	0.03	0.01	0.04	-0.06	-0.02	-0.18	0.10	-0.09
34	6	0.01	-0.01	-0.03	-0.01	0.03	0.03	0.00	-0.08	-0.06
35	1	0.02	0.02	-0.06	0.01	-0.02	0.07	-0.24	0.02	-0.15
36	6	-0.02	0.01	-0.09	0.00	0.02	-0.03	0.00	0.00	-0.03
37	1	-0.11	0.01	-0.15	0.02	-0.02	0.04	-0.06	0.02	-0.10
38	1	-0.09	0.03	-0.13	-0.02	-0.01	-0.10	-0.04	0.03	-0.02
39	1	-0.04	0.00	0.07	0.00	-0.02	-0.03	-0.01	0.01	0.08
40	6	-0.02	0.03	0.04	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.06	-0.08
41	1	0.04	0.14	-0.05	-0.03	-0.07	0.03	0.06	0.06	-0.05
42	6	0.07	0.05	-0.13	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00
43	1	-0.05	0.03	-0.01	0.04	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.02
44	1	-0.05	0.04	-0.10	0.02	-0.01	0.03	0.01	0.00	0.01
45	1	0.04	0.14	-0.34	0.00	-0.03	0.11	0.00	0.00	0.01
46	6	-0.03	0.03	-0.07	0.01	-0.05	0.00	-0.01	0.00	0.01
47	1	-0.04	-0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.05	-0.06	0.00	0.06
48	6	-0.10	0.08	0.01	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	-0.04	0.25	0.02	0.05	-0.05	0.03	-0.01	-0.02	-0.01
50	1	-0.11	-0.07	-0.16	0.04	0.03	0.06	-0.01	0.01	0.00
51	6	-0.01	-0.01	0.17	-0.03	0.02	-0.04	0.01	0.00	0.00
52	1	0.02	-0.03	0.17	-0.04	0.02	-0.04	0.01	0.01	0.01
53	6	0.01	0.05	-0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
54	1	-0.26	0.09	0.20	0.05	-0.02	-0.03	-0.01	0.00	0.00
55	6	0.02	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
56	1	-0.21	-0.01	0.20	0.04	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
57	6	0.02	-0.03	-0.04	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.29	0.03	0.19	0.07	0.00	-0.03	-0.02	0.00	0.02
59	8	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.09	0.04	0.05
60	8	-0.03	-0.02	0.01	-0.14	-0.09	0.04	0.00	-0.02	0.02
61	8	0.01	-0.04	0.00	-0.03	0.02	0.03	-0.01	0.01	-0.01
62	6	0.06	-0.03	-0.01	0.30	-0.16	-0.01	0.01	-0.03	-0.01
63	6	-0.01	0.01	-0.01	-0.04	0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00
64	6	0.01	0.00	-0.02	0.04	0.02	-0.10	0.01	0.00	-0.02
65	8	-0.01	0.02	-0.03	-0.05	0.08	-0.10	0.00	0.02	-0.02
66	1	0.06	-0.03	0.03	0.40	-0.20	0.22	0.02	-0.01	-0.01
67	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.03	0.01	0.01	0.00
68	1	-0.01	-0.05	0.00	-0.02	-0.23	0.02	-0.01	-0.03	0.00
69	1	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.08	0.07	0.00	0.02	0.03
70	1	0.00	0.04	0.04	0.02	0.26	0.21	0.00	0.04	0.03
71	6	-0.03	0.01	0.03	-0.13	0.04	0.14	-0.02	0.00	0.02
72	1	-0.02	0.00	0.04	-0.10	-0.01	0.22	-0.02	0.00	0.02

73	1	0.00	0.00	0.02	0.04	-0.04	0.05	-0.01	0.00	0.02
74	1	-0.04	0.01	0.06	-0.17	0.02	0.31	-0.02	0.00	0.04
		73			74			75		
		A			A			A		
Frequencies --		796.6185			801.2001			813.7477		
Red. masses --		3.5645			1.7821			3.8559		
Frc consts --		1.3327			0.6740			1.5044		
IR Inten --		11.4022			32.6376			1.0138		
Raman Activ --		1.9945			0.9129			6.0149		
Depolar (P) --		0.4822			0.5553			0.6109		
Depolar (U) --		0.6507			0.7141			0.7584		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	0.18	0.12	0.00	0.01	0.01	-0.05	-0.06	-0.01
2	6	-0.03	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02
3	6	-0.02	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.16	-0.18
4	6	0.10	-0.04	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.03	-0.05	-0.03
5	6	0.07	0.04	-0.06	0.01	0.03	-0.05	0.02	0.03	-0.08
6	6	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.04	0.01
7	8	-0.03	-0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.01
8	6	-0.01	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
9	6	0.04	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.01	-0.04
10	1	-0.01	-0.04	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.03	-0.04
11	8	-0.04	-0.13	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.03	0.01	0.00
12	6	0.04	-0.03	-0.08	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	-0.01	0.05
13	1	-0.05	-0.06	-0.06	-0.01	-0.01	0.00	-0.08	-0.05	0.09
14	6	-0.02	0.00	-0.05	-0.11	0.02	0.09	-0.02	0.00	-0.03
15	8	0.03	0.00	0.02	-0.02	0.01	0.03	0.02	0.00	0.02
16	6	0.06	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01
17	1	0.04	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
18	1	0.14	-0.06	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
19	1	0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	-0.02
20	6	-0.09	0.14	0.01	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.06	0.02
21	1	-0.10	0.22	0.05	0.00	0.01	0.00	0.05	-0.13	-0.03
22	6	0.02	0.01	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02
23	1	-0.11	-0.04	-0.22	-0.01	0.00	-0.01	0.03	0.11	-0.07
24	1	0.26	-0.33	0.29	0.01	-0.02	0.02	0.03	0.09	-0.08
25	1	-0.03	-0.05	-0.14	0.00	0.00	-0.01	0.17	-0.08	0.16
26	6	0.02	0.01	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.14	-0.01	0.11
27	1	0.01	0.00	0.01	0.00	0.02	0.00	0.53	0.07	-0.15
28	1	0.02	0.03	0.00	0.01	0.03	0.00	-0.16	-0.20	-0.13
29	6	-0.01	0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.02
30	1	0.03	0.11	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.02	0.06	-0.02
31	1	-0.02	0.09	0.08	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00
32	6	0.04	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03
33	1	0.01	0.11	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.07	-0.04
34	6	0.04	-0.03	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.01
35	1	0.00	0.05	-0.17	0.00	0.00	-0.01	-0.10	0.04	-0.05
36	6	0.03	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.01	0.03
37	1	-0.11	0.01	-0.09	0.02	0.00	0.02	-0.03	0.06	-0.10
38	1	-0.08	0.02	-0.02	0.02	-0.01	0.03	0.00	0.04	0.10
39	1	0.01	-0.01	0.26	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.04	0.09
40	6	0.01	-0.06	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.03	0.23



41	1	0.01	-0.07	0.01	-0.01	-0.02	0.01	-0.08	0.20	0.01
42	6	-0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.02	0.05	0.02	0.00	-0.04
43	1	0.04	0.00	-0.03	-0.02	-0.01	0.05	0.01	0.08	-0.07
44	1	0.04	0.00	-0.02	-0.03	-0.02	0.08	-0.02	0.01	0.11
45	1	0.00	-0.05	0.11	-0.01	-0.01	0.04	0.03	0.09	-0.10
46	6	0.00	-0.07	0.01	-0.01	-0.04	0.01	-0.01	-0.07	0.01
47	1	-0.07	-0.01	0.00	-0.04	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.06
48	6	0.02	-0.03	0.00	0.03	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.02
49	1	0.06	-0.01	0.05	0.02	-0.13	0.01	0.04	0.09	0.03
50	1	0.06	0.02	0.06	0.02	0.06	0.08	0.11	0.01	0.05
51	6	-0.08	0.03	-0.05	0.01	0.03	-0.06	-0.08	0.02	-0.02
52	1	-0.13	0.03	-0.07	0.09	0.04	-0.01	-0.11	0.02	-0.04
53	6	-0.01	-0.04	0.01	0.03	-0.02	-0.03	-0.01	-0.03	0.01
54	1	0.08	-0.04	-0.03	-0.16	0.02	0.17	0.04	-0.03	0.01
55	6	0.00	0.00	0.03	0.05	-0.01	-0.04	0.02	-0.01	0.01
56	1	0.09	0.02	-0.08	-0.35	0.08	0.35	-0.03	0.04	0.03
57	6	-0.02	0.03	0.03	0.11	-0.01	-0.11	0.00	0.02	0.01
58	1	0.18	-0.01	-0.11	-0.52	0.10	0.54	0.05	0.01	0.00
59	8	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.06	-0.10
60	8	-0.02	0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.03
61	8	-0.04	0.04	0.03	-0.01	0.02	0.01	-0.02	0.03	0.02
62	6	0.02	0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.02
63	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
64	6	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
65	8	-0.02	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.02
66	1	0.02	-0.02	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.03	-0.06
67	6	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
68	1	0.02	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01
69	1	0.00	-0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.03
70	1	0.01	-0.03	-0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
71	6	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
72	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
73	1	0.04	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.02
74	1	0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00

76	77	78
A	A	A

Frequencies --	834.8182	843.0488	851.8545
Red. masses --	4.2054	2.2621	3.7215
Frc consts --	1.7268	0.9473	1.5911
IR Inten --	8.7574	17.4461	17.0668
Raman Activ --	3.1907	2.5204	2.4895
Depolar (P) --	0.7271	0.4820	0.4209
Depolar (U) --	0.8420	0.6505	0.5924

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.05	-0.02	-0.08	-0.11
2	6	-0.01	0.01	-0.01	0.17	-0.10	0.11	0.00	0.01	0.03
3	6	0.00	0.05	-0.06	-0.01	0.02	-0.03	0.02	0.00	-0.08
4	6	0.04	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.05	0.02	-0.02
5	6	-0.06	-0.05	0.28	-0.01	0.00	0.01	-0.09	-0.03	0.00
6	6	-0.14	0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.03	-0.02	-0.02
7	8	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.01
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.02	-0.07	-0.01	-0.03

9	6	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.17	-0.05	0.15
10	1	0.01	-0.02	0.00	0.02	0.02	-0.01	0.26	-0.10	0.09
11	8	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.00	-0.02	-0.02	0.04	0.00
12	6	0.02	0.03	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.05
13	1	0.04	0.04	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.07	0.04	-0.12
14	6	-0.09	0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.04	-0.01	0.03
15	8	0.04	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.03
16	6	-0.01	0.00	0.00	0.07	-0.03	0.05	0.08	-0.03	0.08
17	1	-0.01	0.00	-0.01	0.08	0.01	0.08	-0.02	0.01	-0.07
18	1	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.02	0.22	-0.02	0.08
19	1	-0.01	0.00	-0.01	0.11	-0.01	0.11	0.20	-0.03	0.05
20	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.03	-0.15	0.05	-0.06
21	1	0.01	0.01	-0.01	-0.08	-0.08	0.06	-0.25	0.26	0.10
22	6	0.01	-0.01	0.02	-0.05	0.06	-0.07	0.05	-0.07	0.04
23	1	0.00	0.01	-0.02	-0.11	0.03	-0.19	0.12	-0.06	0.21
24	1	0.03	-0.02	0.02	0.06	-0.07	0.00	-0.10	0.10	-0.06
25	1	0.03	-0.02	0.02	-0.05	0.02	-0.13	0.03	-0.01	0.13
26	6	0.02	-0.03	0.00	0.02	0.00	0.02	0.06	0.02	0.03
27	1	0.08	-0.13	0.02	0.08	0.02	-0.03	0.19	-0.02	-0.03
28	1	0.04	-0.06	0.00	-0.03	-0.04	-0.02	-0.01	-0.03	-0.03
29	6	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.01	-0.05
30	1	0.00	0.00	0.01	0.02	0.08	-0.01	0.02	0.09	-0.03
31	1	-0.01	0.01	0.01	0.02	-0.04	0.02	0.03	-0.06	-0.01
32	6	0.00	0.00	0.01	-0.07	0.06	-0.06	0.06	-0.02	-0.05
33	1	-0.04	0.04	-0.02	0.46	-0.35	0.32	-0.02	-0.03	-0.12
34	6	0.01	-0.01	0.00	-0.09	0.06	-0.07	-0.01	0.04	0.06
35	1	-0.03	0.03	-0.03	0.38	-0.30	0.25	-0.15	0.02	0.07
36	6	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.06
37	1	-0.12	0.02	-0.13	0.00	0.01	0.00	0.06	-0.02	0.12
38	1	-0.11	0.04	-0.09	0.01	0.00	0.03	0.04	-0.02	0.07
39	1	-0.03	0.00	0.17	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01
40	6	0.03	-0.02	0.05	0.00	0.01	0.03	0.00	0.05	0.06
41	1	0.02	0.00	0.02	-0.01	0.04	-0.01	-0.08	0.06	0.02
42	6	-0.03	0.03	-0.05	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
43	1	0.10	0.03	-0.18	0.00	0.01	-0.01	0.03	0.03	-0.05
44	1	0.11	0.03	-0.14	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.06
45	1	0.00	-0.09	0.18	0.00	0.02	-0.03	0.01	0.01	0.04
46	6	0.13	0.26	0.05	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.04	0.01
47	1	-0.07	0.11	0.43	0.02	0.00	0.00	0.12	-0.01	-0.06
48	6	0.05	-0.03	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.01
49	1	0.05	-0.27	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.03	-0.08
50	1	-0.30	0.05	-0.04	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.01
51	6	-0.06	-0.05	-0.12	-0.01	0.00	-0.01	0.09	-0.03	0.02
52	1	-0.15	-0.01	-0.12	-0.01	0.00	-0.01	0.12	-0.01	0.05
53	6	0.00	-0.06	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.01
54	1	0.10	-0.05	0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.04	0.02	-0.09
55	6	0.03	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02
56	1	-0.10	0.09	0.09	-0.02	0.01	0.02	-0.05	-0.04	0.07
57	6	0.03	0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00
58	1	-0.06	0.07	0.10	-0.01	0.00	0.01	-0.04	-0.02	0.02
59	8	-0.03	-0.03	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	-0.02
60	8	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.04	-0.10

61	8	0.05	-0.09	-0.07	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.02	0.00
62	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.06	0.03
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02
64	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.02
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.03
66	1	0.03	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.05	0.15
67	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	-0.01
68	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.03	0.03
69	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.09
70	1	0.00	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.04	-0.02
71	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.03
72	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.03	-0.04
73	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.03	-0.05
74	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01

		79		80		81
		A		A		A
Frequencies --		863.4892		866.5271		888.7652
Red. masses --		3.1816		1.3552		2.1548
Frc consts --		1.3977		0.5995		1.0028
IR Inten --		11.2475		1.1709		7.1646
Raman Activ --		6.7108		0.6223		2.8098
Depolar (P) --		0.2837		0.6478		0.7352
Depolar (U) --		0.4420		0.7862		0.8474

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.05	0.07	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03
2	6	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.01
3	6	0.04	0.03	-0.08	0.00	-0.01	0.02	0.04	-0.01	-0.01
4	6	0.04	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.05	0.00
5	6	-0.06	-0.06	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.07	-0.09	0.01
6	6	-0.12	0.01	-0.07	0.01	0.00	0.01	0.05	-0.02	-0.02
7	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
8	6	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01
9	6	-0.03	0.03	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.03
10	1	-0.08	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	-0.03
11	8	0.00	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.02
12	6	0.04	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.06	0.00
13	1	0.08	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	0.08	0.08	-0.01
14	6	0.10	-0.02	0.08	0.02	0.00	-0.03	-0.02	0.04	-0.01
15	8	-0.07	0.02	-0.08	0.01	0.00	0.00	0.06	-0.06	0.07
16	6	-0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.02
18	1	-0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
19	1	-0.05	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
20	6	0.04	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01
21	1	0.07	-0.08	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	0.00
22	6	-0.02	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01
23	1	-0.08	0.06	-0.19	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.00	-0.05
24	1	0.12	-0.09	0.06	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.03	0.02
25	1	0.04	-0.04	-0.04	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.01	-0.04
26	6	0.02	0.05	-0.06	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.02
27	1	-0.01	-0.18	0.08	0.00	0.02	-0.01	-0.03	0.00	0.02
28	1	0.11	0.21	0.06	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.11	0.02

29	6	-0.02	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.04
30	1	0.00	0.02	0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.05	0.02
31	1	-0.03	0.05	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.06
32	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
33	1	0.00	0.04	0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.02
34	6	0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
35	1	0.03	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.02
36	6	0.02	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00
37	1	-0.05	0.04	-0.10	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.04	-0.08
38	1	-0.02	0.03	0.08	0.00	0.00	-0.01	0.05	0.01	0.13
39	1	0.01	0.03	0.13	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.05	-0.03
40	6	0.02	-0.01	0.07	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.01	0.02
41	1	-0.04	-0.04	0.07	0.00	-0.01	-0.01	-0.05	-0.01	0.03
42	6	-0.07	-0.01	0.05	0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.03	0.03
43	1	0.12	-0.01	-0.13	-0.01	0.00	0.01	-0.09	-0.03	0.14
44	1	0.11	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	-0.02	-0.10	-0.03	0.09
45	1	-0.02	-0.17	0.39	0.00	0.01	-0.04	-0.01	0.06	-0.16
46	6	-0.04	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.05
47	1	0.05	-0.02	-0.03	0.01	0.00	-0.02	0.16	-0.01	-0.06
48	6	-0.03	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.02	0.08
49	1	-0.19	-0.18	-0.13	0.01	0.06	0.01	-0.13	0.24	-0.12
50	1	-0.10	0.07	0.01	0.03	-0.03	-0.01	0.20	-0.12	-0.05
51	6	0.19	-0.03	0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03
52	1	0.28	0.04	0.16	-0.05	-0.01	-0.03	0.02	-0.12	-0.11
53	6	0.00	0.11	0.03	-0.10	0.01	0.10	-0.03	0.00	-0.04
54	1	0.06	0.05	-0.19	0.58	-0.13	-0.58	0.03	0.03	0.04
55	6	0.00	0.02	-0.04	0.06	-0.02	-0.06	-0.05	-0.04	-0.04
56	1	-0.05	-0.13	0.13	-0.36	0.08	0.36	-0.08	0.09	-0.10
57	6	-0.01	-0.09	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	0.05	0.00
58	1	-0.05	-0.09	0.02	-0.03	0.01	0.03	-0.07	0.07	-0.06
59	8	-0.03	-0.04	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01
60	8	0.01	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.01
61	8	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	-0.06
62	6	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00	-0.01
63	6	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.03	0.02
64	6	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.04
65	8	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
66	1	0.06	-0.03	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.43	-0.21	0.34
67	6	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	-0.03
68	1	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.04	0.08
69	1	0.00	0.02	0.03	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.24	-0.04
70	1	0.00	0.07	0.05	0.00	0.00	0.00	0.09	0.21	0.15
71	6	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01
72	1	-0.03	0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.04
73	1	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
74	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02

	82	83	84
	A	A	A
Frequencies --	894.4122	895.3043	900.2979
Red. masses --	2.1681	3.7773	2.6769
Frc consts --	1.0219	1.7839	1.2784
IR Inten --	6.7651	20.5857	2.9159

				Raman Activ --	6.1001			0.4295			1.6755
				Depolar (P) --	0.7427			0.7498			0.7074
				Depolar (U) --	0.8524			0.8570			0.8286
	Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	-0.01	-0.05	0.09	0.02	0.08	-0.03	0.00	-0.02	
2	6	0.05	-0.01	0.00	-0.09	0.03	-0.01	0.02	-0.01	0.00	
3	6	-0.10	0.01	-0.04	0.15	-0.05	0.11	-0.03	0.02	-0.05	
4	6	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03	-0.02	0.03	0.01	0.00	0.00	
5	6	0.04	0.04	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.05	-0.10	0.03	
6	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.03	0.06	-0.02	-0.04	
7	8	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	
8	6	0.05	0.01	0.00	-0.06	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	
9	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.01	0.00	
10	1	0.00	-0.04	0.00	0.03	0.06	-0.03	0.01	-0.01	0.01	
11	8	-0.02	0.01	0.01	0.03	-0.02	-0.03	-0.01	-0.01	0.00	
12	6	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.04	-0.02	
13	1	-0.03	-0.01	0.03	0.04	0.00	0.00	0.05	0.07	-0.04	
14	6	-0.01	-0.04	-0.01	-0.03	-0.07	-0.01	-0.05	-0.05	-0.02	
15	8	-0.05	0.07	-0.06	-0.09	0.12	-0.11	-0.06	0.10	-0.08	
16	6	-0.02	0.01	-0.03	0.03	-0.01	0.05	-0.01	0.00	-0.01	
17	1	0.03	0.00	0.05	-0.05	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.01	
18	1	-0.10	0.01	-0.04	0.14	-0.02	0.05	-0.03	0.01	-0.01	
19	1	-0.08	0.02	-0.01	0.10	-0.02	0.02	-0.02	0.01	0.00	
20	6	0.02	0.02	-0.03	-0.02	-0.05	0.05	0.00	0.02	-0.01	
21	1	0.08	0.06	-0.06	-0.10	-0.14	0.08	0.03	0.05	-0.02	
22	6	0.03	-0.04	0.04	-0.04	0.07	-0.09	0.01	-0.02	0.03	
23	1	0.04	0.02	0.00	-0.06	-0.05	0.02	0.01	0.02	-0.03	
24	1	0.04	0.01	0.00	-0.09	0.00	-0.01	0.04	-0.02	0.02	
25	1	0.10	-0.06	0.10	-0.18	0.13	-0.17	0.06	-0.04	0.05	
26	6	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.08	0.00	0.04	-0.06	
27	1	-0.01	-0.01	0.00	0.12	0.17	-0.09	-0.11	-0.09	0.07	
28	1	0.06	-0.06	0.00	-0.19	-0.15	-0.07	0.09	0.20	0.06	
29	6	0.02	-0.04	0.01	-0.05	0.06	0.01	0.00	-0.01	0.02	
30	1	-0.03	-0.12	0.02	0.04	0.19	-0.02	-0.02	-0.04	0.02	
31	1	-0.02	0.04	-0.05	0.03	-0.06	0.10	-0.02	0.04	-0.01	
32	6	-0.03	0.01	0.03	0.05	-0.01	-0.04	-0.01	0.00	0.01	
33	1	0.03	-0.07	0.07	-0.06	0.12	-0.11	0.01	-0.03	0.03	
34	6	-0.02	0.00	-0.01	0.04	-0.01	0.02	-0.01	0.00	-0.01	
35	1	0.08	-0.02	0.01	-0.13	0.04	-0.03	0.03	-0.01	0.00	
36	6	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.00	
37	1	-0.03	0.03	-0.07	0.08	-0.01	0.06	-0.04	0.01	-0.06	
38	1	0.01	0.02	0.07	0.06	-0.02	0.03	-0.02	0.01	0.01	
39	1	0.01	0.03	0.03	-0.01	0.00	-0.19	0.00	0.01	0.08	
40	6	0.00	0.04	-0.04	0.00	-0.06	0.01	-0.01	0.03	0.01	
41	1	0.08	0.10	-0.07	-0.12	-0.17	0.08	0.01	0.05	0.00	
42	6	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.04	0.02	-0.03	0.05	
43	1	0.01	0.01	-0.02	0.00	0.04	-0.04	-0.11	-0.05	0.18	
44	1	0.02	0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.11	-0.04	0.08	
45	1	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.04	-0.06	-0.02	0.04	-0.17	
46	6	0.00	-0.02	-0.02	0.02	0.02	0.01	-0.01	0.02	0.05	
47	1	-0.10	0.01	0.05	0.01	0.02	0.03	0.16	0.00	-0.07	
48	6	0.02	-0.01	-0.02	0.01	-0.02	-0.01	-0.03	0.01	0.10	

49	1	0.08	-0.06	0.07	0.01	-0.04	0.00	-0.10	0.30	-0.11
50	1	-0.05	0.04	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.26	-0.15	-0.04
51	6	-0.03	0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.02	-0.03	-0.01	-0.05
52	1	-0.04	0.04	0.03	-0.04	0.01	-0.01	-0.01	-0.15	-0.15
53	6	0.03	-0.04	0.04	0.06	-0.08	0.07	0.04	-0.10	0.06
54	1	-0.02	-0.07	-0.04	-0.09	-0.12	0.00	-0.04	-0.13	-0.02
55	6	0.06	0.04	0.05	0.10	0.07	0.10	0.09	0.05	0.08
56	1	0.08	-0.06	0.10	0.16	-0.12	0.16	0.12	-0.05	0.13
57	6	-0.02	-0.03	-0.01	-0.03	-0.06	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02
58	1	0.08	-0.06	0.08	0.14	-0.10	0.16	0.12	-0.05	0.13
59	8	0.02	-0.02	0.07	-0.03	0.07	-0.11	0.01	-0.03	0.04
60	8	0.02	0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00
61	8	-0.01	-0.01	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.06	-0.08
62	6	-0.09	0.03	-0.02	-0.04	0.01	-0.01	0.06	-0.03	0.02
63	6	0.05	-0.03	0.04	0.02	-0.01	0.02	-0.03	0.02	-0.03
64	6	-0.03	0.02	-0.04	-0.01	0.01	-0.02	0.02	-0.02	0.02
65	8	0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.01
66	1	0.50	-0.23	0.41	0.21	-0.10	0.17	-0.31	0.14	-0.26
67	6	-0.04	0.02	-0.03	-0.02	0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.02
68	1	0.10	-0.04	0.09	0.04	-0.02	0.04	-0.07	0.02	-0.06
69	1	0.00	-0.31	-0.07	0.00	-0.13	-0.03	0.00	0.20	0.05
70	1	0.11	0.22	0.15	0.05	0.09	0.06	-0.07	-0.13	-0.09
71	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.00
73	1	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
74	1	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00

	85	86	87
	A	A	A
Frequencies --	919.6130	925.4857	935.5082
Red. masses --	2.8550	2.5654	2.3859
Frc consts --	1.4226	1.2946	1.2303
IR Inten --	6.3635	33.7853	21.5974
Raman Activ --	2.5808	1.7278	1.5821
Depolar (P) --	0.7340	0.1943	0.6448
Depolar (U) --	0.8466	0.3254	0.7841

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.01	0.05	0.01	-0.01	0.00	0.05	-0.01	-0.06
2	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01
3	6	0.06	0.07	0.02	0.02	0.03	0.02	-0.05	0.13	-0.02
4	6	0.06	0.05	0.04	0.03	0.07	-0.04	-0.02	-0.02	0.01
5	6	0.04	-0.05	0.03	-0.01	-0.01	0.01	0.05	0.00	0.01
6	6	0.01	0.03	-0.04	0.01	0.01	-0.02	0.02	0.07	0.01
7	8	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
8	6	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.00	-0.02	-0.07	-0.03	0.00
9	6	-0.04	-0.10	0.05	-0.04	-0.04	0.05	0.03	0.05	-0.02
10	1	0.04	-0.20	-0.02	-0.13	-0.04	0.09	0.06	0.17	-0.01
11	8	0.00	0.10	0.04	-0.02	0.07	0.05	0.04	-0.06	-0.06
12	6	-0.07	-0.05	0.08	-0.04	-0.10	-0.07	-0.02	-0.01	-0.01
13	1	-0.08	-0.04	0.07	-0.03	-0.16	-0.01	-0.10	-0.05	0.02
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	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	6	0.00	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.02	0.01	-0.02	0.05

17	1	0.01	0.01	0.02	0.02	-0.01	0.01	-0.10	0.03	-0.11
18	1	-0.04	0.01	-0.02	0.04	-0.01	0.03	0.15	0.00	0.04
19	1	0.01	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.16	-0.02	0.03
20	6	0.01	-0.05	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.01
21	1	0.00	-0.10	0.00	-0.06	0.03	0.05	-0.03	-0.01	0.03
22	6	-0.03	0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.04	-0.02	-0.02
23	1	-0.05	0.04	-0.08	0.01	-0.01	0.04	0.10	-0.09	0.22
24	1	0.02	-0.01	-0.01	-0.03	0.02	-0.02	-0.13	0.08	-0.06
25	1	0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.02	0.00	-0.08	0.07	-0.01
26	6	-0.04	-0.01	-0.08	-0.01	0.00	-0.03	-0.05	-0.07	-0.08
27	1	-0.17	-0.20	0.10	-0.06	-0.07	0.04	-0.20	-0.22	0.09
28	1	0.05	0.27	0.09	0.01	0.12	0.03	0.08	0.15	0.09
29	6	0.06	-0.02	-0.10	0.04	-0.04	-0.12	-0.09	0.07	0.07
30	1	0.03	-0.01	-0.08	0.06	0.05	-0.09	0.03	0.19	0.01
31	1	0.09	-0.09	-0.13	0.09	-0.14	-0.07	-0.02	-0.05	0.16
32	6	-0.01	0.01	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.04
33	1	0.00	0.04	0.04	0.01	0.02	-0.01	0.02	0.00	-0.05
34	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.02	0.04
35	1	0.05	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.09	0.00	0.05
36	6	0.01	0.03	-0.06	0.04	0.04	0.03	-0.02	-0.01	-0.01
37	1	-0.05	-0.04	0.02	-0.03	-0.10	0.21	0.01	0.03	-0.06
38	1	-0.10	0.00	-0.25	-0.12	-0.03	-0.30	0.04	0.00	0.08
39	1	-0.02	-0.07	0.07	0.00	-0.13	0.19	0.00	0.04	-0.08
40	6	0.02	-0.06	0.07	0.01	-0.02	0.03	0.04	-0.03	0.05
41	1	0.08	-0.03	0.05	0.03	0.00	0.01	0.23	0.13	-0.06
42	6	-0.02	0.01	0.06	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.06	0.04
43	1	0.00	-0.09	0.09	-0.02	-0.04	0.06	-0.03	-0.19	0.20
44	1	0.03	0.00	-0.10	-0.01	-0.01	-0.03	0.05	0.03	-0.35
45	1	-0.03	-0.10	0.12	-0.02	-0.03	0.01	-0.05	-0.16	0.07
46	6	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.04	-0.02
47	1	-0.10	0.01	0.02	0.08	-0.01	-0.04	-0.24	0.03	0.07
48	6	0.00	-0.02	0.03	-0.01	0.01	0.02	0.03	-0.06	-0.01
49	1	0.01	0.08	0.00	-0.02	0.08	-0.02	0.11	-0.04	0.08
50	1	0.11	-0.04	0.02	0.04	-0.04	-0.03	0.04	-0.02	0.04
51	6	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.05	0.02
52	1	0.01	-0.02	-0.03	0.03	-0.05	-0.04	-0.02	0.05	0.02
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
54	1	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.03
55	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
58	1	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
59	8	-0.02	-0.02	-0.04	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.04	0.02
60	8	-0.02	-0.04	-0.01	0.06	0.07	0.04	0.01	0.01	0.00
61	8	0.00	0.05	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02
62	6	-0.01	0.07	-0.03	-0.08	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00
63	6	0.04	0.08	0.05	-0.01	-0.11	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01
64	6	-0.03	0.05	0.05	0.02	-0.06	-0.08	0.00	-0.01	-0.01
65	8	0.01	-0.02	-0.03	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
66	1	0.14	0.05	0.17	0.08	-0.18	0.00	0.00	-0.02	-0.01
67	6	-0.06	-0.10	-0.02	0.05	0.13	0.01	0.01	0.02	0.00
68	1	0.08	0.09	0.03	-0.04	-0.12	0.01	-0.01	-0.02	0.00

69	1	0.01	-0.29	-0.19	-0.01	0.19	0.19	0.00	0.04	0.03
70	1	0.07	-0.15	-0.10	-0.02	0.30	0.20	-0.01	0.04	0.03
71	6	0.04	0.04	-0.02	-0.04	-0.06	0.03	-0.01	-0.01	0.00
72	1	0.18	-0.11	-0.22	-0.21	0.14	0.25	-0.04	0.03	0.06
73	1	-0.03	-0.10	-0.01	0.01	0.13	0.03	0.01	0.02	0.00
74	1	-0.15	-0.03	0.12	0.20	0.03	-0.18	0.05	0.01	-0.04

		88		89		90
		A		A		A
Frequencies --		946.7631		955.8017		962.1960
Red. masses --		2.9096		2.0738		1.8979
Frc consts --		1.5366		1.1162		1.0352
IR Inten --		32.7203		10.7087		7.7950
Raman Activ --		3.3333		3.9974		2.8500
Depolar (P) --		0.3738		0.1815		0.7226
Depolar (U) --		0.5442		0.3072		0.8390

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.00	-0.03	-0.02	-0.03	-0.01	0.05	0.01	0.02
2	6	-0.01	0.00	0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.04	0.01	0.02
3	6	-0.04	0.04	0.00	-0.01	0.02	0.06	-0.02	0.00	-0.08
4	6	0.04	0.03	-0.02	0.00	-0.03	0.01	-0.04	0.00	0.02
5	6	-0.02	0.12	-0.04	-0.04	-0.03	0.00	0.04	-0.01	0.03
6	6	0.03	-0.02	-0.07	-0.02	0.06	0.04	0.02	-0.07	-0.03
7	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01
8	6	-0.03	0.04	0.00	0.03	0.12	0.01	-0.03	0.07	0.04
9	6	-0.06	0.08	-0.04	-0.02	0.03	-0.01	-0.01	-0.04	0.00
10	1	-0.13	0.20	0.02	-0.09	0.01	0.02	-0.01	-0.07	-0.01
11	8	0.03	-0.05	-0.02	-0.02	0.01	0.03	0.00	0.04	0.01
12	6	0.01	-0.09	-0.02	0.07	0.00	-0.04	0.01	0.02	0.00
13	1	0.01	-0.16	0.06	0.14	0.01	-0.04	0.08	0.06	-0.03
14	6	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.01
15	8	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.02	0.03	0.03	0.01	0.10	0.01	-0.01	0.07	0.05
17	1	0.00	-0.07	-0.04	0.08	-0.20	0.01	-0.08	-0.12	-0.13
18	1	0.18	-0.08	0.11	0.28	-0.20	0.22	0.37	-0.16	0.21
19	1	-0.09	-0.02	-0.10	-0.41	-0.02	-0.32	-0.20	-0.04	-0.26
20	6	0.00	0.02	0.03	-0.03	0.03	0.02	0.03	-0.03	0.02
21	1	-0.02	-0.01	0.03	-0.04	0.01	0.01	0.01	-0.07	0.02
22	6	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.03	-0.02
23	1	0.07	-0.06	0.15	0.04	0.03	0.05	-0.03	-0.02	-0.03
24	1	-0.09	0.06	-0.05	-0.06	0.10	-0.10	0.02	-0.06	0.05
25	1	-0.05	0.04	-0.01	0.06	-0.02	0.09	-0.06	0.04	-0.10
26	6	0.00	0.01	-0.06	0.00	-0.06	0.05	0.01	0.07	-0.05
27	1	-0.10	-0.07	0.04	0.08	0.00	-0.03	-0.07	-0.01	0.03
28	1	0.04	0.18	0.04	-0.08	-0.12	-0.02	0.10	0.13	0.03
29	6	-0.05	-0.01	0.04	0.02	-0.12	0.01	0.00	-0.05	-0.02
30	1	0.05	0.08	0.00	0.02	-0.13	0.02	0.05	0.02	-0.04
31	1	0.00	-0.10	0.14	0.02	-0.14	0.00	0.08	-0.22	0.01
32	6	0.03	-0.01	-0.05	0.00	-0.02	-0.04	0.02	-0.01	-0.06
33	1	0.01	-0.04	-0.07	-0.01	-0.11	-0.06	0.00	-0.01	-0.08
34	6	-0.01	0.00	0.01	-0.02	-0.02	-0.03	0.00	-0.02	-0.01
35	1	-0.09	-0.03	0.04	-0.02	-0.10	0.03	-0.04	-0.11	0.06
36	6	0.03	0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0.00



37	1	-0.04	-0.04	0.05	0.00	0.03	-0.08	0.03	0.03	-0.04
38	1	-0.08	0.00	-0.14	0.04	0.01	0.09	0.06	0.00	0.11
39	1	0.01	-0.05	0.13	0.00	0.04	-0.03	-0.01	0.05	-0.10
40	6	-0.02	0.00	0.01	0.01	-0.04	0.01	-0.01	0.04	0.00
41	1	0.04	0.05	-0.02	0.07	0.02	-0.04	-0.08	-0.02	0.04
42	6	0.00	-0.06	0.05	-0.01	0.06	0.00	0.01	-0.06	-0.02
43	1	-0.03	0.04	0.02	0.00	-0.12	0.11	0.01	0.13	-0.13
44	1	-0.07	-0.05	0.23	0.07	0.05	-0.32	-0.06	-0.05	0.30
45	1	0.00	0.06	-0.02	-0.04	-0.13	0.08	0.04	0.14	-0.10
46	6	0.09	0.06	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.01
47	1	0.36	-0.04	-0.11	0.10	0.02	-0.13	-0.28	0.01	0.19
48	6	-0.07	0.10	0.00	0.00	-0.04	0.02	0.04	0.00	-0.03
49	1	-0.07	0.17	-0.02	-0.08	0.01	-0.09	0.14	-0.07	0.13
50	1	-0.17	-0.03	-0.16	0.11	-0.07	0.00	-0.05	0.10	0.07
51	6	-0.01	-0.09	-0.02	0.04	0.03	-0.02	-0.05	0.00	0.04
52	1	0.07	-0.17	-0.07	0.04	0.00	-0.04	-0.08	0.07	0.09
53	6	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00
54	1	0.03	-0.02	0.02	-0.03	0.00	0.01	0.02	0.01	-0.02
55	6	0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00
57	6	0.00	0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
58	1	-0.02	0.04	-0.02	0.00	-0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.01
59	8	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.04	0.01	-0.03	0.04
60	8	0.02	-0.04	0.07	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.01	-0.01
61	8	-0.03	-0.11	0.10	0.00	0.02	-0.03	0.01	0.02	0.00
62	6	-0.02	0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.02	0.04	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	-0.01	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
65	8	0.01	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
66	1	0.09	0.07	0.07	0.00	0.02	0.00	-0.02	-0.01	-0.01
67	6	-0.03	-0.05	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
68	1	0.04	0.07	0.02	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00
69	1	0.01	-0.14	-0.11	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.03	0.02
70	1	0.04	-0.09	-0.07	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.01
71	6	0.02	0.03	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
72	1	0.10	-0.07	-0.13	0.03	-0.02	-0.03	-0.02	0.01	0.03
73	1	-0.05	-0.06	0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.01	-0.01
74	1	-0.13	-0.02	0.08	-0.03	0.00	0.02	0.03	0.01	-0.02

91	92	93
A	A	A

Frequencies --	962.7362	968.5269	971.7745
Red. masses --	2.1038	2.7212	2.5361
Frc consts --	1.1489	1.5040	1.4110
IR Inten --	23.4175	11.9936	8.3123
Raman Activ --	4.4487	1.8147	4.7399
Depolar (P) --	0.2654	0.3229	0.4826
Depolar (U) --	0.4194	0.4882	0.6510

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

5	6	0.00	-0.04	0.03	-0.07	-0.06	0.06	0.04	-0.05	0.05
6	6	-0.01	-0.02	-0.01	-0.04	-0.02	0.05	0.01	-0.05	-0.06
7	8	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.01
8	6	0.05	0.03	0.09	-0.05	-0.02	-0.03	0.00	0.00	-0.08
9	6	0.03	0.00	0.00	-0.05	0.04	-0.03	0.02	0.09	-0.04
10	1	0.11	0.05	-0.03	-0.15	0.15	0.04	-0.02	0.14	0.00
11	8	0.04	-0.06	-0.08	0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.01
12	6	-0.07	-0.07	0.01	0.01	-0.07	-0.05	0.03	-0.06	-0.04
13	1	-0.17	-0.12	0.05	0.11	-0.11	0.01	0.04	-0.07	-0.03
14	6	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.02	0.02	0.00	-0.01
15	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.09	0.03	0.02	0.04	-0.02	0.01	0.07	0.00	-0.05
17	1	-0.27	0.04	-0.26	0.08	-0.01	0.07	0.30	-0.07	0.30
18	1	0.25	-0.02	0.04	-0.05	0.00	0.00	-0.27	0.00	-0.04
19	1	0.05	-0.01	-0.13	0.02	0.00	0.06	-0.16	0.03	0.08
20	6	0.00	0.03	-0.03	0.01	0.02	0.03	-0.04	0.05	-0.01
21	1	0.04	0.08	-0.04	0.01	0.03	0.03	-0.04	0.09	0.00
22	6	-0.01	-0.03	0.01	0.02	0.01	0.02	0.01	-0.04	0.01
23	1	0.01	0.06	-0.02	0.00	-0.05	0.02	0.06	0.02	0.08
24	1	0.00	0.06	-0.06	0.02	-0.06	0.07	-0.05	0.10	-0.09
25	1	0.08	-0.05	0.11	-0.05	0.02	-0.07	0.09	-0.05	0.14
26	6	0.03	0.03	0.01	0.02	0.02	0.06	0.06	0.07	-0.04
27	1	0.05	0.02	0.00	0.09	0.15	-0.05	0.04	-0.07	0.04
28	1	-0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.22	-0.05	0.01	0.26	0.02
29	6	0.03	0.06	0.11	-0.06	0.00	-0.01	-0.06	-0.05	0.05
30	1	-0.12	-0.30	0.11	0.08	0.20	-0.05	0.03	0.10	0.03
31	1	-0.12	0.35	-0.14	0.04	-0.18	0.16	-0.02	-0.13	0.18
32	6	0.00	-0.01	-0.06	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.06
33	1	0.05	-0.10	-0.04	0.00	0.04	-0.01	-0.01	-0.04	0.06
34	6	-0.02	-0.02	-0.04	0.01	0.01	0.03	0.00	0.01	0.01
35	1	0.00	-0.17	0.09	-0.05	0.07	-0.02	0.01	0.13	-0.09
36	6	0.02	0.06	-0.01	0.04	0.05	0.04	-0.05	0.02	-0.05
37	1	0.00	-0.10	0.22	-0.03	-0.09	0.20	0.06	-0.03	0.07
38	1	-0.10	-0.03	-0.32	-0.11	-0.02	-0.26	0.04	-0.04	-0.06
39	1	-0.01	-0.13	0.07	0.01	-0.12	0.19	-0.03	-0.02	-0.23
40	6	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.04	-0.07	-0.04	-0.05	0.06
41	1	-0.06	-0.07	0.04	-0.09	-0.03	-0.02	-0.05	-0.06	0.07
42	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.05	-0.02	-0.05	0.01
43	1	0.02	0.04	-0.07	0.01	0.04	-0.07	0.04	0.09	-0.14
44	1	0.01	-0.01	0.08	0.01	0.02	-0.02	-0.01	-0.04	0.24
45	1	0.01	0.02	0.03	0.02	0.04	-0.06	0.02	0.05	0.06
46	6	-0.03	-0.01	-0.01	-0.09	0.00	-0.04	-0.04	-0.01	0.00
47	1	-0.09	0.01	0.01	-0.13	0.10	-0.17	-0.25	-0.01	0.18
48	6	0.03	-0.01	0.02	0.08	-0.08	0.05	0.03	0.02	-0.01
49	1	0.03	0.01	0.02	0.07	-0.01	0.01	0.11	-0.03	0.10
50	1	0.08	0.02	0.06	0.29	-0.01	0.16	-0.01	0.10	0.08
51	6	0.00	0.01	0.00	0.03	0.05	-0.01	-0.04	0.00	0.03
52	1	-0.01	0.02	0.01	-0.03	0.09	0.00	-0.06	0.04	0.06
53	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.02	0.00
54	1	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.02	-0.01	0.02	0.02	0.01
55	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00

57	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.00	-0.01	0.01
58	1	0.01	-0.01	0.01	0.03	-0.04	0.04	0.02	-0.01	0.00
59	8	0.00	0.02	-0.04	0.01	-0.03	0.07	0.01	0.05	-0.09
60	8	0.01	0.01	0.01	0.03	-0.04	0.09	0.01	0.01	0.01
61	8	0.01	0.02	-0.02	0.01	0.03	-0.06	0.02	0.03	-0.02
62	6	-0.01	0.01	-0.01	-0.03	-0.03	-0.03	0.00	0.01	0.00
63	6	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
66	1	0.03	-0.02	0.02	0.08	0.10	0.04	0.01	-0.01	0.00
67	6	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	-0.01	0.00	0.04	0.09	0.02	0.00	-0.01	0.00
69	1	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.11	-0.10	0.00	0.00	0.01
70	1	0.01	0.03	0.02	0.04	-0.09	-0.07	0.00	0.01	0.01
71	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
72	1	-0.01	0.01	0.01	0.11	-0.08	-0.14	-0.01	0.01	0.02
73	1	0.00	0.01	0.00	-0.07	-0.08	0.03	0.01	0.01	0.00
74	1	0.02	0.00	-0.02	-0.15	-0.02	0.11	0.02	0.01	-0.02

	94	95	96
	A	A	A
Frequencies --	984.7888	994.6222	1002.0581
Red. masses --	2.1630	2.1626	2.7032
Frc consts --	1.2359	1.2605	1.5992
IR Inten --	9.9824	14.7581	12.1626
Raman Activ --	2.1081	1.7537	2.5574
Depolar (P) --	0.6954	0.4428	0.5045
Depolar (U) --	0.8203	0.6138	0.6706

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.05
2	6	0.00	0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03
3	6	0.04	-0.02	-0.03	0.11	-0.05	-0.09	0.13	-0.04	-0.06
4	6	0.01	0.03	-0.05	-0.05	0.03	-0.03	-0.03	-0.01	-0.03
5	6	-0.01	0.02	-0.01	0.04	-0.05	-0.04	-0.06	0.12	0.03
6	6	0.00	0.01	0.01	0.02	0.00	0.04	0.02	0.01	-0.03
7	8	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.01	0.04	-0.04	0.00	0.01	-0.01	0.03	0.02	-0.01
9	6	0.10	0.00	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.03	-0.01
10	1	0.31	-0.13	-0.14	-0.06	0.06	0.02	-0.03	0.02	0.00
11	8	0.04	0.01	-0.05	0.00	-0.01	0.01	-0.02	-0.02	0.01
12	6	-0.09	-0.02	0.10	0.01	-0.04	-0.05	0.05	-0.03	-0.02
13	1	-0.32	-0.05	0.10	0.10	-0.05	-0.03	0.08	-0.02	-0.02
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	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	6	0.05	0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02
17	1	0.24	-0.15	0.21	0.01	-0.01	0.01	0.04	0.01	0.05
18	1	-0.03	-0.11	0.10	-0.01	0.00	0.00	-0.09	0.03	-0.04
19	1	-0.33	0.01	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04
20	6	0.01	-0.06	-0.06	-0.02	0.05	0.01	-0.08	0.04	0.03
21	1	0.01	-0.11	-0.07	-0.02	0.07	0.02	-0.12	-0.01	0.05
22	6	-0.03	0.03	0.01	-0.04	-0.01	0.03	-0.05	0.01	0.00
23	1	-0.08	0.06	-0.16	-0.07	0.13	-0.20	-0.07	0.12	-0.18
24	1	0.10	-0.08	0.06	0.11	-0.02	0.00	0.07	0.02	-0.04

25	1	0.04	-0.04	-0.03	0.13	-0.10	0.09	0.09	-0.07	0.06
26	6	-0.03	-0.02	0.01	-0.05	-0.03	-0.04	-0.06	-0.05	-0.05
27	1	-0.04	0.02	-0.01	-0.10	-0.11	0.04	-0.09	-0.19	0.03
28	1	-0.01	-0.06	0.00	0.08	0.00	0.05	0.05	0.05	0.05
29	6	-0.10	-0.05	0.11	0.00	-0.01	0.00	0.06	-0.01	0.01
30	1	0.04	0.11	0.06	-0.01	-0.02	0.01	-0.08	-0.18	0.06
31	1	0.03	-0.31	0.18	-0.02	0.03	0.01	-0.06	0.21	-0.10
32	6	-0.02	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
33	1	-0.07	-0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.03	-0.05	-0.03
34	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
35	1	0.02	0.07	-0.07	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.03	-0.03
36	6	0.03	0.03	0.03	-0.05	0.05	0.05	-0.02	-0.02	0.03
37	1	-0.02	-0.06	0.14	0.19	-0.07	0.37	0.06	0.03	0.01
38	1	-0.09	-0.01	-0.18	0.12	-0.10	-0.06	0.09	-0.01	0.16
39	1	0.01	-0.08	0.12	-0.02	-0.06	-0.31	0.01	0.04	-0.12
40	6	0.02	0.01	-0.01	0.02	0.06	0.03	0.03	0.05	0.05
41	1	0.01	-0.01	0.00	-0.04	-0.02	0.08	0.00	0.00	0.09
42	6	0.01	0.01	0.00	0.04	0.04	0.00	0.03	-0.01	0.04
43	1	-0.02	-0.02	0.04	-0.07	-0.11	0.19	-0.09	-0.05	0.17
44	1	0.00	0.01	-0.04	-0.03	0.02	-0.20	-0.09	-0.02	0.00
45	1	0.00	0.00	-0.03	-0.02	-0.03	-0.15	-0.02	0.03	-0.16
46	6	0.01	0.01	-0.01	0.06	-0.03	0.10	-0.07	0.10	-0.13
47	1	0.04	0.01	-0.03	0.11	-0.14	0.22	-0.36	0.23	-0.08
48	6	-0.01	0.00	0.01	-0.04	0.01	-0.09	0.08	-0.05	0.07
49	1	-0.01	0.03	-0.01	-0.11	-0.24	-0.07	0.30	0.22	0.20
50	1	0.00	-0.04	-0.03	-0.28	0.07	-0.06	0.19	-0.10	0.02
51	6	0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.04	0.00	0.03	-0.01
52	1	0.02	-0.02	-0.02	-0.06	0.08	0.10	0.05	-0.07	-0.08
53	6	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00
54	1	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.04	-0.02	-0.01	0.00	-0.02
55	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.02	0.00
57	6	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.02	0.01
58	1	-0.01	0.01	-0.01	-0.04	0.04	-0.05	0.03	-0.03	0.03
59	8	-0.01	-0.02	0.02	-0.02	-0.02	0.02	-0.02	-0.01	-0.01
60	8	-0.02	0.03	-0.06	0.01	-0.01	0.04	0.00	0.01	-0.01
61	8	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.04	-0.02	-0.01	-0.10	0.05
62	6	0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00
63	6	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00
64	6	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
65	8	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
66	1	-0.04	-0.06	-0.01	0.04	0.07	0.00	-0.01	-0.03	0.00
67	6	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00
68	1	-0.02	-0.05	-0.01	0.02	0.06	0.01	0.00	-0.01	0.00
69	1	-0.01	0.04	0.04	0.01	-0.04	-0.05	0.00	0.01	0.01
70	1	-0.02	0.04	0.03	0.02	-0.05	-0.04	0.00	0.02	0.01
71	6	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
72	1	-0.04	0.03	0.05	0.03	-0.03	-0.03	0.02	-0.01	-0.02
73	1	0.04	0.03	-0.02	-0.02	-0.03	0.01	0.00	-0.01	0.00
74	1	0.06	0.01	-0.04	-0.05	0.00	0.05	-0.02	0.00	0.00

97

A

98

A

99

A

Frequencies --	1011.5509	1017.7638	1022.4549
Red. masses --	2.6555	2.3976	2.1448
Frc consts --	1.6009	1.4633	1.3211
IR Inten --	4.8801	30.0425	0.9472
Raman Activ --	6.6943	3.9798	2.7037
Depolar (P) --	0.7408	0.5333	0.2664
Depolar (U) --	0.8511	0.6956	0.4208

  

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.01	0.01	-0.05	0.03	-0.04	0.01	-0.02	0.02
2	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.01
3	6	0.00	0.03	0.02	0.07	-0.03	0.01	0.00	0.04	0.07
4	6	0.00	0.00	-0.04	0.01	-0.01	0.03	-0.01	-0.02	-0.10
5	6	-0.03	0.00	-0.02	0.01	0.03	0.00	-0.06	-0.01	-0.02
6	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00
7	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.05	0.02	0.01	0.00	0.00
9	6	0.01	0.00	0.00	0.05	0.09	-0.06	0.06	0.02	-0.01
10	1	0.02	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.04	0.07	-0.07	-0.02
11	8	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.04	0.09	-0.03	-0.01	0.03
12	6	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.05	-0.02	0.04	-0.01
13	1	-0.04	0.00	0.01	-0.06	0.01	0.04	-0.17	0.00	0.01
14	6	0.00	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01	-0.01
15	8	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00
17	1	0.01	0.00	0.01	-0.20	0.01	-0.20	-0.01	0.00	-0.02
18	1	-0.02	0.00	-0.01	0.21	-0.02	0.06	0.01	0.00	0.00
19	1	-0.01	0.00	0.00	0.12	-0.03	-0.06	0.00	0.00	-0.01
20	6	-0.01	-0.01	0.00	0.15	0.04	-0.07	0.00	-0.02	-0.03
21	1	-0.02	-0.02	0.00	0.24	0.07	-0.14	-0.01	-0.06	-0.04
22	6	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.06	0.04	-0.01	-0.01	-0.02
23	1	0.02	-0.01	0.03	0.00	0.19	-0.13	0.03	0.01	0.05
24	1	-0.03	0.03	-0.03	0.06	0.12	-0.13	-0.07	0.08	-0.08
25	1	-0.01	0.01	0.01	0.22	-0.15	0.25	0.01	0.01	0.05
26	6	-0.02	0.01	-0.01	-0.03	-0.01	0.01	-0.02	0.04	-0.01
27	1	-0.07	0.05	0.00	-0.04	0.05	-0.01	-0.09	0.09	0.00
28	1	-0.03	0.05	0.01	-0.03	-0.05	-0.01	-0.06	0.10	0.00
29	6	0.01	0.00	0.01	-0.05	-0.02	-0.12	0.02	-0.01	-0.02
30	1	-0.01	-0.03	0.01	0.12	0.32	-0.14	-0.02	0.00	0.01
31	1	-0.01	0.03	-0.02	0.06	-0.21	0.23	-0.01	0.03	-0.01
32	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.03
33	1	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.19	0.03	-0.09	0.10	-0.03
34	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.04	-0.01	0.01	-0.02
35	1	0.01	0.00	-0.01	0.17	-0.14	0.11	0.14	-0.07	0.04
36	6	0.02	0.00	0.02	-0.02	0.01	-0.02	0.04	-0.02	0.04
37	1	-0.02	0.00	-0.01	0.04	0.00	0.03	-0.05	0.01	-0.05
38	1	-0.03	0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.04	0.02	0.05
39	1	0.01	-0.01	0.09	-0.01	0.01	-0.11	0.02	0.00	0.18
40	6	0.02	-0.02	0.00	0.03	-0.01	-0.02	0.03	-0.04	0.01
41	1	0.07	0.02	-0.03	0.01	-0.07	0.04	0.08	0.01	-0.03
42	6	0.05	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.02	0.00
43	1	-0.11	-0.03	0.18	0.01	0.04	-0.05	-0.04	0.02	0.04
44	1	-0.11	-0.02	0.03	0.00	-0.01	0.07	-0.06	-0.02	0.07

45	1	0.00	0.07	-0.26	0.01	0.03	0.02	0.01	0.05	-0.12
46	6	0.06	0.01	0.06	0.01	0.02	-0.02	-0.02	0.02	0.00
47	1	0.10	-0.02	0.08	-0.01	0.04	-0.04	-0.11	0.02	0.07
48	6	-0.01	-0.02	-0.04	-0.01	-0.02	0.03	0.04	-0.01	-0.03
49	1	0.01	-0.06	0.00	0.00	0.10	-0.01	0.06	-0.12	0.04
50	1	-0.06	0.04	0.01	0.05	-0.09	-0.05	-0.06	0.06	0.04
51	6	-0.13	0.02	-0.08	0.01	0.03	-0.02	0.00	-0.01	0.05
52	1	-0.18	0.01	-0.10	0.02	-0.04	-0.07	0.00	0.05	0.09
53	6	0.06	0.22	0.01	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.04	0.00
54	1	0.38	0.36	0.30	0.02	0.02	0.02	-0.10	-0.08	-0.10
55	6	-0.06	-0.04	-0.05	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.02	0.01
56	1	-0.02	-0.19	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.03	0.01
57	6	0.01	-0.19	0.05	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.04	-0.01
58	1	0.25	-0.26	0.29	0.03	-0.03	0.04	-0.06	0.05	-0.08
59	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03	0.01	0.03	0.00
61	8	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.01
62	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.03	-0.07	0.02
63	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.05	-0.04	-0.11
64	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.05	0.03	-0.06
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03
66	1	0.02	0.04	0.00	-0.03	-0.03	0.00	0.23	0.38	-0.04
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.04	0.06
68	1	0.01	0.03	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.09	0.37	0.04
69	1	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.05	-0.06	-0.21
70	1	0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.03	0.02	0.06	-0.28	-0.22
71	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.06	0.01	0.08
72	1	0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.02	-0.01	-0.06	0.01	0.04
73	1	-0.01	-0.01	0.01	0.02	-0.02	-0.02	-0.12	0.01	0.12
74	1	-0.02	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.03	-0.10	0.00	0.07

100

101

102

A

A

A

Frequencies --	1026.2442	1027.1407	1029.0608
Red. masses --	1.5050	1.8205	2.3665
Frc consts --	0.9339	1.1316	1.4765
IR Inten --	1.0907	1.7797	58.5748
Raman Activ --	0.9060	5.2890	2.0131
Depolar (P) --	0.7473	0.6319	0.5543
Depolar (U) --	0.8554	0.7744	0.7132

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.02	-0.02	-0.02	0.01	-0.02
2	6	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01
3	6	-0.01	-0.04	-0.01	0.00	-0.07	-0.01	0.03	0.02	-0.05
4	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.07
5	6	0.02	0.01	0.01	0.05	0.02	0.01	0.06	0.01	0.02
6	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.03	-0.01
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01
9	6	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.03	0.01	-0.04	-0.05	0.04
10	1	-0.01	0.02	0.02	0.00	-0.02	0.01	-0.04	0.04	0.04
11	8	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.01	0.03	0.02	-0.05
12	6	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.03

13	1	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.04	-0.03	0.10	0.02	-0.06
14	6	-0.02	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.02	0.02	0.02
15	8	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.01
16	6	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.01
17	1	0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.01	-0.03	0.05	-0.01	0.05
18	1	-0.03	0.00	-0.01	0.06	-0.01	0.03	-0.05	0.00	-0.01
19	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.02
20	6	-0.01	-0.01	0.01	0.04	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.01
21	1	0.01	0.01	0.01	0.08	0.04	-0.03	-0.02	0.07	0.03
22	6	0.01	0.02	0.01	0.00	0.01	0.03	0.00	0.00	0.02
23	1	-0.03	-0.05	-0.02	-0.04	0.01	-0.07	-0.01	0.01	-0.04
24	1	0.04	-0.09	0.09	0.07	-0.07	0.07	0.04	-0.03	0.03
25	1	-0.05	0.02	-0.09	0.02	-0.03	-0.02	0.02	-0.02	0.01
26	6	0.04	-0.03	-0.01	0.04	-0.05	0.00	-0.04	0.01	0.01
27	1	0.11	-0.14	0.01	0.14	-0.17	0.00	-0.06	0.09	-0.02
28	1	0.05	-0.02	0.01	0.05	-0.06	0.00	-0.03	-0.07	-0.01
29	6	-0.01	0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.04
30	1	0.01	0.02	0.00	0.03	0.05	-0.03	0.00	-0.03	0.01
31	1	0.00	-0.02	0.02	0.03	-0.10	0.03	0.00	-0.04	-0.02
32	6	0.07	-0.06	0.05	-0.05	0.04	-0.04	0.03	-0.02	0.01
33	1	-0.41	0.32	-0.30	0.28	-0.21	0.19	-0.12	0.06	-0.10
34	6	-0.07	0.06	-0.04	0.04	-0.04	0.03	-0.03	0.02	0.00
35	1	0.45	-0.31	0.30	-0.30	0.19	-0.17	0.10	-0.08	0.09
36	6	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.01	-0.03	0.00	-0.03
37	1	0.02	-0.01	0.03	0.04	0.00	0.03	0.04	0.01	-0.01
38	1	0.02	-0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.01	0.05	-0.01	0.02
39	1	-0.01	0.00	-0.05	-0.01	0.01	-0.11	-0.02	0.03	-0.15
40	6	-0.05	0.04	0.01	-0.06	0.05	0.00	0.07	-0.02	-0.01
41	1	-0.10	0.01	0.02	-0.12	-0.01	0.05	0.10	-0.02	-0.01
42	6	-0.01	0.03	0.02	-0.02	0.03	0.02	-0.03	-0.06	-0.01
43	1	0.00	-0.08	0.06	0.03	-0.07	0.03	0.06	0.15	-0.21
44	1	0.04	0.02	-0.16	0.06	0.03	-0.16	0.01	-0.03	0.28
45	1	-0.02	-0.08	0.06	-0.03	-0.10	0.13	0.04	0.10	0.08
46	6	-0.02	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03	0.08	0.02	-0.01
47	1	-0.04	-0.03	0.02	-0.06	-0.03	0.02	0.09	0.04	-0.05
48	6	0.01	0.05	0.01	-0.01	0.06	0.03	-0.08	-0.11	0.03
49	1	0.06	0.08	0.07	0.07	0.17	0.08	-0.17	0.10	-0.17
50	1	0.03	0.07	0.04	0.07	0.04	0.02	0.02	-0.31	-0.19
51	6	0.00	-0.06	-0.03	0.01	-0.06	-0.05	0.01	0.16	-0.01
52	1	0.01	-0.06	-0.03	0.04	-0.11	-0.08	0.03	0.02	-0.11
53	6	0.01	0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.01	-0.01
54	1	0.10	0.05	0.10	0.14	0.07	0.14	-0.10	-0.03	-0.10
55	6	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.02	0.00
56	1	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.02	0.00
57	6	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.05	0.00
58	1	0.04	-0.01	0.04	0.06	-0.02	0.07	0.00	-0.05	0.00
59	8	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.02
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.01
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.01	0.01
62	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.06	0.00
63	6	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.02	-0.07	0.01	0.00	-0.06
64	6	0.01	0.00	-0.01	0.03	0.03	-0.05	0.02	0.03	-0.04

65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.02
66	1	0.03	0.04	0.00	0.18	0.23	0.00	0.18	0.15	0.03
67	6	0.00	-0.01	0.01	-0.02	-0.03	0.04	-0.01	-0.03	0.03
68	1	0.01	0.04	0.00	0.04	0.22	0.02	0.02	0.13	0.00
69	1	0.01	0.00	-0.02	0.03	-0.01	-0.13	0.02	0.01	-0.09
70	1	0.00	-0.03	-0.03	0.03	-0.19	-0.15	0.00	-0.15	-0.11
71	6	-0.01	-0.01	0.01	-0.04	-0.03	0.06	-0.02	-0.06	0.06
72	1	-0.02	0.02	0.02	-0.13	0.08	0.09	-0.17	0.14	0.10
73	1	-0.02	0.02	0.02	-0.11	0.09	0.12	-0.12	0.15	0.14
74	1	0.02	0.00	-0.02	0.06	0.01	-0.09	0.16	0.01	-0.22

103                      104                      105  
A                      A                      A

Frequencies --	1045.0527	1045.5983	1050.9373
Red. masses --	2.7874	2.2838	2.0863
Frc consts --	1.7936	1.4711	1.3576
IR Inten --	43.4684	69.2901	13.3402
Raman Activ --	0.5179	6.6190	0.7713
Depolar (P) --	0.7409	0.2096	0.1328
Depolar (U) --	0.8512	0.3466	0.2345

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



33	1	-0.08	-0.05	-0.07	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.02	0.00
34	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
35	1	0.03	0.06	-0.03	-0.01	0.01	-0.01	0.02	0.01	-0.01
36	6	-0.04	0.03	0.01	0.00	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.02
37	1	0.10	-0.02	0.16	0.02	-0.04	0.11	-0.02	-0.02	0.01
38	1	0.05	-0.05	-0.06	0.00	-0.02	-0.07	-0.05	0.01	-0.10
39	1	-0.02	-0.02	-0.22	-0.01	-0.04	-0.03	0.00	-0.02	0.05
40	6	0.04	-0.01	-0.03	-0.10	0.05	0.02	-0.08	0.04	0.01
41	1	0.10	0.07	-0.10	-0.15	0.02	0.03	-0.14	-0.01	0.04
42	6	-0.06	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	0.04	0.02	0.01	0.01
43	1	0.14	0.09	-0.27	-0.02	-0.02	0.05	-0.05	-0.06	0.12
44	1	0.12	0.01	0.08	-0.02	-0.01	0.02	-0.02	0.00	-0.07
45	1	0.02	-0.01	0.25	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.09
46	6	0.01	-0.05	-0.02	0.07	0.02	0.00	0.01	0.01	0.03
47	1	0.02	-0.10	0.04	-0.06	0.02	0.12	0.14	0.03	-0.12
48	6	-0.05	0.04	0.04	-0.06	-0.08	0.01	0.01	-0.04	-0.02
49	1	-0.04	0.18	-0.01	-0.08	0.08	-0.08	-0.07	-0.14	-0.07
50	1	0.07	-0.03	-0.03	-0.05	-0.24	-0.17	-0.02	0.01	0.02
51	6	0.04	-0.04	-0.04	-0.02	0.14	0.01	-0.03	0.04	0.02
52	1	0.05	-0.10	-0.09	0.02	0.01	-0.09	-0.08	0.10	0.05
53	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00
54	1	0.18	0.06	0.18	-0.18	-0.04	-0.17	-0.12	-0.03	-0.11
55	6	-0.02	-0.05	-0.01	0.02	0.05	0.01	0.01	0.03	0.01
56	1	-0.03	-0.01	-0.03	0.02	0.04	0.01	0.02	0.01	0.02
57	6	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.06	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01
58	1	0.08	0.00	0.10	-0.06	-0.05	-0.06	-0.05	-0.01	-0.05
59	8	0.00	-0.03	0.05	0.02	0.02	-0.03	0.02	0.00	0.00
60	8	0.00	0.03	-0.04	0.01	0.05	-0.02	-0.02	-0.01	-0.03
61	8	-0.01	0.03	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01
62	6	-0.01	-0.02	0.01	-0.03	-0.08	0.01	0.03	0.04	0.01
63	6	0.03	-0.02	-0.01	0.04	-0.04	0.01	-0.05	0.05	-0.03
64	6	0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.00	-0.02	0.03	-0.01
65	8	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
66	1	0.00	0.08	-0.04	-0.10	0.07	-0.11	0.15	-0.10	0.15
67	6	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.02	0.01	0.02	-0.03	0.00
68	1	0.03	0.07	0.02	0.05	0.08	0.05	-0.07	-0.06	-0.06
69	1	0.01	-0.03	-0.04	0.01	-0.07	-0.03	0.00	0.11	0.03
70	1	0.03	-0.03	-0.03	0.05	0.04	0.01	-0.07	-0.07	-0.03
71	6	-0.04	0.01	-0.01	-0.04	0.07	-0.03	0.07	-0.07	0.05
72	1	-0.02	-0.02	0.10	0.11	-0.14	0.06	-0.08	0.15	-0.18
73	1	0.10	-0.03	-0.08	0.21	-0.17	-0.20	-0.33	0.18	0.29
74	1	-0.03	0.01	0.12	-0.20	0.00	0.36	0.16	-0.02	-0.43

106

107

108

A

A

A

Frequencies --	1060.6178	1062.4082	1068.3452
Red. masses --	1.8456	2.7314	1.6608
Frc consts --	1.2232	1.8164	1.1168
IR Inten --	15.5462	31.4240	9.8016
Raman Activ --	5.6762	7.1529	1.8104
Depolar (P) --	0.7462	0.2845	0.7489
Depolar (U) --	0.8547	0.4430	0.8564
Atom AN	X Y Z	X Y Z	X Y Z

1	6	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
3	6	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
4	6	0.03	0.01	0.10	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02
5	6	-0.05	0.04	-0.01	0.03	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00
6	6	0.00	-0.02	0.03	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	8	0.00	-0.01	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	-0.01	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.03	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
10	1	-0.01	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
11	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
12	6	0.02	-0.06	0.07	0.00	0.01	-0.02	-0.01	0.01	-0.01
13	1	0.13	-0.01	0.02	-0.02	-0.01	0.00	-0.03	0.00	-0.01
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.00
15	8	0.00	-0.02	0.01	0.03	-0.13	0.05	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.02	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	0.02	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	6	0.00	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
21	1	-0.01	0.01	0.03	-0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01
22	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.03	-0.01	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.01
24	1	0.00	0.02	-0.03	0.00	0.01	-0.02	-0.01	0.01	-0.01
25	1	0.02	-0.01	0.03	0.02	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
26	6	0.00	0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00
27	1	-0.06	0.00	0.02	-0.03	0.14	-0.03	0.02	-0.01	0.00
28	1	0.07	0.00	0.01	-0.10	-0.05	-0.03	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	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
31	1	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00
32	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01
36	6	0.01	0.00	-0.05	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
37	1	-0.07	0.02	-0.13	0.04	0.00	0.06	0.01	0.00	0.02
38	1	-0.06	0.04	-0.06	0.04	-0.02	0.02	0.01	0.00	0.01
39	1	0.00	0.01	0.08	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.01
40	6	-0.01	0.01	0.00	0.04	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
41	1	-0.04	-0.04	0.04	0.07	0.03	-0.06	-0.01	0.00	0.00
42	6	0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	-0.04	-0.04	0.08	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
44	1	-0.02	0.01	-0.07	0.02	0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00
45	1	0.00	0.00	-0.09	-0.01	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.00
46	6	-0.03	0.00	0.03	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
47	1	0.23	0.03	-0.26	-0.13	-0.10	0.20	-0.04	-0.01	0.04
48	6	0.04	-0.01	-0.02	0.00	0.09	0.02	0.00	0.00	0.00
49	1	-0.03	-0.16	-0.04	0.16	0.20	0.16	0.01	0.02	0.01
50	1	0.03	0.11	0.11	0.01	0.08	0.01	-0.01	-0.01	-0.01
51	6	-0.03	-0.02	0.01	-0.04	-0.10	-0.10	0.00	0.00	0.00
52	1	-0.10	0.09	0.07	-0.04	-0.21	-0.20	0.01	-0.01	-0.01

53	6	0.00	0.02	0.00	0.02	0.13	-0.01	0.00	0.00	0.00
54	1	-0.09	-0.01	-0.09	-0.42	-0.02	-0.40	0.00	0.00	0.00
55	6	0.02	0.03	0.01	0.09	0.20	0.06	0.00	0.00	0.00
56	1	0.03	-0.01	0.03	0.14	0.05	0.13	0.00	0.00	0.00
57	6	-0.01	-0.01	-0.01	-0.06	-0.10	-0.05	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.05	0.00	-0.04	-0.28	-0.06	-0.26	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
60	8	-0.01	0.00	-0.05	0.00	-0.02	0.02	0.00	-0.02	0.02
61	8	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.07	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00
63	6	0.07	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.04	0.03	-0.05
64	6	0.05	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.13	-0.05	0.09
65	8	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	-0.07	0.19	-0.13	0.01	-0.02	0.02	-0.26	0.19	-0.25
67	6	-0.03	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.11	0.05	-0.08
68	1	0.06	0.04	0.04	-0.02	-0.03	-0.01	0.23	-0.07	0.21
69	1	0.00	-0.13	-0.07	0.00	0.02	0.01	-0.05	-0.56	-0.09
70	1	0.06	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.27	0.37	0.20
71	6	-0.11	-0.03	-0.04	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.03	0.03
72	1	-0.20	0.04	0.45	-0.01	0.02	0.00	-0.05	0.07	-0.04
73	1	0.38	0.03	-0.26	-0.02	0.02	0.02	-0.15	0.08	0.13
74	1	0.16	0.07	0.16	0.03	0.00	-0.05	0.07	-0.01	-0.18

109

110

111

A

A

A

Frequencies --	1071.7177	1080.7072	1091.4985
Red. masses --	2.2718	2.1672	1.8673
Frc consts --	1.5374	1.4913	1.3107
IR Inten --	123.1938	92.4087	28.1743
Raman Activ --	6.7128	0.7097	1.6861
Depolar (P) --	0.4011	0.2273	0.7442
Depolar (U) --	0.5726	0.3704	0.8534

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	0.02	-0.06	0.03	0.00	0.03	0.00	0.02
2	6	-0.03	0.01	0.07	-0.05	0.01	0.14	-0.01	0.00	0.02
3	6	-0.02	-0.01	0.01	0.04	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.01	0.02	-0.12	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00
5	6	-0.01	-0.05	-0.01	0.02	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00
6	6	-0.01	0.02	-0.03	-0.01	0.00	0.02	0.01	-0.01	0.01
7	8	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	-0.02	0.02	0.01	-0.05	0.08	-0.01	0.01	-0.01
9	6	0.02	0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.01
10	1	0.03	-0.06	-0.04	0.03	-0.07	-0.06	0.01	-0.03	0.00
11	8	-0.02	-0.01	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
12	6	0.00	0.04	-0.03	0.03	-0.05	0.07	-0.01	0.01	-0.02
13	1	-0.07	-0.04	0.05	0.07	-0.02	0.03	0.00	0.01	-0.02
14	6	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.03	-0.02
15	8	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.06	0.04	0.05
16	6	0.01	0.01	-0.02	0.02	0.03	-0.07	0.01	-0.01	0.00
17	1	0.07	-0.03	0.06	0.23	-0.07	0.22	0.01	0.01	0.01
18	1	-0.07	-0.01	0.00	-0.22	-0.04	-0.01	-0.01	0.01	-0.01
19	1	-0.08	0.01	-0.01	-0.24	0.04	-0.01	0.02	0.00	0.02
20	6	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.02	0.05	0.01	0.02	-0.02

21	1	0.04	-0.03	-0.05	0.10	0.06	-0.05	-0.03	-0.01	0.01
22	6	0.02	-0.02	-0.03	0.07	-0.03	-0.04	-0.02	-0.02	-0.01
23	1	0.07	-0.05	0.15	0.15	-0.16	0.32	0.01	0.05	-0.01
24	1	-0.13	0.09	-0.08	-0.23	0.11	-0.08	-0.02	0.07	-0.08
25	1	-0.06	0.06	0.01	-0.16	0.14	-0.03	0.04	-0.02	0.07
26	6	0.01	-0.01	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
27	1	0.10	-0.05	-0.02	-0.06	0.02	0.00	0.00	-0.04	0.01
28	1	-0.02	-0.02	-0.01	0.04	-0.04	0.01	0.05	0.00	0.01
29	6	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.01
30	1	0.01	0.02	-0.02	0.01	0.01	-0.02	-0.01	-0.02	0.01
31	1	0.00	0.04	0.01	0.00	0.07	0.00	0.00	-0.01	-0.01
32	6	0.00	0.01	0.01	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.01
33	1	0.08	0.18	0.11	0.19	0.37	0.20	0.00	0.06	0.02
34	6	0.01	-0.02	-0.05	0.01	-0.03	-0.09	0.00	-0.01	-0.01
35	1	-0.02	-0.07	-0.01	-0.14	-0.22	0.07	0.00	0.00	-0.02
36	6	0.00	0.01	0.06	-0.02	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
37	1	0.06	-0.02	0.13	0.05	-0.01	0.07	-0.02	0.01	-0.05
38	1	0.03	-0.03	0.03	0.03	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.03
39	1	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.10	0.00	0.01	0.04
40	6	-0.01	0.01	-0.01	0.03	0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00
41	1	-0.05	-0.01	-0.01	0.00	-0.04	0.04	-0.04	-0.02	0.03
42	6	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01
43	1	-0.04	-0.02	0.07	0.01	0.01	-0.03	0.03	0.01	-0.05
44	1	-0.03	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01
45	1	0.00	0.01	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.04
46	6	0.02	0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00
47	1	-0.26	-0.05	0.31	0.03	0.00	-0.03	0.03	0.02	-0.08
48	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01
49	1	0.05	0.10	0.04	0.00	0.02	0.00	-0.02	-0.03	-0.02
50	1	-0.06	-0.10	-0.11	0.02	0.01	0.01	0.00	-0.02	0.00
51	6	0.02	0.02	0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.03	0.01	0.04
52	1	0.10	-0.06	-0.04	-0.01	-0.02	-0.02	0.07	0.05	0.10
53	6	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.05	-0.04	0.06
54	1	0.04	-0.01	0.05	0.01	0.01	0.00	0.39	0.08	0.36
55	6	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.07	-0.01
56	1	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.13	0.62	-0.25
57	6	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.14	-0.09	-0.12
58	1	0.03	0.01	0.03	-0.01	0.00	0.00	-0.22	-0.08	-0.20
59	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
60	8	-0.02	-0.11	0.07	-0.01	0.06	-0.08	0.00	-0.01	0.01
61	8	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.02	0.12	-0.03	0.00	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
63	6	0.04	0.04	0.05	-0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.08	0.02	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
65	8	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.04	0.03	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
67	6	0.01	-0.06	-0.03	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
68	1	-0.07	-0.16	-0.07	0.03	0.08	0.03	0.00	0.00	0.00
69	1	-0.01	0.03	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
70	1	-0.06	-0.07	-0.03	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	-0.06	-0.07	-0.04	0.02	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
72	1	-0.23	0.11	0.36	0.07	-0.03	-0.11	0.00	0.00	0.00

73	1	0.26	0.12	-0.16	-0.09	-0.03	0.06	0.01	-0.01	-0.01
74	1	0.28	0.06	-0.08	-0.09	-0.02	0.02	-0.01	0.00	0.01
		112			113			114		
		A			A			A		
Frequencies --		1094.8329			1099.4941			1122.8634		
Red. masses --		2.4570			2.2230			3.2435		
Frc consts --		1.7352			1.5834			2.4095		
IR Inten --		17.6173			48.0338			21.5468		
Raman Activ --		1.7941			2.0757			4.0892		
Depolar (P) --		0.6291			0.7482			0.6842		
Depolar (U) --		0.7724			0.8560			0.8125		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.12	0.01	0.10	0.06	0.04	0.02	-0.01	-0.04	-0.01
2	6	-0.06	0.02	0.09	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	0.02	0.05
3	6	-0.03	0.00	-0.02	-0.04	-0.01	-0.01	0.02	0.00	-0.08
4	6	-0.03	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.01	0.26
5	6	0.05	0.03	0.03	-0.04	-0.06	-0.05	-0.05	0.00	-0.06
6	6	0.02	-0.02	0.03	-0.03	0.04	-0.09	-0.06	0.05	-0.09
7	8	0.01	-0.02	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.01	-0.01
8	6	-0.04	0.06	-0.07	-0.02	0.04	-0.03	-0.03	-0.02	-0.01
9	6	0.01	-0.05	0.04	-0.08	-0.04	-0.02	0.10	0.04	0.00
10	1	0.03	-0.12	0.01	-0.05	-0.08	-0.05	0.05	0.15	0.05
11	8	0.01	0.01	-0.04	0.02	0.01	-0.03	-0.03	-0.02	0.03
12	6	-0.05	0.03	-0.07	0.07	-0.04	0.11	-0.10	0.00	-0.12
13	1	-0.03	0.03	-0.07	0.28	0.03	0.04	-0.07	0.08	-0.18
14	6	0.00	0.01	0.01	0.02	0.00	-0.01	0.02	-0.01	-0.01
15	8	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.01
16	6	0.03	-0.03	0.01	0.00	-0.03	0.01	0.02	0.03	-0.01
17	1	0.03	0.04	0.04	-0.04	0.06	-0.02	0.08	-0.06	0.05
18	1	-0.05	0.05	-0.04	-0.01	0.05	-0.05	0.00	-0.05	0.05
19	1	0.11	0.00	0.09	0.13	0.00	0.08	-0.11	0.01	-0.05
20	6	0.03	0.08	-0.06	0.02	0.09	0.05	-0.02	-0.05	-0.05
21	1	-0.12	-0.04	0.03	-0.05	0.03	0.09	-0.04	-0.01	-0.02
22	6	-0.08	-0.07	-0.06	-0.04	-0.04	-0.01	0.01	0.03	0.01
23	1	0.06	0.23	-0.03	0.04	0.14	-0.02	-0.04	-0.05	-0.05
24	1	-0.10	0.30	-0.34	-0.02	0.15	-0.17	0.04	-0.09	0.09
25	1	0.18	-0.08	0.29	0.12	-0.06	0.18	-0.06	0.02	-0.12
26	6	0.03	-0.02	-0.03	0.01	-0.01	0.06	-0.04	-0.01	0.07
27	1	0.02	-0.11	0.02	0.19	0.01	-0.05	0.14	0.02	-0.06
28	1	0.14	-0.04	0.02	-0.17	-0.03	-0.05	-0.15	-0.11	-0.04
29	6	-0.01	-0.02	0.06	-0.02	-0.02	0.03	0.05	0.00	0.00
30	1	-0.04	-0.09	0.07	0.01	-0.03	0.00	-0.09	-0.02	0.09
31	1	0.00	-0.06	-0.06	0.00	-0.07	0.02	-0.01	0.11	-0.11
32	6	0.01	0.00	0.04	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.02
33	1	0.03	0.27	0.11	-0.04	-0.04	-0.06	0.07	0.21	0.12
34	6	0.02	-0.03	-0.06	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.03
35	1	-0.01	-0.02	-0.08	0.00	0.03	0.00	-0.06	-0.06	0.00
36	6	0.01	-0.03	-0.01	0.04	0.02	-0.01	0.03	-0.01	-0.09
37	1	-0.04	0.03	-0.11	-0.08	-0.03	-0.01	-0.16	0.01	-0.23
38	1	-0.01	0.03	0.07	-0.09	0.03	-0.16	-0.15	0.07	-0.13
39	1	0.01	0.04	0.07	0.01	-0.06	0.18	0.00	0.01	0.18
40	6	-0.06	0.04	0.00	0.01	-0.01	-0.05	0.06	0.00	-0.06

41	1	-0.15	-0.06	0.08	0.01	0.05	-0.11	-0.03	-0.12	0.04
42	6	-0.02	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.05	0.05	0.00	0.05
43	1	0.05	0.01	-0.08	-0.08	-0.06	0.17	-0.12	-0.06	0.24
44	1	0.05	0.01	-0.02	-0.07	-0.01	-0.01	-0.13	-0.02	-0.01
45	1	0.00	-0.02	0.07	-0.02	-0.01	-0.08	-0.02	0.00	-0.18
46	6	0.01	-0.01	0.01	0.03	-0.02	-0.01	0.01	-0.03	0.00
47	1	0.15	0.00	-0.14	-0.29	-0.11	0.41	-0.10	-0.07	0.15
48	6	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.02	-0.03
49	1	-0.05	0.01	-0.04	0.10	0.07	0.10	0.11	0.00	0.10
50	1	0.05	0.02	0.03	-0.15	-0.09	-0.14	-0.14	-0.02	-0.09
51	6	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.03
52	1	-0.10	0.03	-0.04	0.19	-0.11	-0.01	0.23	-0.12	0.03
53	6	-0.01	0.02	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00
54	1	-0.14	-0.02	-0.13	0.04	-0.01	0.04	0.04	0.00	0.03
55	6	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
56	1	0.05	-0.19	0.09	-0.02	0.02	-0.03	-0.01	0.01	-0.01
57	6	0.04	0.02	0.03	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00
58	1	0.07	0.01	0.07	-0.01	0.02	-0.02	-0.03	0.03	-0.05
59	8	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.01	0.03
60	8	0.01	-0.01	0.05	-0.02	0.04	-0.09	0.03	-0.01	0.08
61	8	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01
62	6	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.03	-0.01
63	6	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.01
64	6	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.02
65	8	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00	-0.01
66	1	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.04	-0.01
67	6	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	0.02
68	1	0.01	0.04	0.01	0.01	0.03	0.01	0.03	0.08	0.03
69	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.01
70	1	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.01	0.00
71	6	0.01	0.02	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	0.02	0.00
72	1	0.05	-0.04	-0.05	0.01	0.00	-0.03	0.05	-0.04	-0.05
73	1	0.00	-0.05	-0.01	-0.06	0.00	0.04	-0.01	-0.05	-0.01
74	1	-0.07	-0.01	0.06	0.00	0.00	-0.02	-0.05	0.00	0.03

	115	116	117
--	-----	-----	-----

	A	A	A
--	---	---	---

Frequencies --	1136.9705	1144.3410	1148.5582
----------------	-----------	-----------	-----------

Red. masses --	1.6845	2.6447	3.0192
----------------	--------	--------	--------

Frc consts --	1.2829	2.0405	2.3466
---------------	--------	--------	--------

IR Inten --	1.6907	17.8416	146.5450
-------------	--------	---------	----------

Raman Activ --	9.6148	3.5877	3.5872
----------------	--------	--------	--------

Depolar (P) --	0.4217	0.5768	0.3813
----------------	--------	--------	--------

Depolar (U) --	0.5932	0.7316	0.5521
----------------	--------	--------	--------

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	0.05	0.02	-0.03	0.04	0.02	-0.01	0.00	-0.02
2	6	0.04	-0.02	-0.04	0.04	-0.02	-0.06	0.00	0.00	0.02
3	6	0.02	0.04	0.02	0.07	-0.07	-0.02	0.02	0.01	0.00
4	6	-0.02	0.05	0.01	-0.11	0.12	-0.03	-0.05	-0.01	0.04
5	6	0.02	0.01	-0.02	0.03	0.00	0.05	0.01	0.01	-0.01
6	6	-0.09	-0.02	0.09	0.13	0.01	-0.07	0.00	0.00	0.02
7	8	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
8	6	0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.06	0.06	-0.03	0.02	-0.03

9	6	0.01	-0.01	-0.04	0.06	-0.02	-0.09	0.01	-0.01	0.01
10	1	0.05	-0.04	-0.06	0.16	-0.21	-0.17	-0.07	0.11	0.07
11	8	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01
12	6	-0.03	-0.02	0.00	-0.09	-0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.00
13	1	0.02	-0.01	0.00	0.13	0.04	-0.06	0.02	0.06	-0.09
14	6	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	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	6	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.01	0.00	0.01
17	1	-0.04	0.00	-0.04	0.04	-0.04	0.03	0.02	-0.01	0.02
18	1	0.04	0.00	0.01	-0.02	-0.04	0.02	0.01	-0.01	0.01
19	1	0.01	-0.01	-0.02	-0.11	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
20	6	-0.01	0.00	0.04	-0.03	0.06	0.09	0.01	-0.02	-0.01
21	1	-0.01	0.00	0.04	0.03	0.07	0.04	-0.02	0.02	0.02
22	6	0.03	-0.03	-0.02	0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.01
23	1	0.08	-0.05	0.16	0.06	-0.01	0.09	0.00	-0.01	0.00
24	1	-0.11	0.07	-0.06	-0.07	0.07	-0.06	0.01	-0.01	0.02
25	1	-0.04	0.05	0.04	-0.01	0.03	0.07	-0.01	0.00	-0.02
26	6	0.00	0.02	-0.04	-0.03	-0.04	0.03	-0.01	0.00	-0.01
27	1	-0.14	0.01	0.05	0.13	-0.08	-0.04	-0.06	0.02	0.01
28	1	0.35	-0.24	0.03	-0.27	0.15	-0.01	0.09	-0.07	0.01
29	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.02	0.03	0.00	0.02
30	1	0.00	0.02	0.00	0.03	0.06	-0.04	-0.08	-0.02	0.09
31	1	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.02	0.08	0.01	-0.01	-0.12
32	6	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.01
33	1	-0.08	-0.22	-0.10	-0.03	-0.17	-0.10	0.03	0.08	0.05
34	6	0.00	0.02	0.02	-0.01	0.03	0.04	0.00	-0.01	-0.01
35	1	0.14	0.11	-0.05	0.05	0.03	0.04	-0.04	-0.02	0.00
36	6	0.02	-0.04	0.00	0.05	-0.08	0.01	0.03	-0.01	-0.02
37	1	-0.06	0.05	-0.18	-0.13	0.07	-0.31	-0.08	0.00	-0.09
38	1	-0.05	0.04	0.08	-0.10	0.10	0.19	-0.07	0.03	-0.04
39	1	0.02	0.07	0.11	0.04	0.12	0.28	0.01	-0.01	0.12
40	6	-0.01	0.04	0.01	0.02	0.03	-0.01	0.01	0.02	0.01
41	1	-0.21	-0.38	0.38	-0.02	0.07	-0.06	-0.04	-0.11	0.13
42	6	0.04	0.01	-0.03	-0.07	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.01
43	1	-0.05	0.03	0.04	0.11	-0.03	-0.13	0.02	0.02	-0.05
44	1	-0.06	0.00	-0.01	0.13	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
45	1	0.01	0.06	-0.17	-0.02	-0.09	0.29	0.00	0.00	0.02
46	6	0.03	-0.03	-0.03	-0.01	-0.03	0.04	0.01	-0.02	0.00
47	1	-0.10	-0.13	0.22	0.16	-0.03	-0.11	0.00	-0.05	0.04
48	6	-0.03	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.04	-0.01	0.00	0.00
49	1	-0.01	0.09	0.01	0.11	0.00	0.09	0.04	0.05	0.04
50	1	-0.02	-0.09	-0.09	-0.09	0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04
51	6	0.06	-0.01	-0.03	-0.05	0.02	0.02	0.01	0.00	-0.01
52	1	0.02	-0.05	-0.09	-0.03	-0.02	-0.01	0.01	-0.03	-0.04
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.01
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.01	0.00	-0.02	0.01
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.01	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.01
59	8	0.01	-0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01
60	8	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.03	0.03	0.08	-0.02

61	8	0.00	0.01	0.00	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.01	0.00
62	6	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.08	-0.20	0.02
63	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.02	-0.06
64	6	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.01	0.01	-0.02	0.20	0.16
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.03	0.01
66	1	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.30	0.14
67	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.05	-0.12	-0.14
68	1	0.02	0.06	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.18	-0.62	-0.18
69	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.05	-0.04	0.14
70	1	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.14	0.03	0.06
71	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.01
72	1	0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.08	0.11
73	1	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.04	0.07	0.05
74	1	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00

118

119

120

A

A

A

Frequencies --	1157.5523	1164.4072	1166.7314
Red. masses --	2.2216	2.1615	2.7168
Frc consts --	1.7539	1.7267	2.1789
IR Inten --	15.5290	18.4613	14.6259
Raman Activ --	4.7107	3.0444	5.1602
Depolar (P) --	0.7299	0.4557	0.5575
Depolar (U) --	0.8438	0.6261	0.7159

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



29	6	0.05	-0.02	0.03	-0.03	-0.02	0.01	-0.10	0.02	-0.07
30	1	-0.10	-0.06	0.12	0.07	-0.02	-0.06	0.33	-0.01	-0.38
31	1	0.00	0.04	-0.14	-0.02	-0.01	0.12	-0.11	0.16	0.53
32	6	0.01	0.01	0.03	-0.04	-0.01	0.04	-0.02	0.02	-0.02
33	1	0.08	0.27	0.14	-0.09	-0.18	-0.03	0.00	-0.06	-0.02
34	6	0.00	-0.02	-0.02	0.02	-0.01	-0.04	0.01	-0.01	0.00
35	1	-0.16	-0.10	0.04	0.28	0.20	-0.22	0.02	-0.07	0.05
36	6	0.01	-0.08	0.02	-0.04	-0.03	0.02	0.01	-0.03	-0.01
37	1	-0.04	0.10	-0.28	0.10	0.07	-0.06	-0.04	0.03	-0.14
38	1	0.00	0.06	0.27	0.10	-0.02	0.20	-0.02	0.03	0.07
39	1	0.03	0.16	0.09	-0.01	0.11	-0.16	0.01	0.05	0.07
40	6	0.00	0.01	0.00	0.03	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.00
41	1	-0.07	-0.08	0.07	-0.04	-0.08	0.02	-0.05	-0.03	0.02
42	6	-0.03	0.02	-0.01	0.03	-0.03	0.03	0.00	0.01	-0.01
43	1	0.06	-0.03	-0.06	-0.07	0.02	0.09	0.01	-0.01	-0.01
44	1	0.08	0.02	-0.05	-0.10	-0.03	0.10	0.02	0.01	-0.04
45	1	-0.01	-0.05	0.12	0.00	0.06	-0.12	0.00	-0.02	0.01
46	6	0.02	-0.02	0.00	-0.03	-0.02	0.03	0.01	-0.02	-0.01
47	1	-0.01	-0.13	0.17	0.17	0.05	-0.24	-0.02	-0.11	0.14
48	6	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00
49	1	0.03	0.04	0.03	0.03	-0.05	0.02	0.02	0.03	0.03
50	1	-0.07	-0.07	-0.08	-0.01	0.06	0.04	-0.06	-0.06	-0.07
51	6	0.01	0.02	-0.01	-0.03	-0.01	0.03	0.01	0.01	-0.01
52	1	-0.09	0.00	-0.07	0.19	-0.07	0.07	-0.04	-0.01	-0.05
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	-0.04	-0.02	-0.03	0.06	0.02	0.05	-0.03	-0.02	-0.03
55	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00
56	1	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
57	6	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.01	-0.01
58	1	0.02	-0.02	0.03	-0.03	0.03	-0.05	0.01	-0.01	0.01
59	8	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00
60	8	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.02	0.00
61	8	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.01	0.00
62	6	0.01	0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
63	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
64	6	0.00	-0.03	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01
65	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	-0.06	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.00	0.02	0.01
67	6	-0.01	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01
68	1	0.03	0.10	0.03	-0.01	-0.04	-0.01	-0.01	-0.04	-0.01
69	1	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
70	1	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
73	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.01
74	1	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00

121

122

123

A

A

A

Frequencies --	1173.3561	1179.6911	1185.4060
----------------	-----------	-----------	-----------

Red. masses --	2.2000	1.9493	3.0904
----------------	--------	--------	--------

Frc consts --	1.7846	1.5983	2.5586
---------------	--------	--------	--------

IR Inten --	14.6493	1.9628	15.4074
-------------	---------	--------	---------

				Raman Activ --	4.2225			1.1190			0.3306
				Depolar (P) --	0.6685			0.5247			0.4519
				Depolar (U) --	0.8013			0.6883			0.6225
	Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.08	-0.01	-0.07	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	
2	6	0.02	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	
3	6	-0.04	0.02	0.06	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	
4	6	0.03	0.06	-0.05	-0.10	-0.10	-0.03	0.07	0.01	0.00	
5	6	0.06	0.00	0.08	-0.02	0.01	0.03	0.00	0.01	0.03	
6	6	-0.11	0.11	-0.01	0.06	0.13	0.02	-0.06	0.02	-0.01	
7	8	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	
8	6	-0.05	-0.01	0.07	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.01	
9	6	0.01	-0.01	-0.03	-0.01	0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.01	
10	1	0.08	-0.18	-0.09	-0.07	0.13	0.07	0.05	-0.13	-0.06	
11	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
12	6	-0.02	-0.01	0.00	0.06	0.04	0.02	-0.02	0.00	-0.01	
13	1	-0.09	-0.06	0.03	0.11	0.03	0.03	-0.10	-0.03	0.01	
14	6	0.00	-0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.05	0.11	0.03	
15	8	-0.03	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.12	0.18	0.08	
16	6	0.02	0.00	-0.03	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	
17	1	0.11	-0.01	0.11	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.01	
18	1	-0.11	-0.02	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.02	
19	1	-0.08	0.02	0.05	-0.01	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.03	
20	6	0.00	0.04	0.04	0.00	-0.03	-0.03	0.01	0.01	0.02	
21	1	0.03	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.01	
22	6	-0.04	0.01	0.04	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	
23	1	-0.08	0.12	-0.19	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	
24	1	0.16	-0.05	0.03	0.02	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	
25	1	0.13	-0.12	0.04	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.01	
26	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.05	-0.02	0.00	0.01	0.01	
27	1	0.11	-0.17	0.02	-0.09	-0.04	0.02	0.07	-0.07	0.00	
28	1	0.10	-0.13	-0.01	0.24	-0.24	0.02	-0.02	0.00	-0.01	
29	6	0.01	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
30	1	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	
31	1	0.02	0.00	-0.05	-0.01	0.03	0.00	0.02	-0.05	-0.03	
32	6	0.04	0.01	-0.04	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	
33	1	0.08	0.17	0.03	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	-0.01	
34	6	-0.02	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
35	1	-0.30	-0.22	0.22	0.01	0.01	-0.01	-0.04	-0.03	0.02	
36	6	-0.03	-0.04	0.02	0.05	0.05	0.00	-0.04	-0.01	0.00	
37	1	0.05	0.06	-0.08	-0.09	-0.08	0.13	0.08	0.03	0.01	
38	1	0.07	-0.01	0.17	-0.09	0.01	-0.22	0.08	-0.03	0.08	
39	1	0.00	0.09	-0.09	0.00	-0.14	0.18	-0.01	0.04	-0.13	
40	6	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.03	0.03	0.00	-0.02	-0.01	
41	1	0.02	-0.05	0.03	0.02	-0.13	0.21	0.03	0.06	-0.08	
42	6	0.05	-0.05	0.00	-0.04	-0.05	-0.01	0.03	-0.01	0.00	
43	1	-0.11	0.10	0.07	0.04	0.11	-0.17	-0.05	0.02	0.06	
44	1	-0.16	-0.05	0.17	0.05	-0.03	0.21	-0.07	-0.01	0.03	
45	1	0.03	0.13	-0.24	0.04	0.10	0.11	0.01	0.04	-0.11	
46	6	-0.02	-0.04	0.01	-0.05	-0.05	0.06	-0.06	-0.03	0.03	
47	1	0.13	-0.01	-0.18	0.17	-0.02	-0.18	0.15	-0.04	-0.15	
48	6	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.06	0.04	0.04	-0.02	

49	1	0.02	-0.02	0.02	0.33	0.07	0.29	0.15	-0.01	0.13
50	1	0.02	0.04	0.03	-0.22	-0.04	-0.13	-0.23	-0.04	-0.15
51	6	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.02	-0.03	0.00
52	1	0.23	-0.08	0.06	0.17	-0.20	-0.11	-0.09	-0.18	-0.18
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
54	1	0.11	0.04	0.10	0.00	0.00	0.00	-0.43	-0.17	-0.38
55	6	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.20	0.02
56	1	0.01	0.04	0.00	0.01	-0.04	0.01	0.00	-0.29	0.05
57	6	0.03	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.09	-0.11
58	1	-0.04	0.05	-0.05	-0.01	0.01	-0.02	-0.03	-0.10	-0.02
59	8	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.01
61	8	0.00	0.01	-0.03	0.02	0.02	-0.03	0.01	0.01	-0.01
62	6	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00
63	6	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.01
64	6	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.01
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.02	0.01	-0.01	-0.06	-0.02	0.00	0.02	0.01
67	6	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01
68	1	-0.01	-0.03	-0.01	0.03	0.09	0.02	-0.01	-0.02	-0.01
69	1	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.01
70	1	-0.01	0.01	0.01	0.02	-0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
73	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00
74	1	-0.02	0.00	0.01	0.03	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.01

124

125

126

A

A

A

Frequencies --	1194.1759	1201.9071	1209.1768
Red. masses --	2.2385	1.7790	1.9516
Frc consts --	1.8808	1.5141	1.6812
IR Inten --	2.0860	3.4760	0.7102
Raman Activ --	2.2813	6.7455	7.8985
Depolar (P) --	0.2340	0.2254	0.6527
Depolar (U) --	0.3792	0.3679	0.7899

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

17	1	-0.12	0.22	-0.03	-0.01	-0.05	-0.03	0.01	-0.01	0.01
18	1	-0.10	0.18	-0.19	0.06	-0.04	0.05	0.00	-0.01	0.01
19	1	0.31	0.00	0.23	-0.05	-0.01	-0.08	-0.01	0.00	0.00
20	6	0.01	0.03	0.07	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.01	0.01
21	1	0.02	0.01	0.05	-0.02	0.09	0.03	0.03	-0.02	-0.02
22	6	0.03	0.04	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01
23	1	-0.04	-0.13	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.01	0.02
24	1	-0.02	-0.10	0.13	-0.02	0.00	0.01	-0.02	0.02	-0.02
25	1	-0.09	0.06	-0.13	-0.02	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.02
26	6	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.01	-0.05	0.03	0.00	-0.01
27	1	-0.08	0.03	0.01	-0.06	-0.09	0.05	-0.12	0.16	0.01
28	1	0.06	-0.02	0.01	0.10	0.05	0.01	0.12	-0.08	0.00
29	6	-0.07	-0.07	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01
30	1	0.22	-0.18	-0.25	-0.03	0.03	0.04	-0.04	0.05	0.05
31	1	-0.05	-0.07	0.32	-0.01	0.04	-0.01	0.03	-0.06	-0.08
32	6	0.03	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01
33	1	0.02	0.05	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.02	-0.05	-0.03
34	6	0.00	-0.04	-0.05	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00
35	1	-0.25	-0.19	0.07	0.13	0.09	-0.08	0.06	0.05	-0.03
36	6	0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.01	-0.01	-0.05	-0.02	0.00
37	1	-0.03	-0.01	-0.02	-0.06	-0.01	-0.05	0.13	0.05	-0.01
38	1	-0.04	0.02	-0.03	-0.06	0.05	0.01	0.12	-0.05	0.13
39	1	0.00	0.00	0.05	0.01	0.01	0.12	-0.02	0.07	-0.18
40	6	0.01	-0.01	0.03	-0.03	-0.07	0.08	-0.06	-0.02	0.00
41	1	0.09	0.10	-0.05	0.24	0.58	-0.51	-0.04	0.11	-0.13
42	6	0.00	-0.01	-0.01	0.03	-0.02	-0.03	-0.02	0.01	-0.01
43	1	0.01	0.03	-0.04	-0.05	0.09	-0.01	0.04	-0.01	-0.05
44	1	0.01	0.00	0.03	-0.07	-0.02	0.08	0.06	0.01	-0.03
45	1	0.01	0.02	0.01	0.03	0.11	-0.15	0.00	-0.02	0.09
46	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.02	-0.06	0.00	0.06
47	1	0.00	-0.03	0.03	0.03	-0.12	0.07	0.08	-0.04	-0.01
48	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.04	0.00	-0.03
49	1	0.05	0.02	0.04	0.02	0.03	0.03	0.31	0.07	0.26
50	1	-0.04	-0.03	-0.04	-0.02	-0.06	-0.06	-0.38	-0.19	-0.30
51	6	0.01	0.00	-0.01	0.04	-0.01	-0.02	0.01	0.06	-0.02
52	1	0.00	-0.01	-0.03	-0.04	-0.01	-0.05	-0.08	-0.15	-0.24
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.01
54	1	0.03	0.01	0.03	0.02	0.00	0.02	0.09	0.00	0.09
55	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.04	-0.01
56	1	0.00	0.03	-0.01	-0.01	0.03	-0.01	-0.06	0.23	-0.10
57	6	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.05	-0.01	0.05
58	1	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.06	-0.01	0.06
59	8	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.05	-0.01	0.01	0.00	0.02
60	8	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01
61	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.02	0.01	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.01
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.04	0.01
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
68	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.05	-0.01

69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
72	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.02
73	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.01
74	1	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.02
		127			128			129		
		A			A			A		
Frequencies --		1220.0711			1237.0891			1245.9092		
Red. masses --		1.9851			1.5655			2.7884		
Frc consts --		1.7410			1.4116			2.5503		
IR Inten --		14.9312			12.8957			177.9705		
Raman Activ --		3.1637			8.0876			5.7457		
Depolar (P) --		0.5569			0.5100			0.4001		
Depolar (U) --		0.7154			0.6755			0.5715		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.01	-0.06	-0.01	0.04	0.01
2	6	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.03	0.02	-0.01	-0.03
3	6	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
4	6	0.08	0.05	0.01	0.02	-0.02	-0.02	0.04	0.00	0.01
5	6	-0.09	-0.06	-0.06	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01
6	6	0.08	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
8	6	0.00	-0.02	-0.01	-0.02	-0.07	-0.10	-0.01	-0.02	-0.06
9	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.04	-0.04	0.01	-0.03	-0.01
10	1	0.02	-0.02	-0.02	0.07	-0.02	-0.08	-0.04	-0.03	0.01
11	8	0.00	0.00	0.00	0.03	0.04	0.02	0.02	0.03	0.00
12	6	-0.03	-0.02	0.00	-0.03	0.02	0.01	-0.03	0.00	-0.01
13	1	0.01	0.00	-0.03	0.11	0.01	0.03	-0.07	0.06	-0.09
14	6	-0.04	-0.07	-0.06	0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.01	-0.01
15	8	0.04	0.03	0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.01	0.00	0.01	0.04	0.03	0.00	0.02	0.02
17	1	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.09	-0.05	-0.01	-0.04	-0.03
18	1	0.01	-0.01	0.01	0.12	-0.06	0.09	0.06	-0.02	0.04
19	1	-0.01	0.00	-0.02	-0.06	-0.02	-0.12	-0.02	-0.01	-0.06
20	6	0.00	0.02	0.01	0.01	0.00	0.05	0.00	-0.01	0.01
21	1	-0.01	0.03	0.02	-0.17	0.07	0.21	-0.08	-0.01	0.07
22	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00
23	1	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.03	-0.05	0.03	0.01	0.03
24	1	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.02	0.02	-0.01	0.02	-0.02
25	1	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.03	-0.02	0.00	0.01	0.03
26	6	0.03	-0.05	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
27	1	-0.22	0.19	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.03	0.05	0.00
28	1	0.30	-0.31	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.03	-0.04	0.00
29	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.02	0.00
30	1	0.01	0.00	0.00	0.19	-0.30	-0.22	0.11	-0.17	-0.12
31	1	-0.01	0.03	0.02	-0.23	0.51	0.38	-0.12	0.26	0.21
32	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.01	0.01
33	1	-0.01	-0.02	-0.01	0.07	0.19	0.13	0.07	0.17	0.10
34	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.02
35	1	0.07	0.05	-0.04	0.07	0.07	-0.04	-0.10	-0.06	0.07
36	6	-0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.00

37	1	0.05	0.04	-0.06	0.01	0.00	0.03	0.04	0.02	-0.02
38	1	0.04	-0.01	0.09	0.01	-0.02	-0.02	0.04	-0.02	0.03
39	1	0.00	0.06	-0.06	0.00	-0.02	-0.04	-0.01	0.02	-0.06
40	6	-0.08	-0.01	0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.00
41	1	0.02	0.14	-0.10	0.00	-0.06	0.06	-0.03	0.01	-0.03
42	6	-0.03	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
43	1	0.03	0.06	-0.10	0.00	-0.01	0.01	0.02	0.00	-0.01
44	1	0.05	-0.02	0.13	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.03
45	1	0.03	0.05	0.13	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.03	0.00
46	6	0.04	0.03	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01
47	1	-0.16	0.03	0.15	-0.02	0.07	-0.05	-0.01	0.05	-0.04
48	6	0.00	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	-0.10	-0.07	-0.10	0.01	0.00	0.00	0.03	0.02	0.02
50	1	0.20	0.13	0.19	-0.03	0.01	-0.01	-0.04	-0.03	-0.03
51	6	-0.05	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
52	1	0.37	0.01	0.23	-0.05	-0.03	-0.04	0.06	0.00	0.02
53	6	-0.01	0.05	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.05	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.01	0.02
55	6	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.09	-0.32	0.15	-0.02	0.06	-0.03	0.02	-0.06	0.03
57	6	-0.03	0.03	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.08	0.04	-0.10	0.02	-0.01	0.03	-0.03	0.01	-0.03
59	8	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
60	8	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.05	0.00
61	8	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
62	6	0.00	0.01	0.00	0.01	0.04	0.00	-0.05	-0.20	0.01
63	6	0.00	-0.02	-0.02	0.01	-0.06	-0.04	-0.01	0.21	0.15
64	6	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.02	0.05	0.01	-0.06
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.02	-0.05
66	1	0.01	0.04	0.01	0.03	0.11	0.02	-0.12	-0.39	-0.07
67	6	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.02	-0.06	-0.02	0.06
68	1	-0.01	-0.04	-0.01	-0.03	-0.09	-0.02	0.09	0.30	0.08
69	1	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01	0.04	0.01	-0.03	-0.16
70	1	-0.01	0.01	0.01	-0.03	0.04	0.02	0.09	-0.13	-0.08
71	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.02	0.01	0.01	-0.09	-0.06
72	1	0.01	-0.01	-0.01	0.04	-0.02	-0.02	-0.14	0.09	0.10
73	1	-0.02	-0.02	0.01	-0.03	-0.05	0.01	0.11	0.20	-0.05
74	1	-0.03	0.00	0.02	-0.07	0.00	0.04	0.26	0.01	-0.14

5	6	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.01
6	6	0.03	0.10	-0.03	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
7	8	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.01
8	6	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.05	-0.07	0.10	0.10
9	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.05	-0.02	-0.01
10	1	-0.01	0.05	0.02	0.08	-0.21	-0.12	0.06	0.51	0.08
11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.05
12	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.02
13	1	0.03	0.02	-0.02	-0.05	-0.01	-0.01	0.05	0.04	-0.01
14	6	0.05	0.11	0.04	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
15	8	-0.03	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.02	-0.04
17	1	0.00	0.01	0.00	0.04	0.00	0.05	0.10	0.05	0.11
18	1	-0.01	0.00	-0.01	-0.04	-0.01	-0.01	-0.15	0.01	-0.05
19	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.04	-0.02	0.03	0.15
20	6	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.03	0.08	-0.04	-0.17	-0.03
21	1	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.06	0.05	-0.11	-0.17	0.01
22	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.05	-0.01	-0.06	0.03
23	1	0.01	0.00	0.01	-0.09	0.05	-0.18	0.07	0.14	-0.01
24	1	-0.01	0.01	-0.01	0.15	-0.06	0.06	0.04	0.13	-0.13
25	1	0.00	0.01	0.01	0.04	-0.09	-0.10	0.04	-0.06	0.10
26	6	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
27	1	-0.05	0.04	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01
28	1	0.11	-0.17	0.00	-0.03	0.03	0.00	0.02	-0.02	-0.01
29	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.03
30	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.08	0.05	0.17	-0.33	-0.24
31	1	0.01	-0.02	-0.01	0.03	-0.07	-0.05	0.00	0.04	0.06
32	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	0.02	-0.01	-0.02
33	1	0.00	0.01	0.00	-0.14	-0.31	-0.18	-0.10	-0.26	-0.17
34	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.02
35	1	-0.04	-0.03	0.03	0.50	0.35	-0.35	0.04	0.04	-0.06
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	1	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01
38	1	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
39	1	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	-0.02	0.00	0.01	0.03	0.01	0.00	-0.04	-0.03	-0.01
41	1	0.02	0.02	0.01	0.06	-0.08	0.11	-0.09	0.12	-0.19
42	6	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01
44	1	-0.01	-0.02	0.10	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01
45	1	0.02	0.05	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
46	6	0.02	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01
47	1	-0.07	-0.02	0.08	0.01	-0.03	0.02	-0.05	0.10	-0.07
48	6	0.02	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
49	1	-0.22	-0.17	-0.21	-0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.01
50	1	0.16	0.20	0.20	0.03	0.02	0.02	-0.03	-0.01	-0.02
51	6	-0.04	-0.05	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	-0.17	-0.19	-0.15	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.02
53	6	0.02	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	-0.17	-0.10	-0.15	-0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01
55	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	-0.13	0.48	-0.22	-0.01	0.05	-0.02	0.00	-0.01	0.01

57	6	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.30	-0.10	0.32	0.03	-0.01	0.03	-0.02	0.01	-0.03
59	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.03
60	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
62	6	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.05	0.00	0.00	0.01	0.00
63	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.05	0.03	0.00	-0.01	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
66	1	-0.01	-0.03	0.00	-0.03	-0.08	-0.01	0.00	0.01	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
68	1	0.01	0.02	0.01	0.02	0.06	0.02	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
70	1	0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
72	1	-0.01	0.00	0.01	-0.03	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
73	1	0.00	0.01	0.00	0.02	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00
74	1	0.02	0.00	-0.01	0.05	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00

133

134

135

A

A

A

Frequencies --	1273.4643	1278.2074	1287.5288
Red. masses --	1.5476	1.6326	2.7010
Frc consts --	1.4788	1.5715	2.6381
IR Inten --	3.1680	1.4763	3.5398
Raman Activ --	10.1375	18.6173	9.2178
Depolar (P) --	0.1818	0.3030	0.3197
Depolar (U) --	0.3077	0.4651	0.4845

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



25	1	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.01	0.04	-0.06	0.03
26	6	0.01	0.02	0.01	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00
27	1	-0.11	0.17	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.05	0.00
28	1	0.14	-0.18	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.04	0.00
29	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00
30	1	-0.03	0.08	0.04	0.00	0.01	0.00	-0.15	0.47	0.24
31	1	0.05	-0.12	-0.05	0.01	-0.03	-0.01	0.09	-0.25	-0.07
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.04	0.04
33	1	-0.01	-0.04	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.13	0.27	0.21
34	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.02
35	1	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.16	0.09
36	6	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
37	1	-0.03	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02
38	1	-0.02	-0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.01
39	1	0.01	-0.02	-0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01
40	6	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01
41	1	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.03	-0.04
42	6	0.01	0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	0.01	-0.05	0.05	0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.01
44	1	-0.02	0.01	-0.06	0.00	0.01	-0.04	-0.01	0.00	-0.01
45	1	-0.03	-0.07	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01
46	6	0.03	0.03	0.08	-0.02	0.01	0.03	0.00	0.00	0.01
47	1	-0.31	0.55	-0.34	-0.03	0.12	-0.11	-0.02	0.05	-0.03
48	6	-0.01	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.02	0.07	0.02	0.09	0.05	0.09	0.00	0.00	0.00
50	1	-0.07	0.06	0.00	-0.15	-0.11	-0.14	-0.01	0.00	0.00
51	6	-0.01	0.00	-0.01	0.06	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	-0.13	-0.11	0.28	0.07	0.20	0.03	-0.02	0.00
53	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00
54	1	0.02	-0.01	0.02	-0.11	0.03	-0.11	0.00	0.00	-0.01
55	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.03	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00
56	1	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.08	0.01	0.00	0.01	0.00
57	6	0.01	-0.01	0.02	-0.06	0.03	-0.06	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.13	0.03	-0.14	0.56	-0.11	0.59	0.01	0.00	0.01
59	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
60	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	-0.02	-0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
73	1	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
74	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

136

A

137

A

138

A

Frequencies --	1288.4675	1297.0244	1301.2149
Red. masses --	1.7434	1.6726	1.7766
Frc consts --	1.7053	1.6578	1.7723
IR Inten --	3.5313	1.7948	4.1883
Raman Activ --	1.5262	7.1956	6.2643
Depolar (P) --	0.3928	0.6158	0.7267
Depolar (U) --	0.5641	0.7622	0.8417

  

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	-0.03	0.03	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00
2	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.04	0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01
4	6	0.08	-0.05	-0.02	-0.03	0.04	0.02	0.02	0.03	0.02
5	6	-0.05	0.02	-0.02	0.03	-0.07	-0.07	-0.05	-0.05	-0.06
6	6	0.02	0.06	0.06	0.01	0.08	0.07	0.00	0.07	0.12
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.05	-0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
9	6	0.05	-0.06	-0.06	-0.02	0.03	0.02	-0.01	0.01	0.01
10	1	0.04	0.42	0.03	-0.01	-0.14	-0.01	0.00	-0.07	-0.01
11	8	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
12	6	-0.11	0.01	0.03	0.04	-0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.00
13	1	0.41	0.15	-0.05	-0.13	-0.03	-0.01	-0.05	0.01	-0.03
14	6	-0.02	-0.01	0.00	-0.05	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.03
15	8	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.01
16	6	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.03	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
19	1	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
20	6	-0.03	0.03	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.11	0.25	0.12	0.04	-0.11	-0.06	0.02	-0.06	-0.03
22	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00
24	1	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
26	6	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	-0.03	-0.02
27	1	0.14	-0.19	-0.01	0.12	-0.18	0.00	0.18	-0.28	0.01
28	1	-0.19	0.25	0.02	-0.11	0.15	0.02	-0.24	0.34	0.02
29	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.04	0.00	-0.01	0.01	0.02	-0.01	0.02	0.01
31	1	0.06	-0.15	-0.05	-0.02	0.05	0.01	-0.01	0.02	0.01
32	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
34	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	-0.05	-0.05	0.03	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
36	6	-0.02	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
37	1	0.05	0.02	0.04	-0.04	0.00	-0.05	0.01	0.02	-0.04
38	1	0.04	-0.05	-0.05	-0.04	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00
39	1	-0.01	-0.02	-0.10	0.01	0.01	0.03	0.00	0.02	-0.01
40	6	0.01	0.02	-0.03	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.04
41	1	0.05	-0.15	0.17	0.02	-0.03	0.03	-0.07	-0.06	0.00
42	6	-0.01	-0.03	-0.02	0.00	-0.03	-0.02	0.00	-0.03	-0.04
43	1	0.00	0.06	-0.06	-0.03	0.06	-0.04	-0.03	0.08	-0.06
44	1	0.03	-0.02	0.09	0.03	-0.02	0.10	0.02	-0.02	0.11

45	1	0.03	0.09	0.01	0.04	0.10	0.03	0.05	0.12	0.02
46	6	-0.04	0.00	-0.04	-0.02	0.01	0.00	0.08	0.01	0.06
47	1	0.11	-0.26	0.18	-0.28	0.28	-0.15	-0.21	0.31	-0.09
48	6	0.04	0.00	0.02	0.10	0.08	0.06	-0.11	-0.04	-0.07
49	1	-0.05	-0.09	-0.05	-0.28	-0.25	-0.26	0.29	0.29	0.27
50	1	-0.03	-0.07	-0.06	-0.28	-0.13	-0.23	0.19	0.15	0.19
51	6	0.01	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.03	0.05	-0.05	-0.03
52	1	-0.17	0.07	-0.02	-0.28	-0.13	-0.22	-0.11	0.18	0.09
53	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.03	0.02	0.01	0.02
54	1	0.04	0.02	0.04	0.10	0.05	0.10	-0.08	-0.03	-0.07
55	6	0.00	0.01	0.00	0.01	0.04	0.01	-0.01	-0.02	0.00
56	1	0.03	-0.08	0.04	0.07	-0.19	0.11	-0.04	0.13	-0.07
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01
58	1	-0.03	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.02
59	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
60	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.02	0.02	-0.01	-0.01	-0.01
62	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
73	1	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.01
74	1	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01

139

140

141

A

A

A

Frequencies --	1326.3406	1341.9519	1343.0612
Red. masses --	2.1218	1.4165	1.3929
Frc consts --	2.1992	1.5030	1.4803
IR Inten --	6.0965	1.8729	0.8245
Raman Activ --	5.2766	3.6072	6.8235
Depolar (P) --	0.6779	0.2561	0.4832
Depolar (U) --	0.8080	0.4077	0.6516

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.06	0.02	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.02
2	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.14	-0.17	-0.04	0.01	0.01	0.01	0.00	0.02	0.01
4	6	0.05	0.04	0.01	0.01	-0.02	-0.03	0.02	-0.03	-0.03
5	6	-0.02	-0.02	-0.02	0.02	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.01
6	6	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.05	-0.09	0.00	-0.06	0.07
7	8	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
9	6	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.06	0.06	-0.01	0.06	0.07
10	1	0.01	0.05	0.02	0.12	-0.17	-0.04	0.15	-0.19	-0.05
11	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.02
12	6	-0.01	-0.01	0.01	-0.05	-0.04	0.01	-0.06	-0.04	0.01

13	1	0.00	0.05	-0.06	0.35	0.23	-0.23	0.40	0.26	-0.26
14	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
15	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
17	1	0.01	0.00	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.02	0.00
18	1	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01
19	1	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01
20	6	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.00
21	1	0.00	-0.13	-0.04	0.10	-0.25	-0.16	0.11	-0.27	-0.18
22	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.03	0.01	0.05	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.02
24	1	0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.02	0.01
25	1	0.04	-0.01	0.06	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01
26	6	-0.03	0.02	0.01	0.03	-0.04	0.01	-0.01	0.03	-0.01
27	1	-0.06	0.11	-0.01	-0.16	0.24	-0.02	0.11	-0.17	0.01
28	1	0.01	0.00	0.03	0.02	-0.06	-0.01	-0.04	0.07	0.00
29	6	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.03	0.00
30	1	0.03	-0.07	-0.04	-0.05	0.12	0.08	-0.06	0.14	0.09
31	1	0.01	-0.01	-0.01	-0.05	0.12	0.05	-0.05	0.13	0.06
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
34	6	0.00	0.00	0.01	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	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01	0.02
37	1	0.05	0.00	0.02	0.01	0.03	-0.03	0.01	0.02	-0.02
38	1	0.03	0.00	0.06	0.01	-0.04	-0.05	0.01	-0.04	-0.06
39	1	-0.01	0.03	0.01	0.00	-0.01	-0.04	0.00	-0.02	-0.05
40	6	0.08	0.07	0.10	-0.03	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01
41	1	0.77	-0.03	0.47	0.07	-0.01	0.07	-0.08	-0.02	-0.05
42	6	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01
43	1	0.02	-0.02	0.00	-0.06	0.00	0.07	0.05	0.00	-0.06
44	1	0.02	0.01	-0.02	-0.07	-0.01	0.05	0.07	0.01	-0.06
45	1	-0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.02
46	6	0.01	0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01
47	1	-0.06	0.08	-0.01	0.02	-0.02	-0.01	0.02	-0.03	0.04
48	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.02	0.00	-0.01
49	1	0.03	0.04	0.03	0.05	0.07	0.07	-0.05	-0.07	-0.06
50	1	0.00	0.02	0.02	-0.06	-0.11	-0.09	0.05	0.08	0.08
51	6	-0.01	0.00	-0.01	0.05	-0.04	-0.01	-0.05	0.04	0.01
52	1	0.09	-0.03	0.01	-0.41	0.42	0.18	0.39	-0.37	-0.15
53	6	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01
54	1	-0.02	-0.01	-0.02	0.02	0.01	0.03	-0.02</		

65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.02
73	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
74	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	0.02

142

143

144

A

A

A

Frequencies --	1351.6819	1365.6480	1368.9888
Red. masses --	1.5753	1.2715	1.8653
Frc consts --	1.6958	1.3971	2.0597
IR Inten --	2.3942	4.2088	4.4971
Raman Activ --	1.8233	1.0219	10.4931
Depolar (P) --	0.6812	0.6079	0.1418
Depolar (U) --	0.8104	0.7561	0.2484

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
3	6	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00
5	6	0.01	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01
6	6	-0.07	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	-0.02
7	8	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	0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
10	1	-0.01	0.00	0.01	0.58	0.25	-0.29	0.01	0.00	0.00
11	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.04	0.00	0.00	0.00
12	6	0.01	0.00	0.00	0.05	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
13	1	-0.02	-0.04	0.04	-0.18	0.21	-0.28	0.02	0.01	0.00
14	6	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.09	-0.02
15	8	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.03
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.04	0.07	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.03	0.03	0.01	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	0.08	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
20	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.01	0.01	0.01	0.03	0.00	-0.03	0.00	-0.01	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	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
25	1	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
26	6	0.13	-0.13	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	0.00
27	1	-0.39	0.47	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.11	0.16	-0.01
28	1	-0.38	0.47	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.09	0.00
29	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.01	0.00	0.01	0.00
30	1	0.01	-0.02	-0.01	0.10	-0.26	-0.15	0.01	-0.03	-0.02
31	1	0.00	-0.01	-0.01	0.11	-0.22	-0.17	0.01	-0.02	-0.01
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00

33	1	0.00	0.00	0.00	0.06	0.13	0.07	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
35	1	0.00	0.00	0.00	0.07	0.06	-0.03	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
37	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	-0.06	0.01	0.00	0.01
38	1	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.01	-0.09	0.01	0.00	0.01
39	1	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	-0.08	0.00	0.00	0.01
40	6	-0.04	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
41	1	-0.01	-0.05	0.12	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.03
42	6	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
43	1	0.03	0.10	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.01
44	1	-0.02	-0.02	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.02
45	1	-0.01	0.07	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02
46	6	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
47	1	-0.04	0.03	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.04	-0.03	0.03
48	6	0.02	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.02	-0.08
49	1	-0.07	-0.06	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.10	0.04	0.08
50	1	-0.05	-0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.26	0.25	0.26
51	6	-0.03	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.07	0.03	0.11
52	1	0.28	-0.13	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.17	-0.37	-0.35
53	6	0.02	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.07	-0.08
54	1	-0.05	-0.02	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.27	0.06	0.25
55	6	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.09	0.01
56	1	-0.04	0.08	-0.05	0.00	0.01	0.00	0.14	-0.35	0.21
57	6	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.05	-0.02
58	1	-0.02	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.09	0.11
59	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.01	0.00	-0.09	-0.18	0.00	-0.01	-0.02	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.03	0.04	0.00	0.00	0.01
73	1	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.03	-0.01	0.00	0.00
74	1	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	0.07	0.01	0.00	0.00

		145			146			147		
		A			A			A		
Frequencies --		1373.7055			1381.3486			1392.7814		
Red. masses --		1.3416			1.3321			1.2860		
Frc consts --		1.4916			1.4976			1.4698		
IR Inten --		4.3307			0.8619			4.4872		
Raman Activ --		9.0916			1.6091			7.7674		
Depolar (P) --		0.4507			0.3284			0.7121		
Depolar (U) --		0.6214			0.4944			0.8318		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	

1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.02
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.02
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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
8	6	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.03	0.04	0.00	0.04	0.01
9	6	-0.02	0.00	0.01	-0.06	-0.07	-0.01	0.01	-0.02	0.03
10	1	0.18	0.06	-0.08	0.34	0.34	-0.14	0.16	0.14	-0.02
11	8	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.01	-0.01	-0.03	0.04	-0.04
13	1	0.01	0.00	-0.01	-0.26	0.03	-0.06	0.25	-0.37	0.42
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	6	-0.01	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.00	-0.04	0.00	-0.03
17	1	0.02	-0.01	0.03	-0.05	0.08	-0.06	0.11	-0.01	0.20
18	1	0.05	-0.01	0.01	-0.11	0.04	-0.04	0.22	-0.07	0.03
19	1	0.04	0.01	0.01	-0.12	-0.01	0.01	0.19	0.05	0.12
20	6	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.01
21	1	0.03	-0.03	-0.03	0.09	0.16	-0.02	0.23	-0.11	-0.25
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.05	-0.07
24	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.02	-0.03	0.05	-0.04
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.08	0.03	-0.05
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	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
29	6	0.00	0.01	0.00	0.03	-0.10	-0.03	0.00	-0.02	-0.01
30	1	0.03	-0.08	-0.05	-0.18	0.48	0.27	-0.02	0.08	0.04
31	1	0.03	-0.06	-0.05	-0.17	0.37	0.20	-0.03	0.06	0.03
32	6	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.06
33	1	0.02	0.05	0.03	-0.04	-0.09	-0.05	0.15	0.28	0.13
34	6	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.05	-0.02	0.05
35	1	0.03	0.03	-0.02	-0.03	-0.02	0.01	0.21	0.19	-0.12
36	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01
37	1	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.04	0.05
38	1	-0.02	0.00	-0.02	-0.06	0.01	-0.03	0.00	0.04	0.07
39	1	0.01	0.01	-0.03	0.01	0.03	-0.04	0.00	0.00	0.03
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
44	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01
45	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00

53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.02
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
63	6	-0.09	0.01	0.11	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01
64	6	0.00	-0.05	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
65	8	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
66	1	0.36	0.71	-0.01	0.01	0.03	0.00	-0.04	-0.07	0.00
67	6	0.01	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
68	1	0.09	0.09	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00
69	1	-0.05	0.19	0.12	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.04	-0.02
70	1	0.01	0.15	0.14	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.03	-0.03
71	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.09	-0.10	-0.17	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.02
73	1	0.17	-0.03	-0.10	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.00
74	1	0.16	0.05	-0.17	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.04

148

149

150

A

A

A

Frequencies --	1399.4114	1404.0182	1411.6946
Red. masses --	1.3363	1.2745	1.3333
Frc consts --	1.5419	1.4803	1.5655
IR Inten --	7.3054	5.7921	3.6967
Raman Activ --	2.6928	1.3462	24.7660
Depolar (P) --	0.6755	0.7065	0.4945
Depolar (U) --	0.8063	0.8280	0.6617

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.01	0.01	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	8	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.01	-0.04	-0.03	0.02	0.03	0.04	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.04	0.02	0.05	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
10	1	0.36	0.04	-0.15	-0.05	0.03	0.03	-0.01	-0.01	0.00
11	8	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.02	0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1	0.28	-0.39	0.42	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.02	-0.02
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	6	0.03	0.00	0.03	0.03	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.09	0.01	-0.14	-0.09	0.11	-0.11	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.13	0.07	-0.02	-0.14	0.08	-0.06	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.14	-0.05	-0.11	-0.17	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00
20	6	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00



21	1	-0.02	-0.18	-0.04	-0.13	-0.06	0.08	-0.01	0.01	0.02
22	6	-0.01	0.02	-0.02	-0.05	0.05	-0.07	0.00	0.00	0.00
23	1	0.01	-0.07	0.12	0.04	-0.21	0.38	0.00	0.00	0.00
24	1	0.04	-0.11	0.07	0.12	-0.34	0.21	0.00	0.00	0.00
25	1	0.13	-0.04	0.10	0.40	-0.11	0.33	0.00	0.00	0.00
26	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
29	6	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.04	-0.08	-0.05	0.00	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
31	1	0.02	-0.04	-0.06	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
32	6	0.00	0.04	0.06	0.00	-0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00
33	1	-0.14	-0.27	-0.12	0.13	0.24	0.10	0.00	0.00	0.00
34	6	0.05	0.02	-0.05	-0.05	-0.02	0.04	0.00	0.00	0.00
35	1	-0.21	-0.18	0.12	0.20	0.17	-0.12	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
37	1	-0.04	-0.01	-0.01	-0.05	0.03	-0.07	0.00	0.00	0.00
38	1	-0.05	0.03	0.01	-0.04	-0.02	-0.07	0.00	0.00	-0.01
39	1	0.01	0.01	-0.04	0.01	-0.01	-0.09	0.00	0.00	0.00
40	6	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
41	1	-0.02	0.01	-0.01	-0.10	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
43	1	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
44	1	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00
45	1	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.02	-0.03	0.00	0.01	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
63	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.06
64	6	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	-0.03
65	8	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
66	1	-0.02	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.15	0.26	-0.02
67	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	0.12	0.04
68	1	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.22	-0.37	-0.03
69	1	0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.57	-0.01
70	1	0.00	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.31	-0.33	-0.34
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.04
72	1	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.07	0.11

73	1	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.05	0.03
74	1	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.04	0.10
		151			152			153		
		A			A			A		
Frequencies --		1417.0146			1417.9087			1418.7082		
Red. masses --		1.5856			1.6082			1.2589		
Frc consts --		1.8758			1.9050			1.4929		
IR Inten --		7.5776			6.7934			0.6510		
Raman Activ --		17.8210			3.5193			1.2396		
Depolar (P) --		0.3864			0.3946			0.4207		
Depolar (U) --		0.5574			0.5659			0.5922		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
4	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
5	6	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01
6	6	0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00
7	8	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	0.01	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
10	1	-0.05	-0.03	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.11	0.03	-0.05
11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
13	1	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.05	0.05	0.05	-0.06
14	6	0.05	0.11	0.02	-0.05	-0.11	-0.02	0.01	0.03	0.01
15	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.02	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.06	-0.01	0.04
17	1	0.07	-0.04	0.10	-0.02	0.01	-0.03	-0.17	0.08	-0.26
18	1	0.11	-0.06	0.03	-0.04	0.02	-0.01	-0.29	0.15	-0.09
19	1	0.10	0.03	0.06	-0.04	-0.01	-0.02	-0.27	-0.08	-0.16
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
21	1	-0.02	0.03	0.03	-0.01	0.01	0.01	0.02	-0.06	-0.04
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.03
23	1	0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.02	-0.13
24	1	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.06	0.13	-0.08
25	1	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.00	-0.02	-0.10	0.00	-0.13
26	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
27	1	0.04	-0.04	0.00	-0.01	0.03	-0.01	0.03	-0.02	-0.01
28	1	0.02	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.01	0.01
29	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
30	1	-0.02	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.04	-0.05	-0.04
31	1	-0.01	0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.02	-0.05	-0.06
32	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03
33	1	-0.03	-0.05	-0.02	0.01	0.02	0.01	0.07	0.12	0.05
34	6	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.02
35	1	-0.04	-0.03	0.02	0.01	0.01	-0.01	0.09	0.08	-0.06
36	6	0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.07
37	1	-0.05	0.08	-0.14	0.01	0.00	0.01	0.11	-0.16	0.28
38	1	-0.07	-0.04	-0.15	0.01	0.00	0.01	0.15	0.09	0.31
39	1	0.03	0.02	-0.15	0.00	0.00	0.01	-0.05	-0.03	0.32
40	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00

41	1	0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.07	-0.01	-0.02
42	6	-0.02	-0.02	0.04	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.04
43	1	0.10	0.09	-0.14	-0.02	0.01	0.02	0.09	0.09	-0.13
44	1	0.09	-0.02	-0.17	-0.05	0.00	0.01	0.07	-0.02	-0.17
45	1	-0.03	0.11	-0.15	0.00	-0.04	0.02	-0.03	0.09	-0.15
46	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.02	0.00
47	1	0.01	0.00	0.01	0.02	-0.04	0.02	-0.07	0.05	-0.02
48	6	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.01
49	1	0.00	0.04	0.00	0.01	-0.03	0.01	-0.02	-0.01	-0.01
50	1	-0.06	-0.05	-0.05	0.07	0.06	0.06	-0.02	-0.03	-0.04
51	6	-0.05	-0.04	-0.06	0.05	0.04	0.06	-0.01	-0.02	-0.02
52	1	0.25	0.17	0.26	-0.29	-0.16	-0.27	0.05	0.07	0.08
53	6	-0.06	-0.05	-0.05	0.06	0.05	0.05	-0.02	-0.01	-0.01
54	1	0.10	0.01	0.10	-0.11	-0.01	-0.10	0.03	0.00	0.03
55	6	0.02	0.03	0.01	-0.02	-0.03	-0.01	0.01	0.01	0.00
56	1	0.05	-0.06	0.06	-0.05	0.06	-0.06	0.02	-0.02	0.02
57	6	0.00	-0.05	0.01	0.00	0.06	-0.01	0.00	-0.02	0.00
58	1	0.02	-0.07	0.03	-0.02	0.07	-0.04	0.01	-0.02	0.01
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.02	0.00	-0.02	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	-0.06	-0.12	0.00	-0.06	-0.12	0.00	-0.01	-0.01	0.00
67	6	0.00	0.02	0.01	0.01	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
68	1	-0.04	-0.08	0.00	-0.05	-0.10	0.00	-0.01	-0.01	0.00
69	1	0.01	-0.14	0.01	0.01	-0.18	0.02	0.00	-0.03	0.00
70	1	-0.08	-0.09	-0.09	-0.10	-0.12	-0.12	-0.02	-0.02	-0.02
71	6	-0.05	0.02	0.08	-0.06	0.02	0.09	-0.01	0.00	0.01
72	1	0.09	-0.11	-0.32	0.11	-0.14	-0.38	0.02	-0.02	-0.05
73	1	0.34	-0.12	-0.16	0.39	-0.15	-0.19	0.06	-0.02	-0.03
74	1	0.14	0.08	-0.33	0.18	0.10	-0.40	0.03	0.01	-0.05

154

155

156

A

A

A

Frequencies --	1419.9277	1422.4074	1431.8803
Red. masses --	1.2925	1.2571	1.5620
Frc consts --	1.5354	1.4986	1.8869
IR Inten --	6.4735	42.8712	1.9440
Raman Activ --	3.5799	4.0110	2.4203
Depolar (P) --	0.6748	0.5682	0.3447
Depolar (U) --	0.8058	0.7246	0.5127

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

9	6	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.05	-0.06	-0.03
10	1	-0.02	-0.04	0.01	0.05	0.09	-0.02	-0.19	0.20	0.14
11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.02
13	1	0.03	-0.04	0.05	-0.03	0.10	-0.11	-0.14	0.08	-0.08
14	6	0.02	0.03	0.01	0.01	0.03	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	6	0.04	-0.01	0.03	-0.03	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.04
17	1	-0.13	0.06	-0.20	0.08	-0.04	0.13	-0.05	-0.03	-0.08
18	1	-0.22	0.12	-0.07	0.16	-0.07	0.04	-0.06	0.09	-0.04
19	1	-0.20	-0.06	-0.12	0.13	0.04	0.07	-0.02	-0.06	-0.13
20	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.07	0.04	0.07
21	1	0.01	-0.01	-0.02	0.06	0.00	-0.05	0.55	-0.08	-0.49
22	6	0.02	-0.01	0.02	-0.02	0.02	-0.03	-0.01	0.00	0.00
23	1	-0.02	0.05	-0.12	0.02	-0.08	0.16	0.02	0.03	0.05
24	1	-0.04	0.11	-0.07	0.06	-0.15	0.09	0.07	-0.01	-0.02
25	1	-0.11	0.02	-0.11	0.17	-0.04	0.15	0.02	-0.02	0.00
26	6	0.02	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.01
27	1	-0.03	-0.02	0.04	-0.06	0.01	0.02	-0.08	0.08	-0.01
28	1	-0.08	0.03	-0.03	-0.05	0.03	-0.01	0.01	0.02	0.02
29	6	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01
30	1	0.03	-0.04	-0.03	-0.01	0.01	0.01	0.08	-0.11	-0.08
31	1	0.02	-0.04	-0.04	-0.01	0.03	0.02	-0.01	0.01	-0.05
32	6	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.02	0.00	0.01	0.02
33	1	0.06	0.10	0.04	-0.05	-0.08	-0.03	-0.03	-0.05	-0.02
34	6	-0.02	-0.01	0.02	0.02	0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.01
35	1	0.08	0.07	-0.05	-0.06	-0.06	0.04	-0.05	-0.03	0.02
36	6	0.01	-0.01	0.03	-0.02	0.01	-0.07	0.01	0.00	0.01
37	1	-0.04	0.08	-0.14	0.09	-0.17	0.29	-0.06	0.02	-0.05
38	1	-0.08	-0.05	-0.16	0.16	0.09	0.32	-0.03	0.00	-0.05
39	1	0.03	0.03	-0.14	-0.05	-0.05	0.31	0.01	-0.02	-0.08
40	6	-0.04	0.00	-0.02	0.02	0.01	0.00	0.07	0.01	0.03
41	1	0.17	0.00	0.07	-0.13	-0.01	-0.03	-0.29	0.01	-0.10
42	6	0.02	0.04	-0.09	0.02	0.02	-0.07	0.00	-0.01	0.00
43	1	-0.20	-0.22	0.29	-0.15	-0.16	0.21	-0.03	0.02	0.01
44	1	-0.12	0.04	0.39	-0.07	0.03	0.29	0.02	0.00	-0.03
45	1	0.07	-0.20	0.34	0.06	-0.13	0.26	0.02	0.05	0.00
46	6	-0.01	0.01	0.00	0.02	-0.03	0.00	-0.05	0.07	0.01
47	1	0.03	-0.02	0.00	-0.06	0.04	-0.03	0.15	-0.09	0.05
48	6	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.01
49	1	-0.01	0.04	-0.03	-0.04	0.01	-0.04	0.05	0.04	0.03
50	1	-0.05	0.00	0.00	-0.06	-0.01	-0.03	0.02	0.02	0.04
51	6	-0.03	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
52	1	0.17	0.00	0.07	0.11	0.02	0.07	-0.01	0.01	0.00
53	6	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
54	1	0.03	0.00	0.03	0.03	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.01
55	6	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.01	-0.02	0.02	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00
57	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.00	-0.01
59	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00

61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.02
62	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.00	-0.01	0.01
70	1	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.00
71	6	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
72	1	0.02	-0.02	-0.06	0.02	-0.03	-0.09	0.00	0.00	-0.01
73	1	0.06	-0.03	-0.03	0.09	-0.03	-0.04	0.00	0.02	0.00
74	1	0.02	0.01	-0.07	0.04	0.02	-0.08	0.01	0.00	0.02

157

158

159

A

A

A

Frequencies --	1432.8322	1442.8169	1463.5075
Red. masses --	2.7537	1.8145	1.3419
Frc consts --	3.3309	2.2255	1.6934
IR Inten --	8.2540	5.3126	2.5457
Raman Activ --	5.7044	6.5726	1.0126
Depolar (P) --	0.4024	0.2285	0.6324
Depolar (U) --	0.5739	0.3720	0.7748

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.04	0.01	0.03
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.01	0.00	0.00	0.10	0.07	-0.01	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.03	0.02	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.16	-0.13	-0.13	0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.03	0.03	0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.02	0.00	0.04	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.02	-0.02
9	6	-0.03	0.04	0.02	0.02	-0.03	-0.02	-0.03	0.07	0.01
10	1	0.09	-0.13	-0.08	-0.06	0.13	0.05	0.08	-0.24	-0.10
11	8	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.01
13	1	0.05	-0.01	-0.01	-0.10	0.03	-0.04	0.11	-0.03	0.02
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	6	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.02
17	1	0.03	0.02	0.04	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.02
18	1	0.02	-0.05	0.02	0.02	0.02	0.00	0.00	0.12	-0.08
19	1	0.00	0.03	0.07	0.02	-0.01	-0.03	0.02	-0.05	-0.13
20	6	0.04	-0.02	-0.04	-0.03	0.03	0.03	-0.04	-0.13	0.00
21	1	-0.34	0.06	0.30	0.21	-0.10	-0.21	0.32	0.78	0.00
22	6	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.02	-0.02	-0.03	-0.01	-0.02
23	1	-0.02	-0.01	-0.05	0.01	-0.05	0.11	0.10	0.14	0.13
24	1	-0.05	0.03	0.00	0.04	-0.13	0.09	0.16	-0.07	-0.02
25	1	-0.03	0.01	-0.02	0.12	-0.02	0.12	-0.01	0.03	0.07
26	6	0.02	-0.02	0.00	0.02	0.04	0.03	0.00	0.00	0.00
27	1	-0.02	0.10	-0.03	0.20	-0.11	0.00	0.02	0.01	-0.02
28	1	0.00	0.07	0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01

29	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
30	1	-0.05	0.05	0.04	0.03	-0.04	-0.03	0.09	0.01	-0.05
31	1	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.04	-0.11
32	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
33	1	0.02	0.03	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.02	0.01
34	6	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00
35	1	0.02	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01
36	6	0.01	-0.01	-0.05	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
37	1	-0.02	-0.17	0.21	0.02	-0.06	0.08	-0.02	-0.02	0.02
38	1	-0.03	0.16	0.25	0.03	0.04	0.11	0.00	0.02	0.04
39	1	-0.01	0.03	0.16	-0.01	0.00	0.13	0.00	-0.01	0.00
40	6	0.00	0.01	0.00	-0.18	-0.02	-0.08	-0.01	0.00	0.00
41	1	-0.03	-0.01	0.01	0.73	-0.02	0.24	0.04	0.00	0.02
42	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
43	1	-0.03	0.01	0.03	0.04	0.05	-0.06	0.00	0.04	-0.03
44	1	-0.05	0.00	0.04	0.01	-0.01	-0.11	-0.05	0.00	-0.03
45	1	0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.03	-0.08	-0.01	-0.03	0.00
46	6	-0.15	0.21	0.02	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.44	-0.25	0.15	0.05	-0.03	0.02	-0.01	0.00	0.00
48	6	0.02	-0.07	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.16	0.16	0.06	0.02	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
50	1	0.05	0.08	0.15	0.02	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
51	6	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.04	0.00	0.00	0.03	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
53	6	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.03	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	-0.02	-0.04	0.06	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
70	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03
73	1	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.03	0.00
74	1	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.02

160

161

162

A

A

A

Frequencies --	1479.4465	1480.7784	1483.6563
Red. masses --	1.0755	1.0464	1.0747
Frc consts --	1.3870	1.3518	1.3939
IR Inten --	7.9832	10.3318	0.4862

Raman Activ --				38.0149		13.2799			7.8554		
Depolar (P) --				0.5096		0.7248			0.7477		
Depolar (U) --				0.6751		0.8405			0.8557		
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	0.01	0.00	-0.01	
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
10	1	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	
11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
13	1	-0.01	0.03	-0.03	-0.02	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	
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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
17	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	
21	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.04	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	0.01	0.02	0.00	
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.02	
26	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.04	0.00	
27	1	-0.02	-0.01	0.02	-0.02	-0.01	0.02	-0.35	-0.26	0.36	
28	1	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.01	-0.02	-0.35	-0.28	-0.34	
29	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
30	1	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	
31	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	
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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
37	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.02	
38	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.01	
39	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.03	0.00	
40	6	0.00	0.00	0.							

49	1	0.01	-0.04	0.03	0.00	-0.02	0.02	0.01	-0.01	0.01
50	1	0.05	-0.02	-0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.00
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	-0.01
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	-0.03	-0.02	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.02	0.06	-0.01	0.03	-0.03	0.02	-0.01	-0.01	0.00
67	6	-0.02	0.01	0.04	-0.04	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
68	1	-0.24	-0.33	-0.06	0.41	-0.34	0.41	0.00	0.06	-0.02
69	1	0.14	0.22	-0.47	-0.14	0.22	0.31	-0.01	-0.04	0.03
70	1	0.49	0.03	-0.05	0.30	-0.26	-0.35	-0.07	0.01	0.03
71	6	0.03	0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
72	1	-0.13	0.20	0.03	0.10	-0.14	0.15	0.01	-0.01	0.00
73	1	0.12	-0.22	-0.09	-0.12	-0.13	0.03	-0.01	0.00	0.00
74	1	-0.28	-0.10	-0.22	0.10	0.05	-0.05	0.01	0.01	0.00

163

164

165

A

A

A

Frequencies --	1485.5561	1488.4029	1493.8031
Red. masses --	1.0973	1.0685	1.0543
Frc consts --	1.4267	1.3946	1.3862
IR Inten --	2.9100	0.9776	7.9977
Raman Activ --	5.2938	2.8672	8.2947
Depolar (P) --	0.7480	0.7218	0.7083
Depolar (U) --	0.8558	0.8384	0.8292

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.01
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	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
5	6	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00
6	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	8	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	0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.02	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
10	1	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.01
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	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	0.01



17	1	0.00	0.01	0.00	-0.08	0.08	-0.11	0.09	0.38	0.30
18	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.17	0.12	0.37	0.28	-0.22
19	1	0.00	0.00	0.01	-0.08	0.07	0.21	-0.21	-0.08	-0.16
20	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.01	0.01	0.01	-0.01
21	1	0.02	0.00	-0.01	0.11	0.13	-0.04	-0.03	-0.02	0.02
22	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.02
23	1	-0.01	-0.02	-0.01	-0.17	-0.22	-0.22	-0.04	-0.18	0.14
24	1	-0.02	0.00	0.00	-0.36	0.01	0.09	0.13	0.17	-0.16
25	1	0.02	-0.01	0.00	0.17	-0.02	0.17	0.14	-0.23	-0.28
26	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	-0.02	-0.03	0.03	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01
28	1	-0.03	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01
29	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
30	1	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00	-0.03	0.05	0.02	-0.03
31	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.05	-0.02	0.03	-0.05
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.02	-0.02	-0.01
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
35	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01
36	6	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00
37	1	0.07	0.03	-0.01	0.45	0.13	0.02	0.18	0.11	-0.07
38	1	0.02	-0.04	-0.05	-0.07	-0.10	-0.24	0.11	-0.12	-0.11
39	1	0.00	0.03	0.04	0.01	0.38	0.23	-0.02	0.03	0.15
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	0.14	-0.01	-0.11	-0.02	0.04	0.00	0.00	-0.03	0.02
44	1	-0.12	0.00	0.04	-0.03	0.00	-0.03	0.04	0.00	0.01
45	1	-0.08	-0.16	-0.12	0.01	0.00	0.03	0.00	0.03	-0.01
46	6	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
47	1	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
48	6	0.05	-0.06	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	-0.07	0.55	-0.35	0.01	-0.05	0.03	0.00	-0.01	0.01
50	1	-0.52	0.29	0.28	0.05	-0.03	-0.03	0.02	-0.01	0.00
51	6	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	-0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	-0.01	-0.06	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00

69	1	0.01	0.04	-0.04	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
70	1	0.07	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	-0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
73	1	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
74	1	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
		166			167			168		
		A			A			A		
Frequencies --		1495.1554			1499.3956			1500.0800		
Red. masses --		1.0649			1.0598			1.0646		
Frc consts --		1.4026			1.4038			1.4114		
IR Inten --		14.6001			5.1940			8.6733		
Raman Activ --		0.8011			7.4533			4.2416		
Depolar (P) --		0.7319			0.4789			0.7019		
Depolar (U) --		0.8452			0.6476			0.8248		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01
2	6	0.00	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	0.01	0.01	0.00
5	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
6	6	-0.03	-0.02	-0.02	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
7	8	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	0.01	-0.01	-0.03
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
10	1	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.04	0.00
11	8	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	-0.01	0.00
13	1	0.02	-0.02	0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.02
14	6	0.00	-0.01	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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.03
17	1	-0.01	0.01	-0.02	0.02	-0.07	0.01	-0.14	0.33	-0.12
18	1	-0.01	-0.03	0.02	-0.03	0.03	-0.02	0.12	-0.27	0.18
19	1	-0.01	0.01	0.04	0.06	-0.02	-0.06	-0.27	0.12	0.40
20	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.01
21	1	0.01	0.04	0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.09	0.09	-0.04
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
23	1	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.03	0.00	-0.09	-0.19	-0.01
24	1	-0.03	-0.01	0.01	0.01	-0.02	0.02	-0.07	0.14	-0.08
25	1	0.00	0.01	0.02	-0.02	0.02	0.02	0.14	-0.15	-0.12
26	6	-0.02	-0.02	0.00	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.16	0.18	-0.20	0.15	0.12	-0.17	0.01	0.00	-0.01
28	1	0.19	0.14	0.18	0.15	0.14	0.15	0.00	0.01	0.01
29	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
30	1	0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.09	0.02	-0.05
31	1	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.01	-0.10
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00

37	1	0.00	0.00	0.00	0.07	0.03	-0.01	-0.34	-0.11	-0.01
38	1	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.01	0.10	0.17
39	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.05	0.04	0.00	-0.25	-0.20
40	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.01
42	6	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.01	0.00
43	1	-0.13	-0.27	0.25	0.39	-0.39	-0.14	0.08	-0.06	-0.04
44	1	0.57	0.03	0.02	0.01	0.04	0.36	-0.02	0.01	0.06
45	1	0.12	0.50	0.01	-0.19	-0.29	-0.36	-0.04	-0.07	-0.07
46	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
48	6	0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	-0.02	0.14	-0.09	0.01	-0.10	0.06	0.00	-0.01	0.00
50	1	-0.12	0.08	0.08	0.09	-0.05	-0.05	0.01	0.00	-0.01
51	6	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	6	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
68	1	0.02	0.03	0.01	0.03	0.07	0.00	0.02	0.02	0.01
69	1	-0.01	-0.01	0.04	-0.02	-0.04	0.07	-0.01	-0.01	0.04
70	1	-0.04	0.00	0.01	-0.09	0.00	0.02	-0.03	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	-0.01	0.01	0.01	-0.04	0.04	0.11	-0.03	0.04	0.01
73	1	0.00	-0.02	0.00	-0.02	-0.18	-0.03	0.02	-0.03	-0.01
74	1	-0.02	-0.01	-0.02	-0.10	-0.03	-0.14	-0.06	-0.02	-0.03

169

170

171

A

A

A

Frequencies --	1501.8390	1502.6558	1503.6728
Red. masses --	1.0507	1.0522	1.0581
Frc consts --	1.3964	1.3998	1.4095
IR Inten --	18.3628	10.3493	9.8386
Raman Activ --	9.7062	13.5653	5.7612
Depolar (P) --	0.6414	0.6182	0.7493
Depolar (U) --	0.7815	0.7641	0.8567

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



57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.01	0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
67	6	0.01	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
68	1	0.15	0.21	0.04	-0.19	0.04	-0.15	0.00	-0.01	0.00
69	1	-0.08	-0.09	0.26	0.07	-0.06	-0.19	0.00	0.01	0.00
70	1	-0.24	-0.01	0.03	-0.03	0.06	0.09	0.01	0.00	0.00
71	6	0.04	0.02	0.01	-0.02	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00
72	1	-0.19	0.25	0.25	0.27	-0.40	0.42	0.00	0.00	-0.03
73	1	0.03	-0.44	-0.09	-0.33	-0.40	0.06	0.01	0.04	0.00
74	1	-0.40	-0.14	-0.35	0.32	0.14	-0.22	0.01	0.00	0.03

172

173

174

A

A

A

Frequencies --	1515.2442	1518.4514	1531.0536
Red. masses --	1.0531	1.0600	1.0935
Frc consts --	1.4246	1.4400	1.5103
IR Inten --	1.5508	7.8736	4.3738
Raman Activ --	2.0919	13.9129	6.1013
Depolar (P) --	0.7480	0.6798	0.7286
Depolar (U) --	0.8558	0.8094	0.8430

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	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	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	8	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	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.02
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
10	1	-0.04	-0.02	0.02	-0.01	0.03	0.01	0.02	-0.01	-0.01
11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1	0.02	0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01
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	6	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.00
17	1	-0.03	-0.04	-0.06	-0.08	0.35	-0.01	-0.04	0.19	0.00
18	1	-0.05	-0.09	0.06	0.16	-0.10	0.05	0.10	0.00	0.00
19	1	0.03	0.03	0.08	-0.30	0.05	0.24	-0.16	0.01	0.07
20	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.01
21	1	0.00	-0.02	-0.01	-0.04	-0.08	0.01	0.09	0.10	-0.04
22	6	-0.03	0.01	0.01	-0.01	-0.03	-0.02	0.00	-0.01	0.00
23	1	0.08	-0.01	0.24	0.23	0.46	0.07	0.02	0.06	-0.01
24	1	0.31	0.10	-0.16	0.25	-0.21	0.08	0.00	-0.03	0.02

25	1	0.02	-0.15	-0.27	-0.32	0.28	0.13	-0.03	0.04	0.05
26	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.03	0.05	-0.05
30	1	-0.04	-0.03	0.02	0.12	0.07	-0.06	-0.53	-0.36	0.25
31	1	0.02	-0.02	0.05	-0.03	0.03	-0.13	0.19	-0.21	0.57
32	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
36	6	0.02	-0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
37	1	0.11	-0.15	0.26	0.14	0.05	0.00	0.00	0.01	-0.01
38	1	-0.47	0.25	0.00	0.01	-0.05	-0.07	0.03	-0.02	0.00
39	1	0.08	0.50	-0.14	0.00	0.10	0.10	0.00	-0.02	0.02
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
44	1	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
45	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
46	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01
73	1	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
74	1	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01

175

A

176

A

177

A

Frequencies --	1532.8277	1627.2588	1655.4051
Red. masses --	3.9764	5.6863	7.0406
Frc consts --	5.5047	8.8715	11.3676
IR Inten --	17.3545	1.1593	20.9946
Raman Activ --	52.0428	11.2510	48.7257
Depolar (P) --	0.1637	0.2018	0.1579
Depolar (U) --	0.2813	0.3358	0.2728

  

	Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01	
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	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
6	6	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	-0.01	
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.08	-0.03	
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	
10	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	
11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
13	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	
14	6	0.11	-0.03	0.12	0.23	-0.25	0.29	0.00	0.00	0.00	
15	8	0.04	-0.04	0.04	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	
17	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.05	
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.03	0.02	
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.02	
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01	
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
23	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.02	
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.01	
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	0.00	
27	1	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	
28	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	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	-0.01	-0.01	
30	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.00	
31	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.04	0.00	
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.29	0.43	0.07	
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.30	-0.39	
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.32	-0.40	0.03	
35	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.23	-0.01	-0.37	
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
37	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
38	1	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
39	1	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
41	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.01	
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
43	1	0.03	0.01	-0.03	0.02	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	
44	1	-0.04	0.00	0.01	0.03	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	





13	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.06	0.05
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	6	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	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.04	-0.01	-0.03	-0.01	0.02
22	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	0.03	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.09	0.06	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.05	0.07	0.00	0.00	0.00
26	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	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	0.01
30	1	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.03	-0.06
31	1	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.05
32	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.02	0.00	-0.01	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
35	1	0.00	0.00	0.00	0.19	0.16	-0.13	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
39	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.03	-0.04	-0.01	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01
44	1	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02
45	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	0.03
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.04	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.09	0.74
63	6	-0.30	-0.33	0.14	0.00	0.00	0.00	0.12	0.08	-0.12
64	6	0.29	0.38	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.13	0.05

65	8	0.01	-0.01	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.03	-0.49
66	1	-0.09	-0.43	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.01	0.20	0.07
67	6	-0.03	-0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00
68	1	0.12	0.23	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.08	-0.02
69	1	-0.04	-0.20	0.09	0.00	0.00	0.00	0.01	0.09	0.01
70	1	-0.19	-0.11	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.04	0.05	0.03
71	6	0.03	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.01
72	1	0.09	-0.02	-0.25	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.08
73	1	0.08	0.09	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.01
74	1	-0.07	-0.02	0.14	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.01

Frequencies --	2999.7383	3016.7818	3023.1661
Red. masses --	1.0807	1.0398	1.0489
Frc consts --	5.7297	5.5758	5.6483
IR Inten --	1.0004	23.9892	14.1323
Raman Activ --	31.9507	318.0136	120.9272
Depolar (P) --	0.1624	0.1224	0.0217
Depolar (U) --	0.2794	0.2180	0.0424

[illegible]

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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
39	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01
67	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	-0.21	0.06	0.27	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.63	0.03	0.21	0.04	0.00	0.02
70	1	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.46	-0.46	-0.01	0.03	-0.03
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06
72	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.23	-0.17	-0.04
73	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.04	0.39	-0.16	0.77
74	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.00	-0.12	0.33	-0.01

184

185

186

A

A

A

Frequencies --	3032.1905	3033.3049	3035.3665
Red. masses --	1.0616	1.0579	1.0588
Frc consts --	5.7507	5.7350	5.7474
IR Inten --	21.6472	21.6519	24.2266
Raman Activ --	70.9760	28.2699	74.5468
Depolar (P) --	0.1101	0.1531	0.0816
Depolar (U) --	0.1984	0.2656	0.1509
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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	1	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00	0.03	0.01	0.00	0.01
11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	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	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.23	0.06	-0.16	-0.02	-0.01	0.02
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.12	0.16	0.00	-0.01	-0.02
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.04	0.00	0.01	0.00
20	6	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	0.04	-0.01	0.05	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	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
26	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.04	0.00
27	1	0.01	0.01	0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.31	-0.26	-0.55
28	1	0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.01	-0.29	-0.26	0.59
29	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.06	0.00	0.00	0.00
30	1	0.02	-0.01	0.03	0.47	-0.17	0.65	0.00	0.00	0.00
31	1	-0.02	-0.01	0.00	-0.40	-0.17	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	0.01	0.00	-0.01	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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
39	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
43	1	0.03	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.06	0.04	0.06
44	1	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00
45	1	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.01
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	-0.02	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.02	-0.06	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	-0.34	0.10	0.31	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01
50	1	0.10	0.63	-0.58	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.02	-0.02
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	-0.03	-0.06	0.07	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.03

53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
73	1	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
74	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

187

188

189

A

A

A

Frequencies --	3036.5183	3039.4302	3053.5722
Red. masses --	1.0495	1.0767	1.0407
Frc consts --	5.7017	5.8605	5.7172
IR Inten --	27.8067	14.9883	15.2506
Raman Activ --	156.6799	44.6010	139.3733
Depolar (P) --	0.0795	0.1290	0.0498
Depolar (U) --	0.1472	0.2286	0.0950

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	8	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	0.02	0.00	0.03	-0.03	0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00
10	1	-0.17	0.06	-0.33	0.38	-0.14	0.75	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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
13	1	0.00	0.04	0.04	0.01	-0.11	-0.10	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	6	-0.04	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.52	0.12	-0.35	0.24	0.06	-0.16	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.01	0.29	0.40	0.00	0.10	0.14	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	-0.28	0.09	0.00	-0.12	0.04	0.00	0.00	0.00
20	6	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00

21	1	-0.08	0.03	-0.09	0.10	-0.04	0.12	0.00	0.00	0.00
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.04	0.02	0.01	-0.06	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.06	-0.07	0.00	0.00	0.00
25	1	0.01	0.01	-0.01	0.03	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00
26	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
27	1	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.02
28	1	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.04	0.04	-0.09
29	6	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
30	1	-0.16	0.06	-0.23	-0.11	0.04	-0.15	0.00	0.00	0.00
31	1	0.11	0.05	-0.01	0.04	0.02	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	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	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	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	1	-0.01	0.02	0.01	0.02	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00
38	1	-0.01	-0.01	0.01	0.02	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
39	1	0.06	-0.01	0.00	-0.13	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.05
43	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.49	0.30	0.50
44	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.49	0.01
45	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.36	0.10	0.09
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.02	-0.04
50	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.03
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.03
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00

73	1	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	
74	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	
				190	191			192			
				A	A			A			
Frequencies --		3055.6408				3056.0169				3064.5278	
Red. masses --		1.0982				1.0362				1.0494	
Frc consts --		6.0414				5.7018				5.8064	
IR Inten --		14.4803				13.0488				17.1901	
Raman Activ --		142.8654				74.2148				74.8965	
Depolar (P) --		0.7266				0.0213				0.0538	
Depolar (U) --		0.8417				0.0417				0.1021	
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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
10	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.05	0.03	-0.01	0.06	
11	8	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	0.03	0.03	
13	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.03	-0.32	-0.31	
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	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	
17	1	0.00	0.00	0.00	0.08	0.02	-0.05	0.02	0.01	-0.02	
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00	
20	6	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	0.01	0.00	0.01	
22	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.04	-0.01	0.01	-0.01	
23	1	0.00	0.00	0.00	0.48	-0.21	-0.20	0.14	-0.06	-0.06	
24	1	0.00	0.00	0.00	0.12	0.40	0.47	0.02	0.09	0.10	
25	1	0.00	0.00	0.00	-0.25	-0.34	0.15	-0.07	-0.09	0.04	
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	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	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	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	
31	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	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	0.00	
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	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.02	-0.04	
37	1	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.14	-0.09	-0.20	0.54	0.33	
38	1	0.00	0.00	0.00	0.04	0.07	-0.03	-0.14	-0.24	0.11	
39	1	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.02	-0.01	0.44	-0.06	0.03	
40	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	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
10	1	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.03	0.18	0.00	0.00	0.01
11	8	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	0.01	-0.05	-0.05	0.00	0.00	0.00
13	1	0.00	-0.01	-0.01	-0.06	0.60	0.58	0.00	0.03	0.03
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	6	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	0.03	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	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	0.07	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
26	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09
27	1	-0.05	-0.04	-0.09	-0.02	-0.01	-0.03	0.32	0.27	0.54
28	1	0.02	0.01	-0.03	0.01	0.01	-0.02	-0.28	-0.25	0.54
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	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
31	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	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	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
37	1	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.26	0.16	0.00	0.00	0.00
38	1	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.14	0.06	0.00	0.00	0.00
39	1	0.00	0.00	0.00	0.24	-0.03	0.02	0.01	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	-0.04
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	-0.04	-0.02	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
44	1	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.05	0.00
45	1	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.01
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00
48	6	-0.03	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.02
49	1	0.37	-0.12	-0.31	0.00	0.00	0.00	0.18	-0.06	-0.15
50	1	0.01	0.14	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.01		

61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00
73	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
74	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.18	0.00	0.00	0.01	0.00

196

197

198

A

A

A

Frequencies --	3081.6251	3087.0614	3092.7521
Red. masses --	1.0972	1.0894	1.0997
Frc consts --	6.1392	6.1166	6.1977
IR Inten --	37.1201	18.8484	17.7459
Raman Activ --	124.1980	62.1458	47.7211
Depolar (P) --	0.3278	0.4723	0.5241
Depolar (U) --	0.4937	0.6416	0.6878

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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.03	0.03	-0.01	0.05
11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
13	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.14	0.14	0.00	0.02	0.02
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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01	-0.08
17	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.47	-0.12	0.30
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.43	0.57
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.17	0.04
20	6	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	0.01	0.00	0.01
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.01
26	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	-0.08	-0.07	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.08	0.07	-0.16	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	-0.03	-0.01	-0.01
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.04	0.12
31	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.26	0.12	-0.02
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	0.01	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	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.01	-0.01	0.02	0.02
38	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00
39	1	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	1	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	-0.04	-0.01	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.50	-0.17	-0.42	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.04	0.31	-0.27	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
51	6	-0.02	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.18	0.34	-0.39	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.02	0.08	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.05	-0.03	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.00	0.23	0.20	0.02	0.00	0.00	0.00
73	1	0.00	0.00	0.00	0.18	-0.06	0.37	0.00	0.00	0.01
74	1	0.00	0.00	0.00	0.26	-0.78	-0.01	0.00	-0.01	0.00

199

200

201

A

A

A

Frequencies --	3096.4047	3114.3611	3117.6245
Red. masses --	1.1058	1.0964	1.1021
Frc consts --	6.2466	6.2655	6.3116
IR Inten --	37.8710	15.0158	42.6809

Raman Activ --	128.8493	50.5369	65.9695
Depolar (P) --	0.5273	0.6171	0.6724
Depolar (U) --	0.6905	0.7632	0.8041

49	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.04	-0.14	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	-0.55	0.18	0.71	0.01	0.00	-0.01
69	1	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.01	-0.08	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.17	0.16	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.10	-0.01	0.00	0.00	0.00
73	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
74	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00

202

203

204

A

A

A

Frequencies --	3117.7464	3126.9990	3128.8878
Red. masses --	1.0985	1.0981	1.0979
Frc consts --	6.2911	6.3264	6.3328
IR Inten --	23.7067	17.0081	22.2917
Raman Activ --	31.1452	33.4903	63.1795
Depolar (P) --	0.7399	0.5113	0.7400
Depolar (U) --	0.8505	0.6767	0.8506

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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
10	1	0.00	0.00	-0.01	0.04	-0.01	0.08	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	6	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	-0.02	-0.02	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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00

17	1	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	-0.04	0.01	0.01	-0.16	0.05	0.00	0.01	0.00
20	6	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	0.00	0.00	0.00
22	6	0.01	-0.01	-0.01	0.03	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.12	0.05	0.05	-0.29	0.12	0.12	0.01	0.00	0.00
24	1	0.03	0.07	0.09	0.06	0.17	0.20	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	-0.01	0.00	-0.09	-0.14	0.05	0.00	0.01	0.00
26	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	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	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	1	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	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	6	0.01	-0.01	0.00	-0.06	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00
37	1	-0.02	0.05	0.03	0.14	-0.42	-0.26	-0.01	0.02	0.01
38	1	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.09	0.06	0.00	0.01	0.00
39	1	-0.07	0.01	-0.01	0.66	-0.06	0.06	-0.02	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	-0.05	-0.07	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	0.38	0.22	0.39	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	1	-0.05	0.73	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	1	0.24	-0.09	-0.07	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01
47	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.13	-0.10
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
50	1	0.00	0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.03
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
68	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.03	-0.09

69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.02
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.07	0.01
72	1	0.01	0.01	0.00	-0.03	-0.02	0.00	-0.69	-0.53	-0.07
73	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.04	-0.11
74	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.14	-0.37	0.00
		205			206			207		
		A			A			A		
Frequencies --		3133.2766			3140.7401			3142.6825		
Red. masses --		1.0879			1.1009			1.0993		
Frc consts --		6.2929			6.3981			6.3968		
IR Inten --		15.6709			10.7253			24.9730		
Raman Activ --		134.2014			48.1146			51.1801		
Depolar (P) --		0.3881			0.7055			0.6985		
Depolar (U) --		0.5591			0.8273			0.8225		
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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.03	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	6	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	-0.01	-0.01
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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.02	0.00	0.01	0.05	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.09	0.13	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.39	-0.12	0.00	0.00	0.00
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	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	-0.05	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.05	-0.03	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.08	0.27	0.33	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	0.42	0.57	-0.27	0.00	-0.01	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	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	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
31	1	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
32	6	0.05	0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	-0.62	-0.13	0.73	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.01	-0.16	-0.19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	1	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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1	0.00	0.02	0.02	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	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.08	0.01	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.11	0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.15	0.22	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.75	-0.24	0.00	0.00	0.00
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	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	0.04	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.28	0.12	0.11	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.06	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.01	0.00	-0.23	-0.31	0.14	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	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	0.01	0.00	0.00	0.00
31	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	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	0.01	0.00	-0.01	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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
38	1	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
39	1	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	1	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	1	0.14	-0.04	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	-0.04	-0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0	

57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.02	-0.07
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.55	0.23	0.78
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
68	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.04	0.12
69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	-0.02
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	0.03
71	6	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	-0.14	-0.10	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
73	1	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
74	1	0.02	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

211

212

213

A

A

A

Frequencies --	3172.7225	3175.4637	3189.5110
Red. masses --	1.0994	1.0944	1.0882
Frc consts --	6.5202	6.5016	6.5224
IR Inten --	4.8286	11.8025	3.5332
Raman Activ --	43.2929	201.1091	66.4094
Depolar (P) --	0.6887	0.2542	0.1528
Depolar (U) --	0.8156	0.4054	0.2651

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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	1	0.01	0.00	0.02	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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	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	1	0.01	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

25	1	0.01	0.02	-0.01	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	0.03	0.02	0.05
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	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	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	0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.04	0.18	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.06	0.00	0.00	0.00
35	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.63	0.73	0.00	0.00	0.00
36	6	-0.05	-0.07	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	1	-0.07	0.15	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	1	0.42	0.74	-0.36	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01
39	1	0.31	-0.05	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.06	-0.06
41	1	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.25	0.70	0.66
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
45	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
73	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
74	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

214

A

215

A

216

A

[illegible]

45	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	6	0.01	-0.08	0.03	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.02	-0.01
54	1	-0.09	0.90	-0.28	-0.02	0.21	-0.07	0.02	-0.21	0.07
55	6	0.02	0.01	0.01	-0.04	-0.02	-0.04	0.04	0.03	0.04
56	1	-0.22	-0.14	-0.19	0.45	0.28	0.39	-0.46	-0.29	-0.40
57	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.06	0.00	-0.01	-0.06	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.14	0.70	0.02	0.14	0.69	0.02
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
73	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
74	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

## 2. freq=raman b3lyp/6-311g(d,p) scrf=(cpcm,solvent=chloroform) nosymm geom=connectivity

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 --		16.0663		21.0806		30.8434	
Red. masses --		3.2917		5.1370		5.4383	
Frc consts --		0.0005		0.0013		0.0030	
IR Inten --		0.9470		0.6208		0.7190	
Raman Activ --		4.6775		1.2735		2.6964	
Depolar (P) --		0.7350		0.7110		0.7494	
Depolar (U) --		0.8473		0.8311		0.8567	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02
2	6	0.01	-0.01	0.01	0.02	0.03	-0.04

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

55	6	-0.03	-0.02	0.04	-0.05	0.07	0.05	0.11	0.18	-0.13
56	1	-0.03	-0.02	0.05	-0.06	0.09	0.05	0.14	0.23	-0.20
57	6	-0.03	-0.01	0.03	-0.07	0.05	0.11	0.07	0.12	0.05
58	1	-0.04	0.00	0.02	-0.08	0.05	0.15	0.06	0.12	0.15
59	8	0.00	0.03	0.00	-0.02	-0.01	-0.07	0.03	-0.01	0.04
60	8	0.03	-0.01	-0.07	0.03	-0.04	-0.03	-0.01	-0.03	-0.01
61	8	0.02	0.02	-0.01	0.01	-0.05	0.00	0.02	-0.07	0.02
62	6	0.02	0.00	-0.05	0.04	-0.06	-0.05	-0.05	-0.02	-0.01
63	6	-0.04	-0.01	-0.01	-0.03	-0.03	-0.09	-0.11	-0.02	-0.01
64	6	0.06	-0.04	0.14	-0.07	0.01	-0.10	-0.14	0.02	0.00
65	8	0.06	0.03	-0.04	0.11	-0.10	-0.04	-0.05	-0.02	-0.01
66	1	0.18	-0.05	0.23	-0.05	0.01	-0.09	-0.12	0.04	0.01
67	6	0.01	-0.07	0.22	-0.15	0.04	-0.15	-0.21	0.03	0.00
68	1	-0.13	-0.06	0.11	-0.17	0.03	-0.16	-0.23	0.00	-0.01
69	1	-0.05	-0.14	0.42	-0.16	0.11	-0.14	-0.22	0.09	0.00
70	1	0.20	-0.05	0.22	-0.19	0.01	-0.17	-0.25	0.03	0.00
71	6	-0.21	0.00	-0.15	-0.06	-0.04	-0.11	-0.14	-0.05	-0.03
72	1	-0.18	-0.02	-0.27	-0.01	-0.10	-0.09	-0.10	-0.10	-0.03
73	1	-0.35	0.03	-0.08	-0.05	0.03	-0.09	-0.14	-0.02	-0.02
74	1	-0.23	-0.01	-0.23	-0.12	-0.06	-0.16	-0.19	-0.07	-0.05

		4				5				6		
		A				A				A		
	Frequencies --	39.5275				48.9855				52.4361		
	Red. masses --	4.2646				4.5812				4.7643		
	Frc consts --	0.0039				0.0065				0.0077		
	IR Inten --	0.5007				0.1154				2.0205		
	Raman Activ --	4.2131				1.6099				3.1545		
	Depolar (P) --	0.7500				0.7169				0.7218		
	Depolar (U) --	0.8571				0.8351				0.8384		
Atom	AN	X	Y	Z		X	Y	Z		X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	-0.02		0.03	-0.01	0.03		-0.02	-0.02	0.00
2	6	-0.03	0.02	-0.05		0.06	-0.06	0.09		-0.05	-0.02	0.00
3	6	0.00	-0.01	0.00		0.01	0.00	-0.03		-0.01	0.00	0.01
4	6	0.01	-0.01	0.02		0.01	0.00	-0.04		0.01	0.01	0.00
5	6	0.01	0.01	0.02		0.00	-0.01	-0.04		0.01	0.04	-0.01
6	6	0.01	0.00	0.03		0.01	0.03	-0.06		0.01	0.04	-0.01
7	8	-0.05	0.03	-0.08		0.10	-0.08	0.14		-0.04	-0.03	0.02
8	6	0.00	0.00	0.00		0.02	-0.03	-0.01		-0.01	-0.06	-0.03
9	6	0.01	-0.01	0.02		0.01	0.00	-0.04		0.04	-0.04	0.01
10	1	0.00	-0.03	0.02		0.02	0.02	-0.03		0.03	-0.06	0.01
11	8	0.01	-0.01	0.03		0.01	-0.02	-0.06		0.07	-0.05	0.03
12	6	0.01	-0.01	0.02		0.01	0.00	-0.03		0.05	0.00	0.01
13	1	0.01	-0.01	0.01		0.02	-0.01	-0.03		0.07	-0.01	0.02
14	6	0.02	0.02	0.01		-0.03	0.01	0.00		0.01	-0.01	-0.01
15	8	0.17	-0.02	-0.14		-0.03	0.01	0.01		-0.06	-0.10	0.02
16	6	0.00	-0.02	0.00		0.02	0.00	0.01		0.00	-0.12	-0.07
17	1	0.00	-0.01	0.00		0.02	-0.04	0.00		-0.01	-0.13	-0.09
18	1	0.00	-0.04	0.01		0.02	0.04	-0.03		0.04	-0.15	-0.05
19	1	0.00	-0.03	-0.03		0.01	0.02	0.06		-0.02	-0.13	-0.11
20	6	0.00	0.00	0.00		0.02	-0.02	-0.01		0.00	-0.03	0.00
21	1	0.00	0.02	0.00		0.02	-0.05	-0.01		-0.01	-0.01	0.02
22	6	0.00	-0.04	-0.05		0.00	0.05	0.08		-0.02	-0.04	0.00

23	1	0.00	-0.03	-0.07	0.00	0.02	0.12	-0.03	-0.05	0.00
24	1	0.01	-0.06	-0.03	-0.01	0.08	0.05	-0.02	-0.04	0.00
25	1	0.00	-0.05	-0.06	-0.02	0.07	0.11	-0.03	-0.03	-0.01
26	6	-0.01	0.00	0.06	0.02	0.03	-0.14	-0.01	0.04	-0.01
27	1	-0.04	-0.02	0.08	0.06	0.07	-0.18	0.00	0.05	-0.01
28	1	0.01	0.02	0.08	-0.01	-0.02	-0.18	-0.02	0.04	-0.01
29	6	0.01	0.01	0.03	0.01	-0.04	-0.05	0.02	-0.05	0.00
30	1	0.02	0.03	0.03	0.00	-0.07	-0.05	0.01	-0.01	0.02
31	1	0.02	0.00	0.04	0.00	-0.04	-0.07	0.03	-0.07	-0.01
32	6	-0.01	0.02	-0.02	0.03	-0.08	0.03	-0.08	-0.03	-0.05
33	1	0.00	0.03	-0.01	0.03	-0.09	0.02	-0.11	-0.03	-0.08
34	6	-0.02	0.03	-0.04	0.06	-0.09	0.07	-0.10	-0.02	-0.04
35	1	-0.03	0.05	-0.06	0.07	-0.12	0.10	-0.14	0.00	-0.05
36	6	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
37	1	0.04	-0.01	0.02	-0.05	-0.01	-0.03	0.01	0.01	0.00
38	1	-0.01	-0.01	0.01	0.03	-0.01	-0.04	-0.03	0.01	0.00
39	1	0.01	-0.05	0.01	0.00	0.06	-0.02	-0.01	-0.02	0.01
40	6	-0.01	-0.01	0.03	0.02	0.02	-0.09	-0.02	0.02	0.01
41	1	-0.03	-0.01	0.02	0.04	0.02	-0.08	-0.02	0.01	0.01
42	6	0.02	-0.04	0.02	-0.01	0.09	-0.04	0.03	0.04	0.00
43	1	0.02	-0.05	0.02	-0.02	0.13	-0.05	0.03	0.06	-0.01
44	1	0.02	-0.04	-0.01	-0.01	0.09	0.01	0.04	0.04	0.01
45	1	0.02	-0.04	0.04	-0.01	0.10	-0.07	0.03	0.04	0.00
46	6	0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.04	0.00	0.02	0.06	-0.04
47	1	0.03	0.02	0.00	-0.02	-0.06	0.03	0.02	0.07	-0.05
48	6	0.03	0.03	0.00	-0.01	-0.03	0.01	0.02	0.06	-0.06
49	1	0.03	0.05	0.00	-0.01	-0.06	0.02	0.03	0.09	-0.07
50	1	0.04	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.04	0.04	0.04	-0.08
51	6	0.01	0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.03	0.02	0.04	-0.02
52	1	0.00	0.04	0.02	0.03	-0.04	-0.05	0.03	0.07	0.01
53	6	-0.14	0.04	0.19	-0.15	0.03	0.12	0.10	-0.06	-0.03
54	1	-0.31	0.07	0.37	-0.23	0.04	0.19	0.19	-0.06	-0.05
55	6	-0.05	0.01	0.09	-0.15	0.03	0.12	0.05	-0.11	-0.01
56	1	-0.11	0.01	0.15	-0.23	0.05	0.19	0.09	-0.16	-0.01
57	6	0.20	-0.02	-0.19	0.04	0.00	-0.06	-0.09	-0.04	0.02
58	1	0.37	-0.04	-0.37	0.14	-0.02	-0.16	-0.18	-0.02	0.05
59	8	0.01	-0.01	0.02	-0.04	0.01	-0.06	-0.03	0.02	0.01
60	8	0.01	-0.02	0.01	0.02	0.02	-0.03	0.07	0.03	0.01
61	8	0.01	0.03	0.02	0.00	-0.06	-0.05	0.00	0.08	-0.01
62	6	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.04	0.01	0.10	0.03	0.04
63	6	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.04	0.00	0.04	0.05
64	6	-0.06	0.01	0.01	-0.06	0.07	0.01	-0.08	0.12	0.04
65	8	0.04	-0.03	0.01	-0.03	0.09	0.00	0.18	0.04	0.05
66	1	-0.02	0.02	0.04	-0.10	0.12	-0.04	-0.06	0.17	0.04
67	6	-0.12	0.03	0.00	-0.07	0.06	0.03	-0.21	0.16	0.01
68	1	-0.15	0.03	-0.02	0.00	-0.01	0.11	-0.20	0.09	0.04
69	1	-0.13	0.07	0.04	-0.04	0.12	-0.08	-0.20	0.30	-0.04
70	1	-0.11	0.02	-0.02	-0.20	0.08	0.07	-0.35	0.14	0.01
71	6	-0.09	-0.02	-0.04	0.07	-0.04	0.11	-0.01	-0.03	0.04
72	1	-0.09	-0.02	-0.08	0.10	-0.09	0.17	0.00	-0.04	0.00
73	1	-0.13	-0.03	-0.03	0.15	-0.02	0.08	-0.02	-0.07	0.04
74	1	-0.09	-0.02	-0.05	0.02	-0.06	0.14	-0.04	-0.04	0.09



			7			8			9		
			A			A			A		
Frequencies --			66.8418			75.1357			88.1841		
Red. masses --			4.9960			4.7872			5.0838		
Frc consts --			0.0132			0.0159			0.0233		
IR Inten --			6.9880			0.1689			1.2415		
Raman Activ --			0.5355			2.0750			1.4563		
Depolar (P) --			0.7500			0.7486			0.5401		
Depolar (U) --			0.8571			0.8562			0.7014		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6		0.02	0.02	0.04	-0.03	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01
2	6		0.03	0.01	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.02
3	6		0.01	0.00	0.01	-0.03	0.03	-0.03	0.01	0.00	-0.02
4	6		-0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.03	-0.02	0.02	-0.02	0.03
5	6		-0.02	-0.03	0.01	-0.02	0.01	0.05	0.03	0.03	0.01
6	6		0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.05	0.04	0.03	0.09	-0.02
7	8		0.15	-0.04	0.13	-0.05	0.01	0.00	0.06	-0.03	0.04
8	6		-0.06	0.05	-0.04	-0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.01
9	6		0.00	0.01	0.06	-0.01	0.01	-0.03	0.03	-0.02	0.04
10	1		0.00	-0.01	0.06	-0.01	0.02	-0.03	0.04	-0.03	0.03
11	8		0.00	0.02	0.08	0.00	0.00	-0.04	0.02	-0.01	0.04
12	6		-0.01	0.00	0.05	-0.01	0.03	-0.04	0.04	-0.02	0.06
13	1		-0.03	-0.01	0.06	-0.01	0.03	-0.04	0.04	-0.02	0.06
14	6		-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	0.08	0.03	0.05	0.02
15	8		-0.01	0.03	0.01	0.16	-0.08	-0.10	0.02	-0.07	-0.01
16	6		-0.01	-0.02	-0.13	-0.02	-0.02	0.02	0.01	-0.05	-0.02
17	1		-0.04	0.01	-0.17	-0.01	-0.04	0.03	0.01	-0.06	-0.03
18	1		0.04	-0.07	-0.09	-0.02	0.00	0.01	0.04	-0.07	-0.01
19	1		-0.01	-0.04	-0.20	-0.04	-0.01	0.04	-0.01	-0.06	-0.04
20	6		-0.02	0.03	0.03	-0.02	0.00	-0.02	0.02	-0.01	0.03
21	1		-0.06	0.03	0.07	-0.01	0.00	-0.03	0.01	0.01	0.04
22	6		0.02	0.05	0.05	-0.05	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.03
23	1		0.04	0.08	0.08	-0.06	-0.03	0.01	-0.02	-0.03	0.04
24	1		-0.02	0.06	0.05	-0.03	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.03
25	1		0.03	0.03	0.05	-0.07	0.03	0.01	-0.03	-0.01	0.02
26	6		0.02	0.00	-0.08	-0.03	0.05	-0.07	0.01	0.09	-0.12
27	1		0.06	0.03	-0.11	0.00	0.12	-0.12	0.02	0.16	-0.16
28	1		0.00	-0.05	-0.11	-0.05	-0.02	-0.12	-0.01	0.04	-0.16
29	6		-0.06	0.06	0.03	0.01	-0.02	-0.03	0.02	0.00	0.04
30	1		-0.09	0.11	0.07	0.02	-0.03	-0.04	0.02	0.01	0.04
31	1		-0.06	0.06	0.01	0.01	-0.03	-0.02	0.02	-0.01	0.04
32	6		-0.16	0.11	-0.09	0.00	-0.04	0.01	-0.03	0.02	-0.02
33	1		-0.25	0.16	-0.15	0.02	-0.06	0.02	-0.06	0.04	-0.04
34	6		-0.13	0.09	-0.05	-0.01	-0.03	0.01	-0.03	0.02	-0.01
35	1		-0.19	0.12	-0.08	0.00	-0.04	0.02	-0.05	0.03	-0.03
36	6		-0.04	-0.03	0.03	0.03	0.03	-0.03	0.00	-0.09	0.03
37	1		-0.07	-0.05	0.04	0.03	0.03	-0.02	-0.01	-0.11	0.07
38	1		-0.02	-0.05	0.01	0.06	0.02	-0.02	-0.01	-0.10	-0.01
39	1		-0.04	0.00	0.05	0.04	0.06	-0.06	0.00	-0.09	0.05
40	6		0.03	0.01	-0.05	-0.03	0.05	-0.05	0.00	0.06	-0.11
41	1		0.05	0.02	-0.06	-0.03	0.05	-0.05	0.00	0.10	-0.15
42	6		0.00	0.05	0.00	-0.08	0.15	0.07	0.02	0.16	-0.01

43	1	0.00	0.08	-0.01	-0.10	0.21	0.06	-0.01	0.21	-0.01
44	1	0.00	0.05	0.05	-0.09	0.16	0.16	0.04	0.16	0.05
45	1	0.00	0.07	-0.01	-0.09	0.18	0.03	0.00	0.15	-0.05
46	6	-0.04	-0.06	0.03	-0.04	-0.05	0.13	0.06	0.06	0.00
47	1	-0.05	-0.06	0.05	-0.05	-0.07	0.16	0.08	0.04	0.01
48	6	-0.03	-0.06	0.03	-0.08	-0.06	0.19	0.07	0.10	-0.02
49	1	-0.04	-0.09	0.04	-0.07	-0.15	0.25	0.08	0.13	-0.02
50	1	-0.05	-0.03	0.06	-0.15	0.00	0.25	0.10	0.08	-0.03
51	6	-0.01	-0.04	-0.01	-0.05	-0.02	0.11	0.05	0.09	0.00
52	1	0.00	-0.07	-0.03	-0.02	-0.09	0.07	0.07	0.11	0.02
53	6	-0.06	0.01	0.01	0.07	-0.05	0.02	0.09	0.00	0.05
54	1	-0.09	0.01	0.02	0.05	-0.04	0.05	0.14	0.01	0.08
55	6	-0.06	0.03	0.02	0.17	-0.08	-0.09	0.08	-0.07	0.02
56	1	-0.08	0.05	0.03	0.26	-0.11	-0.17	0.11	-0.12	0.03
57	6	0.02	0.00	-0.01	0.04	-0.05	0.00	-0.01	0.00	-0.02
58	1	0.05	-0.01	-0.02	0.03	-0.04	0.00	-0.05	0.01	-0.05
59	8	-0.01	-0.02	-0.03	-0.06	0.04	-0.04	-0.05	-0.03	-0.10
60	8	0.00	0.01	0.05	0.01	0.03	-0.05	0.00	-0.06	0.07
61	8	-0.03	-0.07	0.00	0.02	-0.09	0.06	0.01	0.05	-0.01
62	6	0.10	-0.04	0.01	0.03	0.02	-0.04	-0.13	-0.05	0.03
63	6	0.05	0.00	-0.05	0.03	0.02	-0.03	-0.09	-0.03	0.00
64	6	0.09	-0.03	-0.02	0.03	0.02	-0.02	-0.05	-0.08	-0.02
65	8	0.20	-0.11	0.02	0.05	0.03	-0.04	-0.25	-0.05	0.01
66	1	0.15	-0.08	0.04	0.03	0.03	-0.02	-0.06	-0.13	0.00
67	6	0.06	-0.01	-0.06	0.03	0.01	0.01	0.01	-0.08	-0.05
68	1	-0.06	0.07	-0.16	0.03	-0.01	0.01	-0.04	0.02	-0.12
69	1	0.01	-0.03	0.09	0.03	0.01	0.00	-0.02	-0.16	0.04
70	1	0.20	-0.05	-0.12	0.02	0.02	0.02	0.15	-0.10	-0.10
71	6	-0.03	0.04	-0.12	0.04	0.00	-0.02	-0.11	0.02	-0.02
72	1	-0.01	0.01	-0.14	0.11	-0.11	0.07	-0.20	0.16	-0.11
73	1	-0.09	0.11	-0.08	0.10	0.15	-0.01	-0.19	-0.14	-0.02
74	1	-0.06	0.04	-0.20	-0.08	-0.03	-0.10	0.05	0.07	0.05

		10	11	12
		A	A	A
Frequencies --		103.0922	112.2049	119.4165
Red. masses --		2.5671	1.4818	1.8529
Frc consts --		0.0161	0.0110	0.0156
IR Inten --		1.4295	1.0462	1.0834
Raman Activ --		1.4600	1.2547	1.1137
Depolar (P) --		0.6914	0.7241	0.7075
Depolar (U) --		0.8175	0.8399	0.8287

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
2	6	-0.01	0.04	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01
3	6	0.01	0.03	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01
4	6	0.00	0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01
5	6	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	0.00
6	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.03	0.00
7	8	0.03	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00
8	6	0.02	0.00	0.02	-0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.03	-0.01
9	6	0.02	0.01	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
10	1	-0.01	0.01	0.05	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00

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

63	6	-0.01	-0.05	-0.03	0.01	-0.03	0.00	0.01	-0.06	-0.01
64	6	-0.02	-0.03	-0.02	0.02	-0.03	0.02	-0.03	-0.02	-0.02
65	8	-0.09	0.01	-0.07	0.06	-0.05	0.01	0.04	-0.07	-0.01
66	1	-0.06	0.02	-0.06	0.02	-0.02	0.01	-0.04	0.02	-0.04
67	6	-0.01	-0.07	0.06	0.00	-0.04	0.03	-0.05	-0.06	0.05
68	1	0.21	-0.27	0.28	0.34	-0.28	0.35	-0.28	0.02	-0.14
69	1	0.09	0.02	-0.24	0.15	0.17	-0.45	-0.15	-0.19	0.37
70	1	-0.34	0.01	0.20	-0.53	0.02	0.17	0.27	-0.05	0.02
71	6	0.04	-0.08	0.02	-0.02	-0.02	-0.02	0.08	-0.11	0.06
72	1	0.15	-0.26	0.17	-0.01	-0.03	-0.04	0.25	-0.37	0.28
73	1	0.16	0.14	0.02	-0.04	0.00	-0.01	0.26	0.20	0.05
74	1	-0.16	-0.14	-0.10	-0.03	-0.03	-0.05	-0.20	-0.20	-0.10

		13			14			15		
		A			A			A		
	Frequencies --	136.9633			146.5819			162.8786		
	Red. masses --	3.5435			1.6605			2.9250		
	Frc consts --	0.0392			0.0210			0.0457		
	IR Inten --	2.2021			0.0825			3.2313		
	Raman Activ --	2.1107			1.0612			1.7361		
	Depolar (P) --	0.7154			0.6620			0.5382		
	Depolar (U) --	0.8341			0.7966			0.6998		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.02	-0.03	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.05	-0.02
2	6	0.06	-0.01	0.01	0.02	-0.02	-0.01	-0.02	0.02	0.00
3	6	-0.02	-0.01	-0.06	-0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.03	0.01
4	6	-0.03	-0.02	-0.04	0.00	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.03
5	6	-0.02	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.01
6	6	-0.07	-0.03	0.05	0.00	-0.02	0.01	0.03	0.03	-0.02
7	8	0.17	-0.06	0.07	0.05	-0.03	0.02	-0.07	0.04	0.01
8	6	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01
9	6	-0.03	0.00	-0.03	-0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.03	-0.06
10	1	-0.06	-0.01	-0.02	-0.02	-0.01	-0.02	0.02	0.01	-0.08
11	8	-0.02	0.02	0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.03	0.03	-0.08
12	6	-0.04	-0.02	-0.05	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.01	0.02
13	1	-0.06	-0.02	-0.05	-0.01	-0.01	0.03	0.04	0.00	0.04
14	6	-0.05	0.00	0.08	0.01	0.01	0.01	0.03	0.03	-0.04
15	8	0.06	0.02	-0.02	0.01	0.00	0.01	-0.04	-0.02	0.00
16	6	-0.03	-0.05	0.04	-0.05	-0.06	0.05	-0.06	-0.12	0.04
17	1	0.00	0.03	0.10	-0.02	0.00	0.10	-0.01	0.01	0.15
18	1	-0.08	-0.14	0.11	-0.09	-0.12	0.10	-0.14	-0.29	0.17
19	1	-0.03	-0.09	-0.07	-0.05	-0.08	-0.03	-0.05	-0.18	-0.15
20	6	-0.01	0.02	-0.04	-0.03	0.00	-0.02	-0.02	0.04	-0.07
21	1	0.00	0.02	-0.05	-0.02	0.00	-0.03	-0.01	0.04	-0.08
22	6	-0.02	0.07	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.05	0.14	-0.01
23	1	-0.03	0.02	0.03	-0.04	-0.04	-0.01	-0.06	-0.08	-0.05
24	1	0.01	0.11	-0.04	0.05	0.05	-0.05	0.28	0.27	-0.18
25	1	-0.03	0.11	0.06	-0.03	0.07	0.04	-0.01	0.31	0.23
26	6	-0.05	-0.03	0.06	-0.01	-0.02	0.02	0.02	0.03	0.01
27	1	-0.12	-0.05	0.11	-0.05	-0.02	0.04	0.01	0.01	0.03
28	1	0.04	-0.03	0.11	0.02	-0.01	0.04	0.02	0.06	0.03
29	6	0.05	0.03	0.04	0.03	-0.01	0.02	0.10	0.00	0.00
30	1	0.12	0.06	0.01	0.08	0.01	-0.01	0.21	0.03	-0.07

31	1	0.07	0.01	0.12	0.05	-0.02	0.07	0.13	-0.05	0.12
32	6	0.01	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01
33	1	-0.01	0.06	-0.03	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.01
34	6	0.02	0.03	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.01
35	1	0.03	0.03	-0.03	0.02	-0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.02
36	6	-0.01	-0.03	-0.05	0.00	-0.04	-0.01	0.01	0.01	0.03
37	1	0.00	-0.03	-0.04	0.00	-0.06	0.01	-0.01	0.00	0.03
38	1	-0.01	-0.03	-0.05	0.01	-0.06	-0.03	0.02	0.00	0.02
39	1	-0.01	-0.04	-0.05	0.00	-0.04	-0.02	0.01	0.02	0.03
40	6	-0.03	-0.01	-0.04	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.03	0.01
41	1	-0.05	0.02	-0.09	-0.02	0.00	-0.04	0.01	0.04	0.00
42	6	-0.10	-0.06	0.03	0.01	-0.04	0.00	0.04	0.00	-0.03
43	1	-0.11	-0.09	0.05	0.02	-0.06	0.00	0.05	-0.03	-0.02
44	1	-0.11	-0.06	0.01	0.01	-0.05	-0.02	0.03	0.00	-0.06
45	1	-0.10	-0.06	0.02	0.01	-0.05	0.02	0.04	0.00	-0.01
46	6	0.03	0.07	-0.06	0.02	0.00	-0.01	-0.02	-0.04	0.05
47	1	0.07	0.10	-0.13	0.04	0.00	-0.01	-0.04	-0.06	0.11
48	6	0.00	0.05	-0.02	0.04	0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.02
49	1	0.04	0.10	0.00	0.04	0.06	-0.04	-0.02	-0.04	0.01
50	1	-0.01	0.00	-0.07	0.07	0.00	-0.04	0.03	0.02	0.06
51	6	-0.05	0.01	0.08	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02	-0.04
52	1	-0.05	0.05	0.12	0.00	0.03	0.02	0.01	0.00	-0.06
53	6	-0.01	0.01	0.03	0.02	0.00	0.01	0.03	0.01	-0.01
54	1	-0.03	0.00	0.02	0.02	0.00	0.02	0.05	0.01	0.01
55	6	0.06	0.02	-0.03	0.02	0.00	0.01	-0.02	-0.02	0.02
56	1	0.10	0.02	-0.09	0.02	-0.01	0.01	-0.04	-0.04	0.06
57	6	0.00	0.01	0.05	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.04
58	1	0.00	0.01	0.07	0.00	0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.06
59	8	0.01	-0.04	-0.07	0.01	-0.03	-0.04	0.03	0.02	0.00
60	8	-0.03	-0.02	-0.06	-0.04	0.04	0.03	-0.09	0.02	0.07
61	8	0.01	0.12	0.03	0.00	0.01	0.01	-0.02	-0.07	-0.02
62	6	0.01	-0.01	-0.03	-0.02	0.03	0.01	-0.01	-0.03	0.02
63	6	0.00	-0.03	0.00	0.01	0.04	-0.01	-0.04	-0.02	0.00
64	6	-0.04	0.01	-0.01	0.04	0.02	0.01	-0.04	-0.02	-0.01
65	8	0.07	0.01	-0.02	-0.03	0.01	0.01	0.07	-0.09	0.03
66	1	-0.08	0.04	-0.04	0.07	0.01	0.03	-0.07	-0.01	-0.03
67	6	-0.01	-0.02	0.03	-0.01	0.03	0.01	0.01	-0.04	0.02
68	1	-0.05	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.04	-0.05	0.04
69	1	-0.03	-0.09	0.11	-0.01	0.08	0.00	0.02	-0.10	0.00
70	1	0.09	0.00	0.04	-0.05	0.03	0.01	0.03	-0.02	0.05
71	6	0.05	-0.09	0.05	-0.01	0.10	-0.03	0.00	-0.04	0.03
72	1	-0.09	0.13	-0.10	0.21	-0.25	0.22	-0.07	0.06	-0.03
73	1	0.00	-0.42	0.00	0.12	0.59	0.02	-0.02	-0.21	0.00
74	1	0.28	-0.02	0.31	-0.38	-0.01	-0.38	0.11	-0.01	0.16

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	170.3036	187.0113	191.0563
Red. masses --	4.1750	3.0220	2.0408
Frc consts --	0.0713	0.0623	0.0439
IR Inten --	0.7375	2.2468	0.8255
Raman Activ --	2.1817	2.1210	0.6412
Depolar (P) --	0.4723	0.3860	0.7003

Depolar (U) --				0.6416		0.5570			0.8237		
Atom		AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	-0.03	0.03	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.01	0.00	
2	6	-0.02	0.00	0.00	0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.03	
3	6	-0.02	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	
4	6	0.00	-0.02	-0.04	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	
5	6	0.03	-0.06	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.01	
6	6	0.05	0.00	-0.04	-0.03	0.04	0.01	-0.01	-0.01	0.00	
7	8	0.05	-0.03	0.01	0.08	-0.03	0.01	-0.08	0.03	0.02	
8	6	-0.06	0.02	0.05	0.03	0.00	-0.02	-0.02	0.02	-0.01	
9	6	-0.07	0.03	0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.04	
10	1	-0.09	0.07	0.02	0.01	-0.04	-0.01	-0.04	-0.04	0.05	
11	8	-0.09	0.02	0.00	0.03	-0.01	0.01	0.06	-0.01	0.10	
12	6	-0.07	0.01	-0.06	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	
13	1	-0.12	0.01	-0.06	0.02	0.00	-0.02	-0.05	0.00	-0.03	
14	6	0.08	0.06	-0.01	-0.02	0.11	-0.03	0.00	0.03	0.01	
15	8	0.00	-0.03	0.04	-0.08	-0.05	-0.06	-0.01	-0.01	0.00	
16	6	-0.10	0.03	0.12	0.06	0.01	-0.05	0.00	0.02	-0.04	
17	1	-0.07	0.06	0.18	0.04	0.12	-0.05	-0.02	-0.22	-0.14	
18	1	-0.18	0.01	0.13	0.03	-0.07	0.01	0.14	0.21	-0.18	
19	1	-0.10	0.03	0.10	0.14	-0.02	-0.15	-0.12	0.09	0.18	
20	6	-0.05	0.00	0.04	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.00	
21	1	-0.06	-0.03	0.04	0.04	0.00	-0.03	-0.02	0.03	0.01	
22	6	-0.07	-0.09	0.02	-0.02	0.00	-0.02	0.04	0.09	0.03	
23	1	-0.04	-0.05	0.04	0.12	0.27	0.05	-0.13	-0.25	-0.04	
24	1	-0.13	-0.14	0.08	-0.29	-0.08	0.13	0.38	0.24	-0.20	
25	1	-0.08	-0.12	-0.07	0.09	-0.19	-0.23	-0.08	0.34	0.35	
26	6	-0.01	-0.01	-0.04	-0.05	0.03	0.13	-0.02	-0.01	0.03	
27	1	0.02	0.02	-0.08	-0.14	-0.05	0.22	-0.06	-0.03	0.06	
28	1	-0.07	-0.01	-0.07	0.04	0.13	0.22	0.02	0.02	0.06	
29	6	-0.06	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.03	0.03	
30	1	-0.05	-0.02	0.01	0.02	0.01	0.01	-0.07	0.07	0.08	
31	1	-0.06	0.01	0.03	0.02	0.01	0.00	-0.02	0.03	0.00	
32	6	-0.05	0.05	0.03	0.04	0.00	-0.02	-0.03	0.01	0.00	
33	1	-0.06	0.08	0.03	0.05	-0.01	-0.01	-0.05	0.00	-0.01	
34	6	-0.08	0.07	-0.03	0.06	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.04	
35	1	-0.11	0.11	-0.06	0.08	-0.03	0.00	0.02	-0.04	0.06	
36	6	0.05	0.03	-0.05	-0.03	0.03	0.01	0.00	-0.05	-0.03	
37	1	0.05	0.03	-0.06	-0.11	-0.01	0.01	0.09	-0.02	-0.02	
38	1	0.09	0.03	-0.01	0.04	-0.02	-0.01	-0.09	-0.01	-0.03	
39	1	0.06	0.06	-0.07	-0.02	0.12	0.02	-0.01	-0.16	-0.03	
40	6	-0.02	-0.05	0.02	-0.04	0.02	0.02	-0.02	-0.01	-0.02	
41	1	-0.02	-0.09	0.07	-0.08	0.04	-0.02	-0.03	0.01	-0.04	
42	6	0.08	-0.04	-0.05	-0.01	-0.07	-0.02	0.00	-0.05	-0.02	
43	1	0.06	-0.03	-0.04	-0.01	-0.12	0.00	-0.01	-0.07	-0.01	
44	1	0.14	-0.04	-0.07	-0.01	-0.07	-0.11	0.02	-0.05	-0.05	
45	1	0.07	-0.10	-0.04	-0.01	-0.09	0.01	-0.01	-0.08	-0.01	
46	6	0.08	-0.08	0.05	-0.03	-0.05	0.10	0.02	-0.03	0.02	
47	1	0.11	-0.13	0.10	-0.04	-0.10	0.18	0.03	-0.05	0.04	
48	6	0.13	0.03	0.00	-0.02	0.04	0.09	0.03	0.01	0.01	
49	1	0.11	0.08	-0.04	-0.02	0.00	0.10	0.03	0.02	0.01	
50	1	0.22	0.03	0.02	0.02	0.09	0.16	0.05	0.01	0.02	

51	6	0.08	0.06	-0.03	-0.03	0.10	-0.01	0.00	0.02	0.00
52	1	0.07	0.07	-0.03	-0.07	0.07	-0.05	-0.01	0.02	0.00
53	6	0.11	0.02	0.06	0.04	0.05	0.02	0.02	0.01	0.02
54	1	0.16	0.04	0.09	0.10	0.07	0.08	0.04	0.02	0.03
55	6	0.05	-0.03	0.08	0.00	-0.05	0.01	0.02	-0.01	0.01
56	1	0.03	-0.08	0.13	0.03	-0.13	0.03	0.02	-0.03	0.02
57	6	0.03	0.03	-0.01	-0.09	0.06	-0.08	-0.01	0.01	-0.01
58	1	-0.01	0.04	-0.05	-0.15	0.07	-0.14	-0.03	0.02	-0.02
59	8	-0.06	0.01	0.05	0.03	-0.02	-0.02	0.00	-0.03	-0.04
60	8	-0.02	0.02	-0.09	0.02	-0.02	-0.02	0.05	-0.02	-0.06
61	8	0.02	-0.12	-0.03	-0.04	-0.10	-0.02	0.00	-0.05	-0.01
62	6	0.00	0.04	-0.06	0.01	0.00	0.02	0.01	0.01	-0.02
63	6	-0.01	0.03	-0.04	0.02	-0.01	0.03	0.02	0.00	0.00
64	6	-0.03	0.05	-0.03	0.04	-0.03	0.03	0.02	0.00	0.01
65	8	0.04	0.05	-0.06	-0.01	0.04	0.01	-0.03	0.06	-0.03
66	1	-0.05	0.08	-0.06	0.05	-0.06	0.06	0.03	0.00	0.02
67	6	0.03	0.00	0.03	0.00	0.02	-0.05	0.00	0.02	-0.02
68	1	0.05	-0.02	0.05	-0.01	0.06	-0.07	-0.01	0.03	-0.03
69	1	0.03	-0.07	0.03	0.00	0.08	-0.05	-0.01	0.05	-0.01
70	1	0.06	0.05	0.08	-0.03	-0.04	-0.11	-0.01	0.00	-0.04
71	6	0.02	-0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02
72	1	-0.07	0.12	-0.10	-0.04	0.03	-0.04	-0.01	0.01	-0.05
73	1	-0.01	-0.23	-0.04	-0.07	-0.02	0.01	-0.03	-0.03	-0.01
74	1	0.16	0.02	0.16	0.01	0.02	0.00	0.02	0.00	-0.01

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies --		198.9215			202.8828			206.2005		
Red. masses --		3.4742			2.5551			1.8592		
Frc consts --		0.0810			0.0620			0.0466		
IR Inten --		4.2814			3.5400			0.2739		
Raman Activ --		1.4040			1.6707			1.9619		
Depolar (P) --		0.3747			0.5041			0.5243		
Depolar (U) --		0.5452			0.6703			0.6879		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.01	0.02	0.00	-0.03	-0.04	0.00	-0.01	-0.01
2	6	-0.02	0.04	0.00	0.03	-0.03	-0.05	0.02	-0.04	0.00
3	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.02	0.02
4	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.01	0.00	0.00
5	6	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.03	0.04	0.00	-0.01	0.00
6	6	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.03	0.02	0.01	0.00	0.00
7	8	-0.01	0.03	0.00	0.16	-0.09	-0.02	-0.02	-0.01	-0.03
8	6	0.01	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.01	-0.05	0.02	-0.03
9	6	-0.01	0.03	-0.02	-0.01	-0.03	-0.01	-0.03	-0.04	0.01
10	1	0.04	0.09	-0.03	-0.01	-0.06	-0.02	-0.06	-0.10	0.02
11	8	-0.10	0.04	-0.10	0.00	-0.02	0.01	0.02	-0.03	0.09
12	6	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
13	1	-0.04	0.00	-0.04	0.03	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.03
14	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.02	-0.05	0.01	0.00	0.01
15	8	0.01	0.00	0.00	-0.05	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.01
16	6	-0.02	0.00	0.06	-0.06	0.03	0.06	-0.06	0.00	-0.02
17	1	0.00	0.09	0.13	-0.03	-0.15	0.06	-0.05	0.45	0.14
18	1	-0.10	-0.09	0.13	-0.04	0.18	-0.05	-0.29	-0.35	0.25

19	1	0.01	-0.03	-0.03	-0.16	0.08	0.24	0.16	-0.13	-0.43
20	6	0.00	0.01	0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.01	-0.03
21	1	0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.02	-0.03	-0.06	-0.01	-0.02
22	6	0.01	0.03	0.02	0.05	-0.06	-0.08	0.07	0.06	-0.03
23	1	-0.02	-0.03	0.01	-0.13	-0.37	-0.20	0.10	0.14	-0.04
24	1	0.07	0.06	-0.02	0.39	0.01	-0.24	0.02	0.08	-0.03
25	1	-0.01	0.07	0.08	-0.08	0.15	0.15	0.14	0.01	-0.01
26	6	0.01	0.00	-0.03	0.01	0.03	0.01	0.01	0.00	-0.04
27	1	0.04	0.01	-0.05	0.04	0.04	-0.01	0.06	0.03	-0.08
28	1	-0.01	-0.02	-0.05	-0.04	0.02	-0.02	-0.05	-0.03	-0.08
29	6	0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.01	-0.01	-0.06	0.03	0.02
30	1	0.08	-0.04	-0.08	-0.03	0.00	0.00	-0.12	0.06	0.07
31	1	0.01	0.00	0.03	-0.02	-0.01	-0.02	-0.07	0.04	-0.02
32	6	-0.01	0.02	0.01	0.03	0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.02
33	1	-0.02	0.03	0.00	0.05	0.02	0.01	-0.01	0.02	-0.03
34	6	-0.06	0.06	-0.02	0.02	0.01	-0.06	0.09	-0.06	0.04
35	1	-0.11	0.09	-0.05	0.04	0.02	-0.06	0.15	-0.10	0.07
36	6	0.01	0.02	0.00	0.03	0.00	0.01	-0.02	0.03	0.01
37	1	0.01	0.02	-0.01	0.23	0.10	-0.02	0.00	0.05	-0.02
38	1	0.02	0.02	0.02	-0.14	0.12	0.06	-0.05	0.05	0.02
39	1	0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.23	-0.03	-0.02	0.00	0.02
40	6	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.06	0.01	-0.02	0.03
41	1	0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.04	0.10	0.01	-0.04	0.06
42	6	-0.02	0.01	-0.01	0.03	0.07	0.05	0.01	0.05	0.01
43	1	-0.05	0.04	0.00	0.04	0.11	0.02	-0.01	0.10	0.00
44	1	0.01	0.01	0.00	0.05	0.07	0.09	0.03	0.06	0.06
45	1	-0.03	-0.01	-0.05	0.03	0.07	0.05	0.00	0.04	-0.01
46	6	0.01	0.00	-0.01	-0.04	0.02	0.03	0.00	0.00	-0.01
47	1	0.01	0.00	-0.02	-0.06	0.03	0.03	0.01	0.00	-0.01
48	6	0.01	0.00	-0.02	-0.05	0.00	0.03	0.01	0.01	-0.01
49	1	0.01	0.02	-0.02	-0.06	-0.06	0.05	0.01	0.02	-0.02
50	1	0.02	-0.01	-0.03	-0.08	0.03	0.07	0.02	0.00	-0.02
51	6	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00
52	1	0.01	0.00	0.01	-0.04	-0.01	-0.05	0.01	0.01	0.01
53	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.01
54	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.01
55	6	0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01
56	1	0.01	0.01	-0.01	-0.05	-0.02	0.01	0.01	0.01	0.01
57	6	0.01	0.00	0.01	-0.03	0.01	-0.05	0.01	0.00	0.01
58	1	0.01	0.00	0.01	-0.04	0.01	-0.07	0.01	0.00	0.01
59	8	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.04	0.08	-0.01	0.01	0.05
60	8	0.02	-0.07	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.03
61	8	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.03	0.04	-0.01	0.01	0.00
62	6	0.06	-0.06	0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01
63	6	0.16	-0.11	0.11	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
64	6	0.17	-0.11	0.14	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
65	8	-0.08	0.05	0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.02
66	1	0.27	-0.16	0.23	0.02	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00
67	6	-0.11	0.06	-0.10	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
68	1	-0.23	0.13	-0.21	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.01
69	1	-0.14	0.37	-0.03	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.02	0.00
70	1	-0.23	-0.14	-0.30	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.02



71	6	0.02	-0.07	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.01
72	1	0.02	-0.05	-0.11	0.00	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.02
73	1	-0.10	-0.08	0.05	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
74	1	0.04	-0.06	-0.05	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01
		22			23			24		
		A			A			A		
Frequencies --		212.9780			229.9752			232.0079		
Red. masses --		3.7957			3.9872			2.5064		
Frc consts --		0.1014			0.1242			0.0795		
IR Inten --		1.5781			7.8008			0.7597		
Raman Activ --		0.9869			1.6674			1.8205		
Depolar (P) --		0.3748			0.2813			0.4625		
Depolar (U) --		0.5452			0.4391			0.6325		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	-0.02	0.00	-0.03	0.03	-0.02	0.04	-0.02	0.05
2	6	0.02	-0.01	-0.01	-0.04	0.01	0.00	-0.04	0.02	0.03
3	6	0.02	0.00	0.02	-0.02	0.02	-0.04	0.03	-0.03	0.02
4	6	0.01	0.01	-0.03	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.01
5	6	0.01	0.00	-0.08	0.01	0.03	0.06	0.00	-0.01	0.00
6	6	-0.02	0.01	-0.06	0.04	0.01	0.05	-0.03	0.00	0.00
7	8	0.03	-0.01	-0.03	-0.02	0.01	0.05	-0.03	0.02	0.06
8	6	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.04	-0.02	0.05
9	6	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.02	0.02	0.02
10	1	-0.04	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.03	0.10	0.03
11	8	0.02	-0.01	0.02	0.05	-0.01	0.02	-0.03	0.00	-0.05
12	6	-0.02	-0.01	-0.04	0.01	0.00	-0.04	0.00	-0.01	-0.01
13	1	-0.02	0.01	-0.05	-0.03	0.04	-0.08	-0.03	-0.02	-0.01
14	6	-0.04	0.02	0.07	0.07	-0.04	-0.08	-0.05	0.04	0.00
15	8	0.04	0.00	-0.01	-0.03	0.01	0.03	-0.03	-0.01	-0.05
16	6	0.02	-0.01	-0.02	-0.06	0.05	0.07	0.07	0.04	0.03
17	1	0.01	-0.11	-0.06	-0.03	0.17	0.16	0.05	0.39	0.12
18	1	0.08	0.06	-0.07	-0.19	0.00	0.12	-0.10	-0.17	0.20
19	1	-0.04	0.02	0.07	0.00	0.03	0.01	0.29	-0.03	-0.22
20	6	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.02	-0.02	0.05	-0.02	0.07
21	1	0.01	-0.03	-0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.05	-0.03	0.06
22	6	0.03	-0.02	0.00	-0.05	0.03	-0.01	0.15	-0.05	-0.03
23	1	-0.02	-0.11	-0.03	-0.02	0.08	0.01	0.08	-0.09	-0.17
24	1	0.12	0.01	-0.05	-0.11	0.00	0.03	0.30	-0.04	-0.08
25	1	-0.01	0.05	0.07	-0.03	-0.01	-0.07	0.17	-0.02	0.06
26	6	0.01	0.00	-0.05	0.00	0.02	0.04	0.01	0.00	0.01
27	1	0.09	-0.01	-0.09	-0.09	0.02	0.09	0.00	-0.02	0.02
28	1	-0.06	-0.01	-0.09	0.08	0.03	0.09	0.03	0.00	0.02
29	6	0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.01	-0.03	-0.03	-0.04	-0.02
30	1	0.01	0.02	0.02	-0.09	-0.02	0.01	-0.05	-0.12	-0.03
31	1	0.01	0.00	0.01	-0.04	-0.01	-0.10	-0.05	0.00	-0.07
32	6	0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.04
33	1	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.05	0.02	-0.01	-0.04	0.04
34	6	0.01	0.01	-0.01	-0.06	0.01	-0.01	-0.11	0.05	-0.01
35	1	0.01	0.01	-0.02	-0.07	0.01	-0.01	-0.18	0.10	-0.06
36	6	-0.02	0.07	-0.02	0.07	0.01	-0.02	0.02	-0.09	-0.02
37	1	0.05	0.13	-0.08	0.05	-0.02	0.01	0.21	-0.02	0.00
38	1	-0.08	0.14	0.03	0.11	-0.02	-0.02	-0.13	0.00	-0.01

39	1	-0.02	0.00	-0.02	0.07	0.05	-0.05	0.01	-0.30	-0.05
40	6	0.01	-0.01	0.06	-0.01	0.03	-0.08	0.02	-0.01	-0.01
41	1	0.03	-0.08	0.14	-0.02	0.10	-0.15	0.00	0.01	-0.03
42	6	-0.13	0.00	-0.10	0.13	-0.01	0.07	-0.06	0.02	0.00
43	1	-0.18	-0.02	-0.04	0.16	0.00	0.03	-0.06	0.02	0.01
44	1	-0.16	0.00	-0.11	0.16	-0.01	0.06	-0.08	0.02	0.02
45	1	-0.15	0.01	-0.18	0.13	-0.05	0.13	-0.06	0.05	-0.02
46	6	0.04	-0.01	-0.04	-0.03	0.04	0.02	0.01	0.00	0.00
47	1	0.06	-0.04	-0.02	-0.06	0.08	-0.01	0.02	-0.01	0.00
48	6	0.04	0.02	-0.01	-0.05	-0.03	0.02	0.00	0.02	0.01
49	1	0.06	0.05	0.00	-0.06	-0.11	0.03	0.02	0.03	0.03
50	1	0.05	0.00	-0.03	-0.11	0.00	0.05	0.00	0.02	0.01
51	6	0.00	0.01	0.02	0.03	-0.03	-0.03	-0.04	0.02	0.01
52	1	0.04	0.02	0.05	0.00	-0.05	-0.06	-0.05	0.03	0.01
53	6	-0.01	0.01	0.05	0.02	-0.02	-0.06	-0.03	0.02	0.00
54	1	-0.01	0.01	0.06	0.02	-0.03	-0.08	-0.02	0.03	0.02
55	6	0.05	0.00	-0.01	-0.05	0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.03
56	1	0.10	-0.01	-0.05	-0.11	0.04	0.07	0.02	-0.03	-0.05
57	6	-0.01	0.01	0.04	0.05	-0.03	-0.04	-0.06	0.02	-0.03
58	1	-0.02	0.01	0.04	0.06	-0.03	-0.03	-0.08	0.03	-0.04
59	8	-0.02	0.08	0.10	0.02	-0.05	-0.11	0.03	-0.05	-0.02
60	8	-0.06	-0.04	-0.02	0.07	-0.06	-0.09	0.03	-0.01	-0.02
61	8	0.02	-0.03	-0.08	0.02	0.07	0.07	0.00	0.00	0.00
62	6	-0.05	-0.01	0.07	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.02	-0.01
63	6	-0.11	-0.02	0.10	-0.10	-0.03	0.08	-0.03	0.03	-0.02
64	6	-0.07	-0.10	0.04	-0.07	-0.09	0.02	-0.03	0.03	-0.03
65	8	0.13	0.04	0.09	0.09	0.10	0.03	0.03	0.03	-0.01
66	1	-0.12	-0.21	0.04	-0.12	-0.18	0.01	-0.05	0.04	-0.04
67	6	0.06	-0.06	-0.12	0.07	-0.06	-0.12	0.03	0.00	0.01
68	1	0.14	0.09	-0.10	0.14	0.08	-0.10	0.06	0.00	0.04
69	1	0.09	-0.10	-0.21	0.10	-0.11	-0.20	0.04	-0.07	0.00
70	1	0.07	-0.14	-0.21	0.08	-0.13	-0.20	0.06	0.04	0.05
71	6	-0.09	0.06	0.12	-0.09	-0.02	0.09	-0.01	0.04	0.00
72	1	-0.03	-0.04	0.26	-0.03	-0.11	0.17	0.00	0.03	0.03
73	1	-0.02	0.26	0.13	-0.04	0.13	0.10	0.02	0.06	0.00
74	1	-0.18	0.03	-0.04	-0.18	-0.04	-0.01	-0.02	0.03	-0.01

		25			26			27		
		A			A			A		
Frequencies --		235.6898			256.7864			263.3138		
Red. masses --		3.6162			2.7698			2.8395		
Frc consts --		0.1184			0.1076			0.1160		
IR Inten --		5.8949			1.9681			5.1169		
Raman Activ --		1.6940			2.3888			2.3934		
Depolar (P) --		0.1916			0.7500			0.6778		
Depolar (U) --		0.3216			0.8571			0.8080		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.02	-0.03	-0.02	0.01	-0.03	-0.05	0.06	-0.06
2	6	-0.05	0.01	-0.01	-0.04	0.02	-0.05	-0.06	0.01	0.02
3	6	0.01	0.04	-0.02	-0.01	0.00	0.02	-0.03	0.03	-0.02
4	6	0.03	0.04	-0.01	-0.02	-0.01	0.03	-0.02	0.00	-0.01
5	6	0.04	0.07	-0.09	-0.03	-0.05	0.04	-0.01	-0.02	0.02
6	6	0.02	0.03	-0.07	-0.02	-0.03	0.03	0.00	-0.01	0.01

7	8	0.01	-0.02	0.06	0.04	-0.02	-0.03	-0.02	-0.01	0.17
8	6	-0.03	-0.01	-0.01	0.04	-0.05	0.01	0.01	0.01	0.00
9	6	0.04	-0.02	0.01	0.01	-0.04	-0.02	-0.03	0.02	-0.02
10	1	0.02	-0.09	0.01	0.00	-0.08	-0.02	-0.06	-0.03	0.00
11	8	0.13	-0.04	0.06	0.08	-0.06	0.00	0.04	0.02	0.04
12	6	0.06	0.02	0.04	0.01	-0.01	0.00	-0.04	0.02	-0.02
13	1	0.09	0.01	0.05	0.04	-0.01	0.00	-0.04	0.01	-0.01
14	6	-0.01	-0.02	0.04	-0.02	-0.01	0.03	0.02	-0.02	0.00
15	8	0.04	0.00	0.02	0.02	0.01	0.00	0.01	0.01	0.02
16	6	-0.11	0.10	0.13	0.03	0.07	0.06	0.05	0.03	-0.03
17	1	-0.05	0.22	0.26	0.03	0.05	0.06	0.01	-0.03	-0.11
18	1	-0.30	0.07	0.16	-0.01	0.17	-0.01	0.12	0.11	-0.10
19	1	-0.03	0.10	0.12	0.08	0.12	0.18	0.07	0.06	0.06
20	6	-0.03	0.01	-0.03	0.00	-0.02	-0.04	-0.02	0.05	-0.05
21	1	-0.04	0.04	-0.01	0.04	0.00	-0.06	0.02	0.08	-0.07
22	6	-0.01	0.00	-0.06	0.02	0.14	0.00	0.05	-0.03	-0.19
23	1	0.00	0.03	-0.08	0.05	0.19	0.02	0.10	0.19	-0.30
24	1	-0.02	-0.03	-0.03	-0.02	0.23	-0.06	-0.05	-0.17	-0.04
25	1	0.01	-0.03	-0.10	0.09	0.13	0.08	0.18	-0.21	-0.37
26	6	0.02	0.04	0.05	-0.01	-0.03	-0.02	-0.02	-0.01	-0.03
27	1	-0.05	-0.04	0.13	0.03	0.00	-0.06	0.03	0.03	-0.08
28	1	0.09	0.13	0.13	-0.05	-0.07	-0.06	-0.07	-0.04	-0.08
29	6	-0.05	-0.03	-0.04	0.02	-0.06	-0.03	0.09	0.04	0.05
30	1	-0.18	-0.04	0.05	-0.03	-0.09	0.00	0.17	0.12	0.02
31	1	-0.07	-0.03	-0.18	0.00	-0.05	-0.09	0.13	-0.01	0.16
32	6	-0.01	-0.05	0.02	0.04	-0.05	0.01	0.00	-0.05	0.04
33	1	0.03	-0.09	0.04	0.10	-0.08	0.04	0.05	-0.13	0.07
34	6	-0.09	0.01	-0.04	-0.10	0.06	-0.09	-0.03	-0.04	0.04
35	1	-0.11	0.02	-0.05	-0.17	0.10	-0.13	0.03	-0.08	0.07
36	6	-0.05	0.00	0.01	-0.06	0.06	0.05	0.03	-0.04	-0.03
37	1	-0.04	0.01	0.01	-0.31	-0.02	0.04	0.24	0.04	-0.03
38	1	-0.10	0.02	-0.02	0.11	-0.05	0.02	-0.14	0.07	0.01
39	1	-0.05	-0.04	0.04	-0.05	0.32	0.12	0.01	-0.27	-0.07
40	6	0.01	0.05	-0.02	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.01
41	1	0.00	0.07	-0.04	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.02	0.04
42	6	-0.07	-0.07	-0.14	0.00	0.04	0.06	0.02	0.02	0.02
43	1	-0.05	-0.21	-0.08	0.00	0.11	0.03	0.00	0.05	0.01
44	1	-0.16	-0.08	-0.26	0.03	0.05	0.13	0.05	0.02	0.05
45	1	-0.05	-0.02	-0.14	0.00	0.04	0.05	0.01	-0.01	0.01
46	6	0.01	0.01	-0.03	-0.02	-0.05	0.03	-0.01	-0.02	0.02
47	1	-0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.07	0.06	-0.01	-0.04	0.03
48	6	-0.04	-0.04	0.06	0.07	0.05	-0.10	0.03	0.01	-0.06
49	1	-0.02	-0.15	0.13	0.02	0.24	-0.23	0.00	0.10	-0.13
50	1	-0.16	0.02	0.10	0.26	-0.06	-0.19	0.14	-0.04	-0.10
51	6	0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.01
52	1	0.07	-0.07	-0.02	-0.02	0.08	0.07	0.01	0.03	0.02
53	6	0.00	-0.01	0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01
54	1	-0.02	-0.02	0.02	-0.03	-0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.02
55	6	0.03	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01
56	1	0.04	0.02	-0.02	0.03	0.01	-0.03	-0.01	0.02	0.02
57	6	0.02	-0.01	0.05	0.00	-0.01	0.03	0.03	-0.01	0.01
58	1	0.03	-0.02	0.06	0.01	-0.01	0.04	0.04	-0.02	0.02

59	8	0.04	0.02	-0.03	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.05	0.02
60	8	0.00	0.02	0.07	0.03	0.00	0.00	-0.07	0.02	0.00
61	8	0.05	-0.02	-0.10	-0.08	-0.06	0.01	-0.03	-0.03	0.01
62	6	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01
63	6	0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.01
64	6	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.03	0.02
65	8	-0.04	-0.07	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.04	0.03	0.01	-0.02	0.02	-0.02	0.04	-0.04	0.04
67	6	-0.03	0.01	0.03	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01
68	1	-0.06	-0.03	0.01	0.02	0.00	0.01	-0.04	0.01	-0.03
69	1	-0.04	0.04	0.05	0.02	-0.02	-0.01	-0.02	0.06	0.00
70	1	-0.04	0.02	0.04	0.02	0.01	0.01	-0.04	-0.04	-0.05
71	6	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.00
72	1	0.01	0.01	-0.05	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.02
73	1	0.00	-0.06	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.05	0.00
74	1	0.05	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.02

		28		29		30
		A		A		A
Frequencies --		264.5908		273.0244		283.3902
Red. masses --		3.3789		3.0364		2.6892
Frc consts --		0.1394		0.1334		0.1272
IR Inten --		4.0022		0.9783		0.5734
Raman Activ --		1.0531		2.1179		0.7349
Depolar (P) --		0.6851		0.7367		0.7491
Depolar (U) --		0.8131		0.8484		0.8565

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

27	1	0.05	-0.01	-0.12	-0.02	0.05	-0.10	-0.06	0.00	0.04
28	1	-0.11	-0.13	-0.12	-0.15	-0.03	-0.10	-0.03	0.02	0.04
29	6	0.01	0.02	-0.02	0.01	-0.03	0.00	-0.03	0.01	-0.07
30	1	-0.04	0.04	0.02	0.00	-0.07	-0.01	-0.08	-0.04	-0.04
31	1	0.01	0.00	-0.07	-0.01	0.00	-0.02	-0.04	0.02	-0.15
32	6	-0.01	0.00	-0.01	0.05	-0.01	0.02	0.03	0.02	-0.02
33	1	-0.01	0.00	-0.02	0.09	-0.04	0.05	0.03	0.01	-0.02
34	6	-0.01	0.00	0.00	-0.04	0.05	-0.03	0.06	0.00	0.01
35	1	-0.01	-0.01	0.01	-0.07	0.07	-0.05	0.08	-0.04	0.05
36	6	0.18	-0.06	-0.07	-0.05	-0.09	-0.04	0.00	-0.08	0.00
37	1	-0.05	-0.22	0.05	0.03	-0.08	-0.02	0.21	-0.01	0.01
38	1	0.49	-0.25	-0.12	-0.14	-0.06	-0.08	-0.20	0.02	0.00
39	1	0.21	0.26	-0.15	-0.06	-0.20	-0.03	-0.02	-0.33	-0.01
40	6	-0.03	-0.05	0.04	-0.09	-0.06	0.04	-0.04	0.03	0.01
41	1	-0.02	-0.12	0.13	-0.08	-0.13	0.12	-0.03	0.00	0.03
42	6	-0.03	-0.01	0.04	0.08	-0.06	-0.02	0.03	-0.04	0.01
43	1	-0.08	0.09	0.04	0.05	0.01	-0.03	0.05	-0.05	-0.01
44	1	0.07	0.00	0.11	0.22	-0.05	-0.05	0.06	-0.04	-0.03
45	1	-0.06	-0.08	0.00	0.06	-0.20	0.01	0.03	-0.07	0.05
46	6	0.08	-0.02	-0.03	0.00	0.03	-0.03	-0.04	-0.04	0.04
47	1	0.13	0.01	-0.11	0.02	0.05	-0.07	-0.06	-0.07	0.11
48	6	0.05	-0.01	0.02	-0.07	-0.04	0.08	0.04	0.03	-0.08
49	1	0.09	0.01	0.06	-0.04	-0.22	0.19	-0.01	0.20	-0.21
50	1	0.04	-0.01	0.02	-0.24	0.05	0.16	0.22	-0.05	-0.15
51	6	-0.04	0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01
52	1	-0.08	0.02	0.00	0.02	-0.06	-0.05	0.02	0.05	0.07
53	6	-0.06	0.03	-0.03	0.06	0.00	0.01	-0.05	-0.03	0.00
54	1	-0.05	0.03	-0.01	0.08	0.01	0.02	-0.08	-0.04	-0.02
55	6	-0.04	-0.01	-0.07	0.02	0.00	0.05	0.00	0.01	-0.03
56	1	-0.01	-0.04	-0.08	-0.01	0.00	0.09	0.03	0.04	-0.07
57	6	-0.10	0.02	-0.06	0.05	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.05
58	1	-0.12	0.03	-0.08	0.04	0.01	-0.01	0.02	-0.04	0.09
59	8	-0.04	0.08	0.07	-0.11	0.07	0.06	-0.05	0.08	0.01
60	8	0.00	0.01	0.05	-0.01	0.00	0.02	0.09	0.00	0.03
61	8	0.11	0.01	0.05	0.03	0.05	0.00	-0.05	-0.07	-0.02
62	6	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.03	0.01	0.01
63	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01
64	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.01
65	8	-0.02	-0.05	0.02	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.01	0.00
66	1	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.02
67	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.05	0.01	-0.02
68	1	-0.02	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.08	0.04	0.00
69	1	-0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.06	-0.04	-0.06
70	1	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.06	0.01	-0.02
71	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.04	-0.06	-0.01
72	1	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.02	0.00	-0.11	-0.04
73	1	0.01	0.01	0.01	0.01	0.03	0.00	-0.05	-0.06	0.00
74	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.10	-0.08	0.01

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	290.8136	299.8353	304.4651
Red. masses --	2.6560	1.5521	2.0034

Frc consts	--	0.1323	0.0822	0.1094
IR Inten	--	3.7161	0.2177	1.6400
Raman Activ	--	2.1039	0.9211	1.2136
Depolar (P)	--	0.7480	0.6075	0.2430
Depolar (U)	--	0.8558	0.7559	0.3910

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.01	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.00
3	6	-0.01	0.04	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.02	0.01
4	6	0.00	0.03	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.02	0.01
5	6	0.00	-0.01	0.04	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00
6	6	-0.01	-0.01	0.03	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.01	-0.01
7	8	0.02	-0.01	-0.03	-0.01	0.02	0.01	0.01	-0.04	0.00
8	6	0.03	-0.01	0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.03
9	6	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.02
10	1	-0.08	0.02	0.03	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.02
11	8	0.07	-0.03	0.05	0.02	0.00	-0.02	-0.04	0.00	0.02
12	6	-0.04	0.02	-0.03	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.02
13	1	-0.02	0.03	-0.04	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.03
14	6	0.01	-0.01	-0.02	-0.04	0.04	0.03	-0.04	0.00	0.04
15	8	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.02	0.00	-0.01
16	6	0.07	0.01	-0.04	-0.04	-0.01	0.02	0.04	0.00	-0.02
17	1	0.04	0.19	-0.03	-0.01	-0.07	0.04	0.01	0.05	-0.06
18	1	0.02	-0.12	0.06	-0.05	0.03	-0.01	0.06	-0.03	0.00
19	1	0.18	-0.04	-0.20	-0.09	0.00	0.06	0.09	-0.01	-0.07
20	6	0.02	-0.02	0.03	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.02
21	1	0.04	-0.04	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.02
22	6	-0.03	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.05	-0.06
23	1	-0.12	-0.22	0.00	0.03	0.07	0.03	-0.03	-0.18	-0.17
24	1	0.14	0.00	-0.06	-0.08	-0.03	0.05	0.24	-0.03	-0.13
25	1	-0.13	0.09	0.14	0.02	-0.05	-0.07	0.03	0.03	0.05
26	6	-0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.03	-0.05	0.00	0.01	-0.03
27	1	-0.03	0.03	-0.03	0.07	0.01	-0.10	0.01	0.03	-0.05
28	1	0.04	-0.05	-0.02	-0.02	-0.10	-0.10	0.00	-0.02	-0.05
29	6	-0.05	-0.03	-0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.03
30	1	-0.16	-0.08	0.06	0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.02
31	1	-0.09	0.02	-0.13	0.02	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	0.05
32	6	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.03
33	1	0.04	-0.02	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.04
34	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
35	1	-0.01	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.01
36	6	0.11	0.14	-0.01	-0.06	0.04	0.03	0.03	0.07	0.01
37	1	0.26	0.25	-0.09	0.13	0.17	-0.06	-0.25	-0.05	0.05
38	1	0.04	0.25	0.14	-0.26	0.19	0.10	0.30	-0.09	-0.02
39	1	0.10	0.03	-0.08	-0.08	-0.19	0.06	0.06	0.40	0.01
40	6	0.00	0.06	-0.08	0.03	0.00	-0.02	0.01	0.04	-0.04
41	1	0.03	0.10	-0.11	0.05	0.03	-0.04	0.02	0.06	-0.05
42	6	-0.01	-0.07	0.00	0.07	-0.06	0.01	0.07	-0.08	-0.03
43	1	0.03	-0.17	0.02	-0.15	0.26	0.04	-0.04	0.04	0.00
44	1	-0.08	-0.08	-0.08	0.52	-0.03	0.09	0.32	-0.07	-0.07
45	1	0.01	-0.03	0.04	-0.06	-0.46	-0.08	0.00	-0.33	-0.04
46	6	-0.01	-0.01	0.04	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.01

47	1	-0.02	-0.01	0.03	0.03	0.00	-0.03	-0.01	0.02	-0.01
48	6	0.02	0.01	-0.03	-0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.00	0.01
49	1	0.00	0.09	-0.10	0.01	-0.03	0.05	-0.01	-0.02	0.02
50	1	0.12	-0.03	-0.06	-0.04	0.01	0.03	-0.04	0.01	0.02
51	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.00
52	1	-0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.01	0.01
53	6	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	0.02	0.04	-0.03	0.00	0.03
54	1	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	0.03	0.06	-0.04	0.00	0.03
55	6	-0.02	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.02	0.02	0.00	-0.02
56	1	-0.03	0.01	0.01	0.06	-0.03	-0.04	0.05	0.00	-0.06
57	6	0.01	-0.01	-0.01	-0.05	0.02	0.01	-0.03	0.00	0.03
58	1	0.02	-0.01	-0.01	-0.06	0.03	0.00	-0.03	0.00	0.04
59	8	-0.04	0.02	-0.07	0.02	-0.02	-0.02	-0.03	0.01	-0.03
60	8	-0.11	0.01	0.01	0.02	-0.02	-0.01	-0.02	0.04	0.03
61	8	0.00	-0.01	0.05	0.00	0.01	0.01	0.00	0.02	0.00
62	6	-0.04	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.02	0.00
63	6	0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01
64	6	0.04	-0.04	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.03	0.01
65	8	0.01	-0.06	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.00
66	1	0.08	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.01
67	6	-0.07	-0.02	0.03	-0.02	-0.02	0.02	0.06	0.04	-0.03
68	1	-0.13	-0.06	0.00	-0.03	-0.04	0.01	0.09	0.08	-0.01
69	1	-0.09	0.07	0.08	-0.03	-0.01	0.03	0.08	0.00	-0.07
70	1	-0.11	-0.04	0.02	-0.02	0.00	0.03	0.07	0.02	-0.05
71	6	0.05	0.09	0.02	0.02	0.06	0.01	-0.04	-0.12	-0.02
72	1	-0.03	0.19	0.05	-0.02	0.11	0.04	0.04	-0.23	-0.08
73	1	0.06	0.04	0.00	0.02	0.06	0.01	-0.06	-0.10	-0.01
74	1	0.18	0.13	0.03	0.07	0.08	-0.01	-0.17	-0.16	0.01

34

35

36

A

A

A

Frequencies --	306.2399	320.9867	324.1703
Red. masses --	2.1620	2.0068	2.1021
Frc consts --	0.1195	0.1218	0.1302
IR Inten --	1.5054	1.8910	4.1999
Raman Activ --	1.1169	0.8388	2.4290
Depolar (P) --	0.2787	0.6886	0.7471
Depolar (U) --	0.4359	0.8156	0.8552

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.00	0.02	0.00	-0.02	0.01	-0.02	-0.01	-0.01
2	6	0.01	0.01	0.00	0.01	-0.03	0.00	-0.02	-0.03	-0.01
3	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
4	6	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01	-0.02	0.02	0.00	0.01
5	6	0.00	-0.03	0.01	0.03	0.03	-0.01	0.03	0.00	0.00
6	6	-0.01	-0.04	0.02	0.03	0.06	-0.02	0.02	0.02	-0.02
7	8	-0.01	0.02	-0.03	0.00	-0.02	-0.04	-0.01	-0.04	-0.02
8	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.01
9	6	-0.01	0.00	-0.02	-0.03	-0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.01
10	1	-0.05	-0.01	0.00	-0.06	-0.02	0.00	0.03	-0.05	-0.01
11	8	0.06	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.02	-0.08	0.00	-0.01
12	6	-0.01	0.02	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	0.02	-0.02	0.02
13	1	0.02	-0.02	0.03	-0.01	-0.02	0.00	0.03	-0.01	0.01
14	6	0.01	0.05	-0.01	-0.02	-0.07	0.00	-0.08	-0.02	0.05

15	8	-0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.04
16	6	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	0.03	0.00
17	1	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.02	-0.03	-0.01	0.01	-0.03
18	1	-0.01	0.02	-0.01	0.04	0.04	-0.02	0.02	0.08	-0.03
19	1	-0.02	0.00	0.04	0.05	0.02	0.02	0.03	0.05	0.06
20	6	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	-0.01	-0.02
21	1	0.00	-0.03	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	0.01	-0.02
22	6	-0.02	0.02	0.06	-0.02	0.05	0.06	0.01	0.07	0.00
23	1	0.05	0.12	0.13	0.05	0.14	0.13	0.08	0.20	0.03
24	1	-0.15	0.01	0.11	-0.13	0.08	0.07	-0.10	0.09	0.01
25	1	0.01	-0.04	-0.02	0.04	0.00	0.04	0.11	-0.01	-0.02
26	6	0.02	-0.04	-0.04	-0.01	0.06	0.10	-0.01	0.03	-0.02
27	1	0.07	-0.01	-0.09	-0.12	-0.02	0.20	-0.03	0.04	-0.01
28	1	0.00	-0.12	-0.09	0.06	0.20	0.20	-0.02	0.04	-0.01
29	6	0.00	-0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.03	0.03	0.02	0.05
30	1	-0.05	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.02	0.13	0.07	-0.01
31	1	-0.01	-0.02	-0.07	0.00	0.00	0.04	0.06	0.00	0.16
32	6	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.02	0.00	0.01
33	1	0.00	0.01	-0.01	-0.03	0.03	-0.01	-0.03	0.01	0.00
34	6	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.00
35	1	-0.04	0.02	-0.02	-0.04	0.04	-0.03	-0.01	0.01	-0.01
36	6	-0.03	0.03	0.00	0.08	-0.01	-0.04	0.05	0.05	0.00
37	1	0.26	0.20	-0.10	0.26	0.06	-0.06	0.22	0.17	-0.07
38	1	-0.30	0.23	0.10	-0.03	0.08	0.02	-0.08	0.18	0.11
39	1	-0.05	-0.30	0.01	0.07	-0.17	-0.10	0.04	-0.11	-0.03
40	6	0.03	-0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.02	-0.02	0.01	-0.01
41	1	0.05	-0.01	-0.02	-0.07	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.02
42	6	-0.02	-0.01	0.03	0.00	0.08	-0.02	0.12	-0.02	-0.02
43	1	0.10	-0.14	0.00	-0.25	0.40	0.04	0.40	-0.33	-0.11
44	1	-0.20	-0.02	0.01	0.37	0.10	0.12	-0.22	-0.05	-0.17
45	1	0.05	0.15	0.10	-0.13	-0.23	-0.21	0.26	0.26	0.22
46	6	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.03	0.00	0.01
47	1	0.05	0.01	-0.05	-0.02	-0.01	0.06	0.03	0.00	0.01
48	6	0.01	-0.01	0.02	0.02	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.01
49	1	0.03	-0.02	0.04	0.01	0.04	-0.04	0.03	0.00	0.02
50	1	-0.02	0.00	0.02	0.06	0.01	-0.02	0.03	0.01	0.02
51	6	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00
52	1	-0.05	0.00	-0.01	0.07	0.01	0.01	0.07	0.00	0.02
53	6	0.02	0.03	0.01	-0.06	-0.04	-0.04	-0.09	-0.01	0.01
54	1	0.05	0.04	0.03	-0.10	-0.06	-0.08	-0.12	-0.02	0.01
55	6	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.06
56	1	0.00	-0.04	0.03	-0.03	0.05	-0.06	0.06	0.00	-0.13
57	6	-0.02	0.03	-0.03	0.00	-0.05	0.02	-0.07	-0.01	0.04
58	1	-0.04	0.04	-0.06	0.04	-0.06	0.05	-0.07	-0.01	0.07
59	8	0.02	-0.02	-0.01	0.02	-0.03	0.00	-0.04	-0.01	-0.01
60	8	-0.08	0.08	0.05	-0.07	0.03	0.02	0.06	-0.02	0.01
61	8	0.02	0.02	0.03	0.03	-0.03	-0.03	0.05	-0.01	0.00
62	6	-0.01	0.04	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.01
63	6	0.01	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.01	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.01
65	8	-0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01
66	1	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.02



67	6	0.07	0.05	-0.04	0.02	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.01
68	1	0.10	0.11	-0.03	0.02	0.03	-0.01	0.00	-0.02	0.01
69	1	0.08	0.03	-0.08	0.02	0.03	-0.01	0.00	-0.03	0.01
70	1	0.07	0.01	-0.08	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.01	0.02
71	6	-0.05	-0.17	-0.02	-0.01	-0.04	-0.01	0.00	0.02	0.00
72	1	0.06	-0.31	-0.10	0.02	-0.07	-0.03	-0.01	0.03	0.01
73	1	-0.06	-0.14	-0.01	-0.01	-0.04	-0.01	0.00	0.03	0.01
74	1	-0.22	-0.22	0.02	-0.05	-0.05	0.01	0.01	0.03	-0.02

		37		38		39
		A		A		A
Frequencies --		333.6644		346.0298		356.2731
Red. masses --		3.3179		2.5180		2.7249
Frc consts --		0.2176		0.1776		0.2038
IR Inten --		0.3746		0.6318		1.7249
Raman Activ --		1.3304		1.8682		3.3567
Depolar (P) --		0.7483		0.5806		0.1111
Depolar (U) --		0.8560		0.7347		0.2000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	0.00	0.04	-0.01	0.00	-0.03	0.06	-0.05	0.03
2	6	0.04	0.02	0.01	-0.02	0.01	0.01	0.01	-0.07	0.03
3	6	0.03	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	-0.02	0.03	0.00	0.01
4	6	-0.02	0.00	-0.03	-0.01	-0.02	-0.05	0.00	0.00	0.01
5	6	-0.03	0.03	0.01	0.01	-0.03	-0.06	-0.02	0.02	0.03
6	6	0.03	0.05	-0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.01
7	8	0.00	0.04	-0.01	-0.02	0.01	0.07	-0.06	-0.04	-0.01
8	6	0.00	-0.02	0.01	0.03	0.03	-0.02	0.04	0.03	-0.08
9	6	-0.04	0.04	-0.02	0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.06	-0.06
10	1	-0.11	0.05	0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.10	-0.06
11	8	0.10	-0.02	0.02	0.01	0.02	0.01	0.01	-0.02	0.01
12	6	-0.06	0.03	-0.05	0.00	-0.02	-0.02	0.01	-0.03	-0.03
13	1	-0.07	0.02	-0.04	0.00	-0.04	0.01	0.08	-0.02	-0.03
14	6	-0.07	0.00	0.08	-0.02	0.01	0.02	0.01	0.00	0.00
15	8	0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01
16	6	-0.01	-0.05	0.01	0.04	0.05	-0.02	0.00	0.16	0.02
17	1	0.00	-0.13	0.01	0.04	0.21	0.03	0.03	0.34	0.14
18	1	0.02	-0.03	-0.01	-0.05	-0.04	0.05	-0.23	0.15	0.04
19	1	-0.08	-0.04	0.04	0.11	0.02	-0.13	0.13	0.17	0.02
20	6	0.01	0.00	0.02	0.03	0.01	-0.02	0.04	-0.04	-0.06
21	1	0.00	-0.05	0.01	0.03	0.01	-0.02	0.01	-0.10	-0.06
22	6	0.05	-0.03	0.04	-0.10	-0.08	-0.01	-0.02	-0.07	0.10
23	1	0.07	0.02	0.04	-0.22	-0.36	-0.01	-0.05	-0.18	0.16
24	1	0.00	-0.06	0.08	0.12	-0.05	-0.09	0.01	-0.06	0.08
25	1	0.06	-0.07	-0.02	-0.29	0.11	0.10	-0.13	0.01	0.11
26	6	0.05	0.04	0.00	-0.02	-0.03	0.07	0.03	0.02	-0.03
27	1	0.05	0.04	0.00	-0.08	-0.10	0.13	0.07	0.05	-0.07
28	1	0.02	0.05	-0.01	0.02	0.07	0.13	0.01	-0.04	-0.07
29	6	-0.04	-0.04	-0.04	0.03	0.05	0.00	0.15	0.07	0.04
30	1	-0.15	-0.10	0.03	0.05	0.08	0.00	0.32	0.24	-0.04
31	1	-0.07	-0.02	-0.17	0.04	0.05	0.04	0.21	-0.01	0.26
32	6	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.06	0.01	-0.09
33	1	0.00	0.04	-0.01	0.02	-0.05	-0.01	-0.20	0.04	-0.20
34	6	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.02	0.00

35	1	-0.02	0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.02	-0.11	0.02	-0.04
36	6	-0.03	-0.14	-0.05	-0.10	0.10	-0.03	0.01	-0.05	0.00
37	1	-0.15	-0.27	0.08	-0.20	0.13	-0.12	-0.01	-0.09	0.05
38	1	0.06	-0.26	-0.20	-0.07	0.11	0.02	0.03	-0.09	-0.04
39	1	-0.02	-0.03	-0.04	-0.10	0.19	0.05	0.01	-0.04	0.00
40	6	0.03	-0.02	0.02	-0.02	-0.06	0.03	0.03	0.02	-0.01
41	1	0.01	-0.05	0.05	-0.05	-0.05	0.01	0.03	0.00	0.01
42	6	0.19	0.01	0.01	0.09	0.12	0.08	-0.01	-0.05	-0.02
43	1	0.36	-0.12	-0.08	0.19	0.19	-0.06	-0.04	-0.08	0.03
44	1	0.08	0.00	-0.07	0.05	0.12	0.23	0.01	-0.05	-0.09
45	1	0.26	0.11	0.20	0.13	0.21	0.14	-0.03	-0.09	-0.02
46	6	-0.05	0.02	0.02	0.05	-0.02	-0.06	-0.05	0.01	0.03
47	1	-0.07	0.01	0.06	0.09	-0.02	-0.09	-0.08	0.01	0.06
48	6	-0.04	0.02	0.00	0.02	-0.02	0.01	-0.03	0.01	-0.01
49	1	-0.05	0.00	-0.01	0.06	-0.06	0.08	-0.06	0.03	-0.05
50	1	-0.04	0.03	0.01	-0.05	0.01	0.03	0.00	0.00	-0.02
51	6	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
52	1	0.08	0.00	0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.00
53	6	-0.07	0.00	0.06	-0.01	0.01	0.02	0.01	0.00	0.01
54	1	-0.09	0.00	0.07	-0.01	0.01	0.03	0.01	0.00	0.01
55	6	0.03	0.00	-0.03	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01
56	1	0.10	-0.01	-0.11	0.03	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.01
57	6	-0.06	0.01	0.07	-0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
58	1	-0.07	0.01	0.09	-0.03	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
59	8	0.04	0.01	0.03	0.05	-0.06	-0.01	-0.01	0.03	0.01
60	8	-0.13	0.05	-0.03	-0.02	0.02	0.02	-0.04	0.00	-0.01
61	8	-0.06	0.01	-0.01	0.04	-0.02	-0.05	-0.06	0.01	0.02
62	6	-0.05	0.02	-0.04	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01
63	6	-0.02	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
64	6	0.04	-0.07	0.03	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.00
65	8	0.03	0.02	-0.03	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.01	0.00
66	1	0.07	-0.08	0.06	0.02	-0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
67	6	-0.05	-0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
68	1	-0.10	-0.05	-0.05	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00
69	1	-0.06	0.07	0.02	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00
70	1	-0.10	-0.09	-0.06	-0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.01	0.00
71	6	0.02	0.01	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00
72	1	-0.01	0.05	0.05	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
73	1	0.06	-0.03	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
74	1	0.08	0.02	0.05	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00

40

41

42

A

A

A

Frequencies --	357.6319	375.9518	382.0885
Red. masses --	5.2731	4.2508	3.9981
Frc consts --	0.3974	0.3540	0.3439
IR Inten --	0.4099	0.8549	1.4512
Raman Activ --	3.4574	2.7432	3.2765
Depolar (P) --	0.3845	0.4094	0.2660
Depolar (U) --	0.5554	0.5810	0.4202

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.01	-0.08	0.01	0.00	-0.02	0.05	-0.05	0.02
2	6	-0.08	-0.06	-0.05	0.01	-0.02	0.00	0.04	-0.11	0.01

3	6	0.08	0.15	-0.07	0.01	0.01	-0.07	0.02	0.05	-0.08
4	6	0.01	0.06	0.00	-0.02	0.01	-0.07	0.00	0.05	-0.09
5	6	0.02	-0.01	0.01	-0.07	0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.05
6	6	0.03	-0.03	0.02	-0.02	-0.03	-0.02	-0.07	-0.04	0.05
7	8	-0.01	-0.10	-0.03	-0.02	0.00	0.01	-0.03	-0.09	-0.09
8	6	0.00	-0.02	0.04	0.00	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.04
9	6	-0.07	-0.05	0.04	0.02	-0.03	0.04	0.04	0.05	0.05
10	1	-0.08	-0.06	0.04	0.06	-0.01	0.02	0.05	0.13	0.05
11	8	-0.15	-0.02	0.05	-0.05	-0.01	0.01	0.00	0.02	-0.04
12	6	-0.03	0.03	0.03	0.01	-0.02	0.02	0.03	0.07	0.02
13	1	0.00	0.07	-0.01	0.01	-0.03	0.04	0.01	0.05	0.04
14	6	-0.02	0.04	0.00	0.01	0.09	0.04	0.03	-0.01	-0.02
15	8	-0.02	-0.01	-0.04	0.04	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.02
16	6	0.07	0.00	-0.04	-0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.02	0.06
17	1	0.01	0.08	-0.10	0.00	-0.05	0.03	-0.01	-0.01	0.06
18	1	0.10	-0.06	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.04	0.08	0.01
19	1	0.14	-0.03	-0.11	-0.03	-0.01	0.05	-0.01	0.04	0.13
20	6	0.00	-0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.03	-0.01	0.08
21	1	0.04	0.02	-0.03	0.01	0.02	0.02	0.00	0.01	0.10
22	6	-0.17	0.05	0.01	-0.01	0.04	0.01	0.15	0.00	0.00
23	1	-0.16	-0.04	0.13	0.03	0.10	0.06	0.19	0.15	-0.06
24	1	-0.18	0.11	-0.04	-0.08	0.05	0.03	0.08	0.01	0.01
25	1	-0.26	0.14	0.04	0.03	0.01	-0.01	0.28	-0.10	0.00
26	6	0.14	-0.03	0.01	0.02	-0.05	0.01	-0.06	-0.02	0.06
27	1	0.18	-0.06	0.00	0.02	-0.09	0.03	-0.15	-0.06	0.14
28	1	0.17	-0.09	-0.01	0.03	-0.03	0.03	0.08	-0.01	0.14
29	6	-0.08	0.01	0.07	-0.04	-0.01	0.02	0.02	-0.03	0.00
30	1	-0.07	-0.02	0.06	-0.05	-0.03	0.02	0.05	-0.04	-0.02
31	1	-0.11	0.07	0.10	-0.05	0.02	0.00	0.04	-0.06	0.01
32	6	0.00	-0.08	0.08	-0.02	0.00	0.00	-0.12	0.04	-0.01
33	1	0.11	-0.16	0.15	-0.04	0.02	-0.01	-0.31	0.20	-0.13
34	6	-0.07	-0.04	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.06	0.02
35	1	0.00	-0.03	-0.02	-0.02	0.01	-0.03	-0.04	0.03	-0.06
36	6	-0.06	-0.11	0.01	0.19	0.05	-0.16	-0.12	0.02	-0.08
37	1	-0.06	-0.17	0.10	0.35	0.11	-0.16	-0.15	0.01	-0.10
38	1	-0.13	-0.15	-0.14	0.24	0.10	0.00	-0.17	0.02	-0.13
39	1	-0.07	-0.18	0.06	0.20	0.01	-0.34	-0.13	0.01	0.00
40	6	0.15	0.09	-0.01	0.03	-0.05	0.00	-0.03	0.06	-0.06
41	1	0.19	0.07	0.02	0.01	-0.08	0.03	-0.04	0.01	-0.02
42	6	-0.01	-0.01	0.03	0.02	0.03	0.02	0.02	0.00	0.12
43	1	-0.05	0.03	0.04	0.07	0.09	-0.05	0.07	0.09	0.02
44	1	0.01	0.00	0.06	0.02	0.04	0.11	0.09	0.01	0.20
45	1	-0.03	-0.01	-0.03	0.04	0.07	0.06	0.03	-0.03	0.19
46	6	0.04	-0.01	0.01	-0.15	0.01	-0.06	0.02	-0.03	-0.02
47	1	0.05	-0.01	-0.01	-0.20	0.01	-0.01	0.05	-0.05	-0.04
48	6	0.05	-0.02	-0.01	-0.13	-0.03	-0.09	0.02	0.01	-0.01
49	1	0.05	0.04	-0.03	-0.16	-0.03	-0.13	0.04	0.09	-0.02
50	1	0.09	-0.05	-0.03	-0.14	-0.06	-0.13	0.08	-0.03	-0.04
51	6	0.01	-0.02	0.01	-0.03	-0.03	-0.02	-0.04	0.00	0.03
52	1	-0.02	-0.01	0.00	-0.05	-0.04	-0.04	-0.09	0.04	0.04
53	6	-0.02	0.03	0.01	0.08	0.06	0.11	0.03	-0.01	-0.03
54	1	0.00	0.03	0.03	0.13	0.09	0.19	0.04	-0.01	-0.03

55	6	0.00	-0.01	-0.02	0.09	-0.01	0.07	-0.01	0.00	0.02
56	1	0.02	-0.03	-0.03	0.12	-0.06	0.07	-0.05	0.01	0.05
57	6	-0.05	0.02	-0.02	0.00	0.08	0.03	0.04	-0.01	-0.02
58	1	-0.07	0.03	-0.04	-0.05	0.09	0.00	0.04	-0.01	-0.02
59	8	0.21	0.18	0.00	0.10	0.02	-0.01	-0.05	0.16	-0.04
60	8	0.01	-0.01	-0.02	0.07	-0.02	0.04	0.03	0.05	0.04
61	8	0.05	-0.01	0.03	-0.15	0.00	-0.08	0.05	-0.05	-0.03
62	6	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.03	0.04	-0.01	0.01	-0.01
63	6	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.04	0.00	-0.01
64	6	0.00	-0.02	-0.01	-0.02	0.02	0.00	0.02	-0.05	0.03
65	8	0.01	0.04	-0.01	-0.04	-0.09	0.04	0.00	-0.05	-0.01
66	1	0.00	-0.02	-0.01	-0.03	0.02	0.00	0.05	-0.08	0.06
67	6	-0.01	-0.02	0.00	0.02	0.02	0.01	-0.02	-0.03	-0.01
68	1	-0.02	-0.03	-0.01	0.04	0.04	0.02	-0.04	-0.02	-0.03
69	1	-0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.02	-0.01	-0.03	0.04	-0.01
70	1	-0.02	-0.02	0.00	0.04	0.03	0.02	-0.06	-0.07	-0.05
71	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.03
72	1	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.02	0.02	0.07
73	1	0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.03	0.02	0.05	-0.03	0.00
74	1	0.02	0.00	0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.07

		43		44		45
		A		A		A
Frequencies --		392.6190		413.0980		428.6440
Red. masses --		5.8153		3.8669		3.6541
Frc consts --		0.5282		0.3888		0.3956
IR Inten --		7.7847		9.3286		5.1146
Raman Activ --		4.9174		5.9324		4.3598
Depolar (P) --		0.2386		0.4679		0.4952
Depolar (U) --		0.3852		0.6375		0.6624

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

23	1	0.10	-0.01	0.03	0.02	0.00	0.00	-0.04	-0.02	-0.01
24	1	0.05	-0.10	0.08	0.01	-0.01	0.02	-0.03	0.04	-0.06
25	1	0.08	-0.07	-0.07	0.02	-0.02	0.00	-0.05	0.04	-0.01
26	6	-0.02	0.04	0.02	-0.02	-0.01	0.02	0.03	0.02	-0.06
27	1	-0.06	0.02	0.05	-0.06	-0.05	0.07	0.16	0.14	-0.19
28	1	0.04	0.03	0.05	0.04	0.03	0.07	-0.14	-0.09	-0.20
29	6	-0.10	-0.01	0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.03
30	1	-0.16	-0.06	0.06	0.01	-0.01	0.00	-0.07	-0.07	0.00
31	1	-0.17	0.13	0.02	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.12
32	6	0.10	0.02	-0.10	0.00	0.01	-0.01	-0.08	0.02	0.02
33	1	0.09	0.02	-0.11	-0.02	0.02	-0.02	-0.18	0.11	-0.06
34	6	0.03	0.06	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.05	0.01
35	1	-0.08	0.05	-0.06	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.04
36	6	-0.06	0.03	-0.08	0.02	0.01	0.00	-0.07	0.04	-0.10
37	1	-0.11	0.04	-0.12	0.05	0.02	0.00	-0.11	0.05	-0.14
38	1	-0.04	0.03	-0.06	0.02	0.02	0.03	-0.05	0.04	-0.08
39	1	-0.06	0.08	-0.04	0.02	-0.01	-0.02	-0.07	0.08	-0.06
40	6	-0.01	0.06	-0.03	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.08	0.04
41	1	-0.03	0.00	0.03	0.00	0.02	-0.01	-0.03	-0.12	0.07
42	6	0.03	-0.02	0.04	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.01
43	1	0.07	-0.04	0.01	0.01	0.05	-0.01	0.02	-0.12	0.03
44	1	0.06	-0.02	-0.01	0.02	0.02	0.06	-0.01	-0.04	-0.13
45	1	0.04	-0.05	0.11	0.01	0.02	0.02	0.01	-0.05	0.02
46	6	0.04	-0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.03	0.10
47	1	0.07	-0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.04	0.01	0.00	0.12
48	6	0.03	0.04	0.04	-0.01	-0.02	-0.01	0.02	0.09	0.06
49	1	0.05	0.06	0.04	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.10	0.04
50	1	0.06	0.04	0.04	-0.03	-0.02	-0.02	0.08	0.12	0.10
51	6	-0.01	0.03	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.07	0.02
52	1	-0.02	0.05	0.04	-0.01	-0.02	-0.01	0.02	0.09	0.05
53	6	-0.01	-0.04	-0.05	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.04	-0.05
54	1	-0.03	-0.05	-0.09	0.02	0.01	0.03	-0.05	-0.06	-0.10
55	6	-0.03	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.04	0.01	-0.02
56	1	-0.07	0.04	0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.06	0.04	-0.02
57	6	0.03	-0.04	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.05	-0.01
58	1	0.06	-0.05	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.06	-0.06	0.02
59	8	-0.02	0.16	-0.01	-0.02	0.03	-0.01	0.12	-0.03	0.01
60	8	-0.01	-0.05	-0.01	-0.06	0.06	0.06	-0.03	-0.07	-0.03
61	8	0.03	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.04
62	6	0.02	-0.04	0.04	0.05	0.03	0.10	0.04	-0.07	0.06
63	6	0.04	0.00	0.03	0.16	-0.08	0.07	0.12	-0.06	0.10
64	6	-0.04	0.07	-0.01	-0.04	-0.04	-0.22	-0.07	0.08	-0.04
65	8	-0.03	-0.05	0.04	0.01	0.22	0.10	-0.04	-0.06	0.06
66	1	-0.07	0.10	-0.04	-0.19	0.02	-0.34	-0.17	0.15	-0.13
67	6	0.04	0.06	0.02	-0.09	-0.19	-0.02	0.03	0.05	0.02
68	1	0.08	0.07	0.05	-0.14	-0.43	0.00	0.09	0.05	0.06
69	1	0.05	-0.04	-0.01	-0.12	-0.29	0.09	0.05	-0.12	-0.01
70	1	0.09	0.09	0.05	-0.03	0.02	0.20	0.12	0.12	0.09
71	6	-0.01	0.02	-0.02	0.00	-0.02	-0.10	-0.02	0.02	-0.02
72	1	0.01	-0.01	-0.05	0.02	-0.02	-0.31	-0.02	0.03	-0.13
73	1	-0.07	0.06	0.02	-0.26	-0.01	0.02	-0.21	0.09	0.08
74	1	-0.04	0.01	-0.08	0.00	-0.02	-0.22	-0.01	0.03	-0.18

			46			47			48		
			A			A			A		
Frequencies --			437.3603			448.8670			461.4543		
Red. masses --			3.8445			2.9555			3.4801		
Frc consts --			0.4333			0.3508			0.4366		
IR Inten --			1.9255			4.9702			4.0236		
Raman Activ --			2.8690			8.8493			0.9512		
Depolar (P) --			0.6591			0.4193			0.7386		
Depolar (U) --			0.7945			0.5909			0.8496		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6		0.01	-0.01	-0.04	0.06	-0.03	0.06	-0.01	0.02	-0.03
2	6		0.02	0.00	-0.01	-0.07	0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.00
3	6		0.00	-0.05	-0.05	0.03	-0.02	0.02	0.02	0.04	0.03
4	6		-0.01	0.01	-0.05	0.00	-0.01	-0.04	0.02	-0.04	0.08
5	6		-0.01	0.05	0.00	-0.02	0.00	-0.03	-0.02	-0.10	-0.02
6	6		-0.01	0.04	0.02	-0.04	0.01	0.03	-0.06	-0.02	0.00
7	8		-0.03	0.03	0.06	0.03	-0.04	-0.06	-0.01	-0.01	0.00
8	6		0.02	0.00	0.01	-0.05	0.05	-0.06	0.03	-0.01	0.01
9	6		0.04	-0.05	0.04	0.01	0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.00
10	1		0.09	-0.06	0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00
11	8		-0.08	-0.02	0.00	0.01	0.07	0.03	0.01	-0.01	0.00
12	6		0.07	0.01	0.06	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.01
13	1		0.12	-0.05	0.13	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.01
14	6		0.01	-0.04	-0.01	0.01	-0.03	-0.01	0.00	-0.05	0.00
15	8		0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.02	0.01	0.01	0.02
16	6		0.01	-0.01	0.02	-0.09	-0.02	-0.08	0.04	0.00	0.03
17	1		0.03	-0.02	0.03	-0.07	-0.06	-0.07	0.04	0.00	0.05
18	1		0.01	0.00	0.02	-0.03	-0.08	-0.04	0.01	0.01	0.02
19	1		0.00	0.00	0.03	-0.16	-0.05	-0.14	0.04	0.00	0.05
20	6		0.02	-0.02	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.02	0.01	-0.01
21	1		0.02	0.03	0.02	-0.07	-0.04	0.03	0.04	0.02	-0.02
22	6		-0.02	0.01	-0.01	0.07	-0.03	0.10	-0.04	0.02	-0.03
23	1		-0.02	-0.02	0.03	0.09	0.00	0.13	-0.04	0.01	0.00
24	1		-0.03	0.04	-0.03	0.02	-0.04	0.11	-0.05	0.02	-0.02
25	1		-0.04	0.04	0.01	0.08	-0.05	0.07	-0.06	0.03	-0.04
26	6		0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	-0.01
27	1		0.14	0.14	-0.22	0.02	0.03	-0.03	0.04	-0.05	-0.04
28	1		-0.18	-0.12	-0.23	0.00	-0.05	-0.03	-0.05	-0.06	-0.04
29	6		-0.04	0.00	0.02	0.02	0.12	0.00	-0.01	-0.02	-0.01
30	1		-0.04	-0.02	0.02	0.06	0.23	0.00	-0.05	-0.08	0.01
31	1		-0.06	0.05	0.03	0.05	0.06	0.08	-0.03	0.01	-0.06
32	6		0.01	0.01	-0.02	0.11	-0.13	0.08	-0.04	0.03	-0.03
33	1		-0.02	0.04	-0.03	0.47	-0.45	0.32	-0.16	0.12	-0.11
34	6		0.01	0.00	-0.03	-0.11	0.03	-0.03	0.03	-0.02	0.01
35	1		0.00	0.02	-0.05	0.02	-0.08	0.07	-0.01	0.02	-0.03
36	6		-0.01	0.05	-0.07	0.00	0.00	-0.06	0.11	-0.02	0.10
37	1		0.00	0.08	-0.12	0.02	0.00	-0.06	0.17	0.00	0.11
38	1		0.00	0.08	-0.02	0.01	0.00	-0.05	0.12	-0.01	0.14
39	1		-0.01	0.06	-0.08	0.00	0.00	-0.08	0.12	-0.04	0.02
40	6		-0.01	-0.10	0.04	0.02	0.02	-0.01	0.01	0.08	0.02
41	1		-0.05	-0.13	0.06	0.00	0.01	-0.01	0.04	0.12	-0.01
42	6		-0.04	-0.05	-0.02	0.01	-0.03	0.05	0.02	-0.01	0.04

43	1	-0.07	-0.10	0.03	0.05	-0.03	0.01	0.09	0.01	-0.04
44	1	0.00	-0.05	-0.12	0.04	-0.03	0.02	0.02	-0.01	0.07
45	1	-0.05	-0.12	-0.03	0.02	-0.06	0.12	0.05	0.01	0.13
46	6	-0.02	0.02	0.08	0.01	0.01	-0.01	0.11	0.02	-0.13
47	1	-0.02	0.00	0.12	0.04	-0.03	0.02	0.23	-0.09	-0.09
48	6	0.00	0.09	0.05	-0.01	0.07	0.04	0.01	0.11	0.10
49	1	-0.02	0.11	0.02	0.03	0.05	0.09	0.18	-0.14	0.40
50	1	0.06	0.09	0.06	-0.04	0.09	0.06	-0.30	0.27	0.24
51	6	-0.01	0.06	0.03	-0.04	0.05	0.04	-0.03	0.08	0.03
52	1	0.00	0.09	0.06	-0.05	0.08	0.06	-0.03	0.11	0.06
53	6	-0.01	-0.03	-0.05	0.01	-0.03	-0.04	-0.01	-0.05	-0.05
54	1	-0.03	-0.05	-0.09	0.00	-0.04	-0.07	-0.03	-0.07	-0.10
55	6	-0.03	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.03	0.01	-0.01
56	1	-0.06	0.04	0.00	-0.05	0.03	0.02	-0.06	0.05	0.00
57	6	0.03	-0.04	-0.01	0.03	-0.03	-0.01	0.04	-0.05	0.00
58	1	0.06	-0.04	0.01	0.06	-0.03	0.00	0.09	-0.06	0.03
59	8	0.09	-0.07	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.05	0.03	0.00
60	8	0.08	0.13	0.10	0.02	0.00	0.01	-0.02	-0.01	-0.02
61	8	-0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.02	-0.06	-0.18	-0.02	-0.14
62	6	-0.01	0.09	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02
63	6	-0.11	0.06	-0.09	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.02
64	6	0.08	-0.12	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01
65	8	0.03	0.07	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.02	-0.02
66	1	0.16	-0.20	0.08	-0.02	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.02
67	6	-0.07	-0.12	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
68	1	-0.16	-0.20	-0.08	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00
69	1	-0.10	0.07	0.03	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.03	0.00
70	1	-0.17	-0.15	-0.05	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01
71	6	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
72	1	0.02	-0.05	0.08	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.01
73	1	0.18	-0.13	-0.09	-0.02	0.01	0.01	0.04	-0.01	-0.02
74	1	-0.01	-0.04	0.19	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.02

		49		50		51
		A		A		A
Frequencies --		474.4059		490.4839		507.5983
Red. masses --		3.3581		4.5002		4.5219
Frc consts --		0.4453		0.6379		0.6864
IR Inten --		2.4947		17.4798		1.4410
Raman Activ --		10.7229		6.6422		4.1594
Depolar (P) --		0.0707		0.1457		0.2851
Depolar (U) --		0.1320		0.2543		0.4436

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	-0.03	-0.05	-0.10	0.02	0.05	-0.05	0.02	0.05
2	6	-0.04	-0.11	-0.01	-0.07	0.01	0.13	-0.05	0.02	0.10
3	6	0.01	-0.02	-0.02	-0.03	0.03	0.08	-0.03	0.04	-0.02
4	6	0.03	-0.04	0.03	0.01	0.05	-0.01	-0.08	-0.03	-0.05
5	6	0.01	-0.02	0.03	0.02	0.08	-0.06	-0.06	-0.08	0.05
6	6	0.01	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.05	0.05	-0.03	-0.07
7	8	-0.07	-0.11	0.02	0.03	-0.04	-0.07	0.04	-0.02	-0.09
8	6	0.15	0.10	-0.03	0.05	0.06	0.02	0.02	0.04	-0.01
9	6	0.03	0.01	-0.04	-0.02	-0.09	-0.13	0.01	-0.06	-0.06
10	1	0.02	0.00	-0.03	-0.01	-0.23	-0.15	0.04	-0.12	-0.09

11	8	-0.01	0.11	0.04	0.02	-0.05	-0.01	0.04	-0.03	-0.03
12	6	0.02	-0.05	-0.02	0.07	-0.02	-0.05	0.01	-0.03	-0.01
13	1	0.05	-0.05	-0.02	0.18	-0.02	-0.04	0.06	-0.07	0.04
14	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00
15	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01
16	6	0.06	-0.09	0.10	0.05	-0.03	0.02	0.00	-0.01	0.00
17	1	0.21	-0.30	0.24	0.05	-0.10	0.00	0.01	-0.05	0.00
18	1	0.08	-0.14	0.13	0.14	-0.07	0.05	0.03	-0.04	0.02
19	1	-0.24	-0.12	0.07	-0.04	-0.05	-0.03	-0.06	-0.03	-0.04
20	6	0.12	0.01	-0.06	-0.05	-0.03	-0.12	-0.02	-0.01	-0.06
21	1	0.15	-0.01	-0.08	0.01	-0.09	-0.18	-0.01	-0.03	-0.07
22	6	0.02	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03	0.02	-0.02	-0.01
23	1	0.06	0.06	0.07	-0.06	0.02	-0.15	-0.01	0.01	-0.12
24	1	-0.08	0.04	-0.01	0.04	-0.07	0.01	0.07	-0.08	0.03
25	1	0.04	-0.01	-0.03	0.01	-0.05	-0.06	0.05	-0.05	-0.04
26	6	-0.04	0.02	0.00	0.02	0.00	-0.03	0.06	-0.05	0.04
27	1	-0.06	0.01	0.02	0.15	0.10	-0.15	-0.10	-0.21	0.20
28	1	-0.05	0.05	0.02	-0.07	-0.15	-0.15	0.23	0.11	0.20
29	6	-0.09	0.17	-0.04	-0.02	0.02	-0.03	0.02	0.01	-0.05
30	1	-0.30	0.00	0.06	-0.09	-0.06	0.00	0.01	0.01	-0.04
31	1	-0.21	0.37	-0.24	-0.06	0.09	-0.12	0.02	0.02	-0.06
32	6	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.12	0.07	-0.03	0.05	0.06
33	1	-0.06	-0.07	-0.07	-0.17	0.09	-0.05	-0.08	-0.03	0.01
34	6	-0.05	0.00	0.00	-0.02	0.13	0.23	-0.05	0.08	0.18
35	1	-0.05	0.09	-0.08	-0.06	0.14	0.22	-0.06	0.06	0.20
36	6	0.00	0.00	0.06	0.00	-0.03	-0.03	-0.04	0.02	-0.12
37	1	-0.02	0.03	0.01	0.01	-0.09	0.07	-0.03	0.05	-0.15
38	1	-0.03	0.03	0.08	0.02	-0.08	-0.10	0.00	0.04	-0.04
39	1	-0.01	0.00	0.11	0.00	-0.05	-0.06	-0.03	0.06	-0.15
40	6	-0.05	0.00	0.01	0.03	0.04	0.02	0.05	-0.03	-0.05
41	1	-0.07	-0.03	0.03	0.07	0.13	-0.05	0.09	-0.06	-0.01
42	6	0.00	0.01	-0.02	0.01	-0.04	0.10	-0.01	0.04	-0.11
43	1	-0.02	0.00	0.00	0.07	-0.03	0.03	-0.08	0.07	-0.06
44	1	-0.01	0.01	-0.02	0.06	-0.04	0.07	-0.06	0.05	-0.04
45	1	-0.01	0.02	-0.05	0.02	-0.08	0.20	-0.03	0.09	-0.25
46	6	-0.01	-0.01	-0.01	-0.05	0.02	0.00	0.08	-0.02	0.04
47	1	-0.04	0.02	-0.02	-0.09	-0.01	0.07	0.19	-0.01	-0.06
48	6	-0.01	-0.05	-0.03	-0.04	0.03	-0.02	0.09	0.01	0.07
49	1	-0.02	-0.05	-0.04	-0.06	0.17	-0.10	0.12	-0.17	0.17
50	1	-0.01	-0.05	-0.04	0.07	-0.05	-0.10	-0.02	0.13	0.19
51	6	0.01	-0.03	-0.02	-0.06	0.01	0.06	0.08	0.01	-0.06
52	1	0.02	-0.05	-0.04	-0.10	0.04	0.07	0.12	0.00	-0.06
53	6	0.00	0.01	0.02	0.03	0.00	-0.02	-0.04	-0.01	0.00
54	1	0.00	0.02	0.04	0.04	0.00	-0.02	-0.06	-0.02	-0.01
55	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.03
56	1	0.03	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.04	0.02	0.01	-0.05
57	6	-0.01	0.01	0.01	0.02	0.00	-0.02	-0.02	-0.02	0.02
58	1	-0.03	0.02	0.00	0.02	0.00	-0.03	0.00	-0.02	0.03
59	8	-0.04	0.01	0.00	0.04	-0.09	0.01	-0.01	0.07	0.00
60	8	-0.03	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.08	0.03	0.03
61	8	-0.01	0.01	0.04	0.12	-0.06	-0.12	-0.17	0.07	0.16
62	6	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.02	0.02	0.03



63	6	-0.01	0.02	-0.03	0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.03	-0.01
64	6	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.02	-0.01
65	8	0.01	0.03	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.02
66	1	0.04	-0.01	0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.03	-0.05	0.01
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01
68	1	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.06	-0.01
69	1	0.00	0.03	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.01
70	1	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.01
71	6	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01
72	1	0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.01
73	1	0.04	-0.02	-0.03	-0.03	0.02	0.02	0.03	-0.02	-0.01
74	1	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.01	-0.02	-0.03	-0.01	0.05

	52	53	54
	A	A	A
Frequencies --	536.6383	549.5733	558.9915
Red. masses --	5.2016	4.1935	4.6894
Frc consts --	0.8826	0.7462	0.8633
IR Inten --	25.1977	3.8923	11.2653
Raman Activ --	1.1212	7.7962	7.5778
Depolar (P) --	0.4880	0.0515	0.6840
Depolar (U) --	0.6559	0.0979	0.8124

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

31	1	-0.02	0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.08	0.12	-0.02
32	6	0.00	0.04	0.03	0.03	0.05	0.08	0.02	-0.05	-0.12
33	1	0.01	0.09	0.04	0.07	0.07	0.11	-0.06	-0.02	-0.18
34	6	0.02	0.01	-0.04	-0.01	0.07	0.00	0.03	-0.06	-0.08
35	1	0.06	0.06	-0.09	0.02	0.14	-0.07	-0.05	-0.07	-0.07
36	6	-0.01	0.01	-0.03	0.02	0.00	0.11	-0.01	-0.02	-0.09
37	1	-0.07	0.03	-0.09	-0.01	-0.01	0.12	0.08	-0.08	0.06
38	1	-0.05	0.03	-0.04	-0.06	0.00	0.02	0.05	-0.07	-0.13
39	1	-0.02	0.03	0.07	0.01	-0.04	0.19	0.00	-0.06	-0.23
40	6	0.13	-0.11	-0.12	-0.09	-0.12	0.00	0.09	0.09	0.01
41	1	0.15	-0.19	-0.02	-0.13	-0.18	0.05	0.15	0.20	-0.09
42	6	-0.05	-0.06	0.15	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.05
43	1	-0.17	-0.08	0.28	-0.07	0.02	0.03	0.04	0.05	-0.10
44	1	-0.12	-0.06	0.15	-0.09	0.00	0.06	0.07	0.01	-0.04
45	1	-0.09	-0.01	-0.04	-0.03	0.07	-0.10	0.02	-0.03	0.02
46	6	0.01	0.07	0.03	-0.01	0.01	0.01	0.03	-0.02	0.00
47	1	-0.09	-0.01	0.23	-0.03	-0.01	0.05	0.12	-0.01	-0.08
48	6	0.01	0.04	0.03	0.00	0.01	0.00	0.03	0.00	0.02
49	1	0.02	-0.07	0.08	-0.01	-0.11	0.04	0.05	0.07	0.02
50	1	-0.12	0.08	0.05	-0.07	0.09	0.08	0.08	-0.03	-0.01
51	6	0.07	-0.01	0.03	0.06	0.02	-0.04	-0.04	-0.01	0.02
52	1	0.02	0.01	0.03	0.06	0.03	-0.03	-0.03	-0.01	0.03
53	6	-0.04	0.02	0.01	-0.03	0.00	0.02	0.02	-0.01	-0.02
54	1	-0.07	0.02	0.01	-0.05	0.00	0.03	0.05	-0.01	-0.04
55	6	-0.01	0.00	-0.04	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.01
56	1	0.02	-0.02	-0.06	0.03	0.00	-0.04	-0.03	0.01	0.03
57	6	-0.05	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.02	0.02	0.00	-0.02
58	1	-0.08	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.04	0.05	-0.01	-0.04
59	8	-0.24	0.01	0.04	0.07	0.04	-0.07	-0.10	-0.13	0.07
60	8	0.00	0.00	0.00	0.03	0.11	0.01	0.07	0.16	0.03
61	8	-0.11	-0.01	-0.15	-0.05	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.04
62	6	0.00	0.00	0.01	0.07	0.00	-0.10	0.10	0.03	-0.08
63	6	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.12	0.11	0.06	-0.11	0.12
64	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.01	0.06	-0.08	-0.03	0.05
65	8	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.04	-0.12	-0.02	-0.08	-0.12
66	1	0.00	0.00	-0.01	-0.21	0.07	-0.06	-0.21	0.04	-0.07
67	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.04	-0.02
68	1	0.00	-0.01	0.00	0.06	0.11	0.01	0.03	0.06	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.09	-0.07	0.00	-0.10	-0.06
70	1	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.07	-0.07	0.02	-0.09	-0.07
71	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.04	0.05	-0.04	0.04	0.07
72	1	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.14	0.04	-0.10	0.13	0.04
73	1	-0.01	0.00	0.00	-0.19	0.16	0.16	-0.20	0.15	0.17
74	1	0.00	0.00	0.00	0.11	0.09	-0.18	0.08	0.08	-0.16

	55	56	57
	A	A	A
Frequencies --	568.3348	590.8644	604.1472
Red. masses --	4.0753	3.8546	3.8964
Frc consts --	0.7756	0.7929	0.8379
IR Inten --	12.0701	4.8686	18.6913
Raman Activ --	2.7424	15.7435	3.2840
Depolar (P) --	0.3156	0.0703	0.1576

		Depolar (U) --			0.4798			0.1314			0.2723		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	-0.06	-0.06	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.03	0.04			
2	6	0.02	-0.09	-0.07	-0.03	0.05	0.02	0.04	0.00	0.02			
3	6	0.08	-0.06	0.04	0.01	-0.01	-0.02	-0.02	0.03	0.03			
4	6	0.02	-0.07	-0.03	0.04	-0.07	-0.05	-0.02	0.07	0.00			
5	6	-0.02	-0.07	0.00	0.06	-0.03	0.04	0.03	0.00	0.02			
6	6	-0.07	0.06	-0.01	0.05	0.09	0.10	0.05	0.01	0.06			
7	8	-0.09	-0.04	0.11	0.05	0.01	-0.03	0.01	0.01	-0.03			
8	6	-0.08	0.05	0.11	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.05	0.01			
9	6	-0.04	0.00	-0.08	0.07	-0.03	0.06	-0.12	0.07	-0.08			
10	1	-0.01	-0.09	-0.12	0.06	0.05	0.08	-0.15	-0.03	-0.08			
11	8	0.07	0.01	-0.04	-0.03	-0.04	0.00	0.01	0.07	0.03			
12	6	0.00	-0.01	-0.01	0.04	-0.05	-0.01	-0.06	0.10	-0.04			
13	1	-0.02	-0.05	0.02	0.03	-0.09	0.03	-0.08	0.11	-0.06			
14	6	-0.02	0.01	0.01	0.03	0.01	-0.02	0.07	-0.01	-0.06			
15	8	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.00	-0.02			
16	6	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.01	-0.01	0.06	-0.01	0.03			
17	1	-0.13	0.03	-0.22	0.00	0.00	0.05	0.03	0.02	0.00			
18	1	0.20	-0.06	0.01	-0.09	0.01	-0.01	0.05	0.02	0.01			
19	1	0.06	-0.03	-0.14	-0.06	0.01	0.01	0.13	0.00	0.07			
20	6	-0.11	0.00	-0.07	0.06	-0.01	0.06	-0.06	0.02	-0.07			
21	1	-0.09	-0.06	-0.10	0.03	0.06	0.10	-0.02	-0.09	-0.14			
22	6	-0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.02	-0.03	0.03	-0.04	0.05			
23	1	0.02	-0.07	0.17	-0.02	0.05	-0.06	0.00	-0.07	0.00			
24	1	-0.09	0.04	-0.01	-0.01	0.04	-0.05	0.08	-0.11	0.10			
25	1	-0.10	0.05	0.02	0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.04	-0.01			
26	6	0.02	0.13	0.00	-0.01	0.20	0.01	-0.06	0.04	0.01			
27	1	0.05	0.05	0.02	0.10	0.37	-0.14	0.06	0.18	-0.13			
28	1	0.05	0.14	0.02	-0.20	0.09	-0.14	-0.21	-0.04	-0.12			
29	6	0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.04			
30	1	0.03	-0.05	-0.04	0.03	0.03	-0.01	-0.07	-0.05	0.06			
31	1	0.05	-0.10	-0.07	0.01	0.00	0.05	-0.04	0.02	-0.03			
32	6	0.02	0.13	0.14	-0.02	-0.01	-0.01	0.01	-0.06	-0.06			
33	1	0.10	0.25	0.22	-0.01	-0.09	-0.01	-0.07	0.00	-0.11			
34	6	0.05	0.08	-0.08	-0.02	0.00	0.07	0.00	-0.05	-0.05			
35	1	0.19	0.23	-0.22	0.00	-0.07	0.14	-0.14	-0.04	-0.06			
36	6	-0.01	-0.01	-0.04	-0.02	0.01	-0.08	-0.02	-0.01	-0.04			
37	1	-0.02	0.02	-0.09	-0.08	0.04	-0.17	0.00	-0.06	0.06			
38	1	-0.02	0.02	-0.01	-0.05	0.04	-0.05	-0.03	-0.05	-0.14			
39	1	-0.02	0.00	-0.02	-0.03	0.04	0.02	-0.02	-0.05	-0.06			
40	6	0.02	0.13	0.02	-0.07	0.09	0.06	-0.06	0.05	0.05			
41	1	-0.04	0.13	0.01	-0.15	0.09	0.02	-0.07	0.12	-0.03			
42	6	0.01	0.00	-0.03	-0.03	-0.05	0.08	-0.04	-0.03	0.07			
43	1	0.06	-0.06	-0.05	-0.10	-0.18	0.22	-0.11	-0.07	0.16			
44	1	0.09	-0.01	-0.17	-0.02	-0.06	-0.12	-0.10	-0.04	0.05			
45	1	0.02	-0.11	0.09	-0.06	-0.13	0.04	-0.06	0.00	-0.04			
46	6	0.03	-0.04	-0.05	0.09	-0.01	-0.08	0.04	0.00	-0.03			
47	1	0.06	0.00	-0.13	0.04	0.00	-0.05	0.03	-0.01	-0.01			
48	6	0.00	-0.06	-0.02	0.06	-0.14	-0.03	0.04	-0.05	-0.02			
49	1	0.06	0.07	-0.01	0.14	-0.12	0.05	0.05	-0.19	0.04			
50	1	0.02	-0.14	-0.11	-0.09	-0.20	-0.13	-0.08	0.03	0.05			

51	6	-0.08	-0.04	0.05	0.02	-0.11	0.03	0.08	-0.02	-0.06
52	1	-0.07	-0.08	0.02	0.00	-0.18	-0.05	0.05	-0.02	-0.09
53	6	0.04	0.00	-0.02	-0.01	0.03	0.02	-0.05	0.01	0.05
54	1	0.07	0.00	-0.02	-0.02	0.04	0.05	-0.11	0.02	0.10
55	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.02
56	1	-0.03	0.00	0.06	0.01	-0.03	-0.01	0.05	-0.01	-0.06
57	6	0.03	0.01	-0.02	-0.03	0.02	0.00	-0.05	0.01	0.04
58	1	0.04	0.01	-0.05	-0.10	0.03	0.01	-0.16	0.02	0.15
59	8	0.00	-0.01	0.05	0.04	-0.02	0.00	0.03	-0.05	-0.02
60	8	0.07	0.01	0.00	-0.05	0.06	0.03	0.12	-0.01	-0.06
61	8	-0.04	0.01	0.07	-0.13	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	-0.03
62	6	0.02	0.01	0.03	0.02	0.01	-0.06	0.01	0.04	0.09
63	6	-0.01	0.03	0.00	0.02	-0.06	0.03	0.00	0.11	0.01
64	6	0.02	-0.01	-0.02	-0.04	-0.01	0.04	0.08	0.00	-0.08
65	8	-0.01	-0.03	0.03	0.01	0.01	-0.07	-0.03	-0.10	0.10
66	1	0.03	-0.03	0.00	-0.08	0.04	-0.01	0.08	-0.08	-0.05
67	6	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01
68	1	-0.03	-0.06	-0.01	0.03	0.08	0.01	-0.10	-0.22	-0.04
69	1	-0.01	0.00	0.02	0.01	-0.03	-0.04	-0.04	0.04	0.09
70	1	-0.02	0.00	0.02	0.02	-0.04	-0.05	-0.06	0.05	0.09
71	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.04	-0.01	0.04
72	1	0.01	-0.02	0.00	-0.04	0.06	0.03	0.04	-0.10	-0.06
73	1	0.01	-0.02	-0.01	-0.05	0.08	0.04	-0.03	-0.10	0.02
74	1	-0.04	-0.01	0.05	0.06	0.04	-0.10	-0.16	-0.06	0.18

		58		59		60
		A		A		A
Frequencies --		615.6735		617.9459		632.3475
Red. masses --		3.4293		3.5879		4.2907
Frc consts --		0.7659		0.8072		1.0109
IR Inten --		10.3745		19.3158		14.1346
Raman Activ --		2.8885		4.5248		5.0542
Depolar (P) --		0.4934		0.4201		0.4696
Depolar (U) --		0.6607		0.5917		0.6391

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	-0.02	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	-0.07	-0.05	0.03
2	6	-0.04	-0.03	-0.04	-0.04	-0.03	-0.04	-0.07	-0.05	-0.04
3	6	0.00	0.02	0.06	-0.01	0.03	0.06	-0.08	0.07	0.03
4	6	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.02	-0.01	-0.04	0.17	0.03
5	6	-0.02	-0.03	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.09	-0.03
6	6	-0.01	-0.03	0.01	0.00	-0.03	0.01	0.02	-0.04	-0.03
7	8	-0.03	-0.03	0.04	-0.03	-0.03	0.04	-0.06	-0.06	0.07
8	6	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.03	-0.01	0.02	0.04	-0.04
9	6	0.05	-0.03	0.03	0.04	-0.02	0.03	0.04	-0.03	0.04
10	1	0.06	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.00	0.10	0.09
11	8	0.00	-0.04	-0.02	0.00	-0.03	-0.02	-0.01	-0.07	-0.03
12	6	0.02	-0.02	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.02	0.09	-0.04
13	1	0.04	-0.02	-0.01	0.04	0.00	-0.02	0.10	0.18	-0.13
14	6	0.09	-0.03	-0.11	0.03	-0.02	-0.05	-0.04	0.02	0.07
15	8	0.15	-0.02	-0.11	-0.13	0.03	0.16	-0.02	-0.01	-0.04
16	6	-0.03	0.01	-0.02	-0.03	0.01	-0.02	-0.05	0.01	-0.03
17	1	-0.02	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.02	-0.05	0.06
18	1	-0.03	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.00	-0.08	-0.01	-0.01

19	1	-0.08	0.00	-0.04	-0.07	0.00	-0.03	-0.16	0.00	-0.04
20	6	0.03	-0.03	0.05	0.03	-0.03	0.04	0.06	-0.07	0.09
21	1	0.01	0.02	0.08	0.01	0.01	0.07	0.03	-0.03	0.12
22	6	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.02
23	1	0.01	0.05	0.01	0.01	0.05	0.00	0.04	0.12	-0.05
24	1	-0.04	0.06	-0.05	-0.02	0.06	-0.04	0.02	0.08	-0.05
25	1	0.03	0.01	0.04	0.04	0.00	0.04	0.17	-0.06	0.13
26	6	-0.02	-0.03	0.00	-0.02	-0.02	0.00	-0.03	-0.07	0.00
27	1	0.05	-0.04	-0.03	0.05	-0.01	-0.05	0.02	-0.03	-0.05
28	1	-0.02	-0.08	-0.02	-0.05	-0.08	-0.04	-0.11	-0.07	-0.04
29	6	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.02	-0.02
30	1	0.04	0.03	-0.03	0.04	0.03	-0.03	0.06	0.07	-0.04
31	1	0.03	-0.01	0.02	0.02	-0.01	0.02	0.03	0.02	0.05
32	6	0.03	0.06	0.01	0.03	0.05	0.00	0.08	0.09	-0.04
33	1	0.09	0.06	0.06	0.09	0.06	0.05	0.18	0.06	0.03
34	6	0.04	0.04	-0.03	0.04	0.04	-0.03	0.07	0.07	-0.05
35	1	0.14	0.05	-0.04	0.13	0.04	-0.04	0.20	0.07	-0.05
36	6	-0.02	0.00	-0.06	-0.02	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.03
37	1	0.00	-0.02	-0.02	0.00	-0.03	-0.01	0.07	-0.10	0.18
38	1	-0.01	-0.02	-0.08	-0.01	-0.03	-0.10	0.01	-0.09	-0.19
39	1	-0.02	-0.02	-0.08	-0.02	-0.02	-0.08	0.00	-0.08	-0.11
40	6	0.02	0.09	0.01	0.01	0.08	0.02	-0.03	-0.02	0.03
41	1	0.06	0.17	-0.05	0.04	0.17	-0.05	0.02	0.08	-0.05
42	6	-0.03	-0.01	0.04	-0.02	-0.02	0.04	0.03	0.02	-0.03
43	1	-0.06	0.01	0.05	-0.06	0.00	0.07	0.05	0.08	-0.08
44	1	-0.07	-0.01	0.10	-0.08	-0.01	0.10	0.02	0.02	0.07
45	1	-0.03	0.04	-0.03	-0.03	0.04	-0.03	0.04	0.06	-0.01
46	6	-0.03	-0.02	-0.01	-0.02	-0.02	-0.01	0.07	0.03	0.06
47	1	0.00	-0.02	-0.05	0.00	-0.01	-0.03	0.08	0.01	0.10
48	6	-0.03	0.05	-0.02	-0.02	0.03	-0.02	0.12	-0.07	0.05
49	1	-0.07	-0.14	0.02	-0.05	-0.16	0.01	0.13	0.04	0.02
50	1	-0.06	0.21	0.16	-0.06	0.17	0.14	0.11	-0.19	-0.08
51	6	0.05	0.08	-0.12	0.06	0.06	-0.11	0.03	-0.11	0.09
52	1	0.01	0.13	-0.09	0.03	0.10	-0.09	0.05	-0.16	0.05
53	6	-0.01	-0.03	0.01	-0.13	0.00	0.13	0.04	0.02	-0.06
54	1	-0.13	-0.01	0.12	-0.14	0.00	0.13	0.09	0.01	-0.12
55	6	-0.07	0.01	0.09	0.16	-0.02	-0.15	-0.05	0.00	0.01
56	1	-0.22	0.06	0.22	0.47	-0.05	-0.46	-0.11	-0.02	0.09
57	6	-0.12	0.01	0.15	0.08	-0.02	-0.06	0.00	0.00	-0.03
58	1	-0.38	0.05	0.47	0.19	-0.04	-0.13	0.06	-0.01	-0.16
59	8	-0.01	-0.03	0.02	0.00	-0.03	0.01	0.02	-0.05	-0.03
60	8	-0.04	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.03	-0.04	-0.05
61	8	0.05	-0.02	0.03	0.03	-0.01	0.02	-0.10	0.04	-0.04
62	6	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.07	0.01	0.04
63	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.04	0.01
64	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.05	0.01	-0.04
65	8	0.01	0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	-0.03	0.06
66	1	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	0.03	-0.01	-0.05
67	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
68	1	0.02	0.04	0.01	0.01	0.02	0.00	-0.05	-0.09	-0.01
69	1	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.05	0.06
70	1	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.05	0.05

71	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.01
72	1	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.05	-0.06
73	1	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.06	0.01
74	1	0.03	0.01	-0.03	0.01	0.00	-0.01	-0.08	-0.03	0.07

	61	62	63
	A	A	A
Frequencies --	646.7719	667.6324	685.8912
Red. masses --	3.7982	4.5623	2.6505
Frc consts --	0.9361	1.1981	0.7347
IR Inten --	21.9688	18.4726	10.7183
Raman Activ --	1.4420	1.8119	2.8493
Depolar (P) --	0.6676	0.4305	0.3406
Depolar (U) --	0.8006	0.6019	0.5081

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.03	-0.04	-0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.01
2	6	-0.03	0.02	0.00	0.01	0.06	-0.02	-0.02	0.00	0.01
3	6	0.03	-0.03	-0.03	0.03	-0.01	0.04	0.00	0.01	-0.01
4	6	0.02	-0.07	0.01	0.17	0.02	-0.04	0.02	0.03	-0.01
5	6	0.01	-0.04	0.03	0.05	-0.01	0.00	0.02	-0.07	0.07
6	6	0.01	0.02	0.01	-0.02	-0.04	-0.03	0.09	0.01	0.03
7	8	0.01	0.00	0.00	0.04	0.06	-0.01	-0.01	-0.01	0.01
8	6	0.03	0.05	-0.04	-0.08	-0.08	0.08	0.02	0.00	-0.02
9	6	-0.01	-0.01	0.06	0.14	-0.02	-0.08	-0.02	0.01	0.01
10	1	-0.09	0.15	0.13	0.12	-0.07	-0.07	-0.03	0.02	0.01
11	8	-0.01	-0.10	-0.02	-0.05	0.13	0.03	0.00	-0.02	0.00
12	6	-0.07	-0.03	-0.09	0.23	-0.04	-0.15	-0.01	0.06	0.02
13	1	-0.12	-0.05	-0.07	0.36	-0.02	-0.16	-0.02	0.07	0.00
14	6	-0.02	0.00	0.01	-0.05	0.00	0.04	-0.16	0.02	0.15
15	8	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01
16	6	-0.04	0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
17	1	0.04	-0.04	0.08	-0.13	0.09	-0.12	0.03	-0.01	0.03
18	1	-0.11	-0.01	-0.01	0.04	0.05	-0.03	-0.02	0.00	0.00
19	1	-0.16	0.00	-0.03	0.17	0.02	0.05	-0.01	0.00	0.01
20	6	0.09	-0.02	0.08	0.01	-0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
21	1	0.07	0.05	0.11	0.00	-0.05	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
22	6	-0.03	0.03	-0.05	-0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.01
23	1	0.00	0.06	0.00	-0.02	0.01	-0.02	0.00	0.02	-0.03
24	1	-0.08	0.10	-0.10	-0.02	0.03	-0.04	0.01	0.01	-0.01
25	1	0.01	0.03	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.04	-0.02	0.03
26	6	0.03	0.03	0.00	-0.05	-0.07	0.00	0.01	0.03	0.01
27	1	-0.02	0.00	0.04	-0.01	-0.13	0.00	0.03	0.09	-0.02
28	1	0.08	0.05	0.04	-0.03	-0.06	0.01	-0.03	0.02	-0.02
29	6	0.03	0.01	-0.04	-0.08	0.00	0.13	0.00	0.00	0.00
30	1	0.07	0.06	-0.07	-0.10	-0.05	0.14	0.01	0.00	0.00
31	1	0.03	0.02	0.04	-0.06	-0.07	0.05	0.00	0.01	0.01
32	6	-0.01	0.02	0.02	-0.07	-0.03	0.02	0.03	0.01	-0.04
33	1	0.03	-0.07	0.04	-0.04	0.02	0.06	0.03	-0.01	-0.04
34	6	-0.01	0.03	0.06	-0.01	-0.06	-0.01	0.01	0.02	0.00
35	1	0.08	-0.02	0.11	0.01	-0.11	0.04	0.00	0.00	0.02
36	6	0.02	-0.02	0.11	-0.01	-0.01	-0.04	-0.02	0.01	-0.05
37	1	-0.03	0.01	0.03	-0.14	-0.04	-0.07	-0.04	-0.01	-0.04
38	1	-0.01	0.01	0.12	-0.14	-0.02	-0.19	-0.06	0.00	-0.10

39	1	0.02	0.00	0.18	-0.04	-0.04	0.20	-0.03	-0.02	0.01
40	6	0.02	-0.03	-0.02	0.00	0.06	0.02	-0.01	0.00	0.01
41	1	-0.01	-0.09	0.04	0.04	0.12	-0.03	-0.03	0.02	-0.01
42	6	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.01	-0.03	0.00	-0.02	0.04
43	1	-0.02	-0.04	0.03	0.04	0.07	-0.09	-0.12	-0.09	0.19
44	1	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.02	0.07	-0.12	-0.03	0.01
45	1	-0.01	-0.02	-0.01	0.03	0.07	-0.03	-0.04	0.04	-0.15
46	6	-0.03	0.00	-0.04	-0.04	-0.05	0.01	-0.04	-0.04	-0.11
47	1	-0.05	0.00	-0.03	-0.06	-0.02	0.00	-0.04	-0.03	-0.12
48	6	-0.06	0.04	-0.02	-0.02	0.02	0.00	-0.06	0.03	-0.07
49	1	-0.06	0.03	-0.01	-0.02	-0.04	0.02	-0.05	-0.19	0.03
50	1	-0.06	0.06	0.00	-0.01	0.08	0.07	-0.18	0.18	0.09
51	6	-0.03	0.04	-0.01	-0.01	0.04	-0.02	0.05	0.07	-0.06
52	1	-0.02	0.06	0.02	0.02	0.06	0.01	0.18	0.12	0.04
53	6	0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.01	-0.02	0.07	-0.02	-0.07
54	1	0.02	-0.01	-0.01	0.07	-0.02	-0.07	0.22	-0.04	-0.22
55	6	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.03	0.01	0.03
56	1	-0.01	0.01	0.01	-0.04	0.02	0.05	-0.14	0.03	0.14
57	6	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
58	1	0.04	0.00	-0.01	0.12	-0.02	-0.10	0.43	-0.06	-0.43
59	8	-0.01	0.03	0.01	-0.01	-0.03	0.01	-0.01	-0.02	-0.01
60	8	0.03	0.08	-0.08	-0.08	-0.01	-0.04	0.01	-0.01	0.01
61	8	0.06	-0.02	0.00	-0.07	0.03	0.07	0.03	-0.06	0.04
62	6	0.02	0.10	-0.02	-0.09	0.03	-0.02	0.00	-0.02	0.02
63	6	0.06	0.11	0.11	0.05	0.03	0.05	-0.02	-0.02	-0.02
64	6	0.10	0.00	-0.09	0.06	0.01	-0.05	-0.02	0.00	0.02
65	8	-0.02	-0.14	-0.03	0.02	-0.04	-0.01	0.00	0.01	0.03
66	1	-0.07	-0.04	-0.20	-0.05	0.03	-0.13	0.03	0.00	0.05
67	6	-0.01	-0.05	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	-0.17	-0.32	-0.08	-0.08	-0.12	-0.03	0.03	0.06	0.02
69	1	-0.07	0.08	0.14	-0.03	0.08	0.08	0.01	-0.03	-0.03
70	1	-0.09	0.05	0.09	-0.04	0.05	0.05	0.02	-0.01	-0.02
71	6	-0.11	0.03	0.14	-0.04	0.01	0.05	0.02	-0.01	-0.03
72	1	-0.01	-0.07	-0.09	0.02	-0.04	-0.08	0.01	0.01	0.01
73	1	-0.26	-0.05	0.20	-0.15	-0.02	0.10	0.06	0.00	-0.05
74	1	-0.25	-0.02	0.19	-0.11	-0.01	0.05	0.05	0.00	-0.03

64

65

66

A

A

A

Frequencies --	696.5234	703.0093	723.4458
Red. masses --	4.8042	3.5384	3.0339
Frc consts --	1.3732	1.0303	0.9356
IR Inten --	40.8623	5.4725	18.8683
Raman Activ --	2.2292	2.4609	4.4984
Depolar (P) --	0.7456	0.2016	0.4815
Depolar (U) --	0.8542	0.3356	0.6500

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

7	8	0.03	0.06	-0.04	0.01	0.03	-0.02	0.05	0.03	0.02
8	6	0.03	0.07	-0.02	-0.01	0.05	0.03	0.01	0.03	0.00
9	6	-0.01	-0.04	0.07	-0.02	-0.04	0.03	-0.07	0.01	-0.05
10	1	-0.02	-0.07	0.07	-0.01	-0.04	0.02	-0.17	0.07	0.01
11	8	-0.05	-0.17	-0.01	0.01	-0.06	-0.01	0.01	-0.04	-0.01
12	6	0.04	0.21	0.04	-0.05	-0.11	0.00	-0.02	0.03	-0.11
13	1	0.10	0.33	-0.08	-0.09	-0.16	0.05	0.01	0.01	-0.08
14	6	0.02	-0.01	-0.04	-0.06	0.01	0.08	0.01	0.00	-0.01
15	8	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
16	6	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.05	-0.01	0.04
17	1	0.06	-0.05	0.05	-0.02	-0.01	-0.03	0.10	-0.01	0.11
18	1	0.04	-0.07	0.06	0.05	-0.05	0.03	-0.03	0.01	0.03
19	1	-0.11	-0.03	-0.07	-0.05	-0.02	-0.08	0.01	0.00	0.07
20	6	0.01	0.07	-0.02	0.03	0.07	-0.01	0.04	-0.03	0.04
21	1	0.01	0.12	0.00	0.03	0.09	-0.01	0.05	-0.07	0.01
22	6	-0.02	0.03	-0.07	0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.03
23	1	0.01	-0.13	0.19	0.01	-0.12	0.13	0.07	0.03	0.14
24	1	-0.15	0.03	-0.03	-0.04	-0.06	0.07	-0.09	0.12	-0.06
25	1	-0.24	0.13	-0.17	-0.17	0.08	-0.14	0.05	0.01	0.11
26	6	0.00	0.03	0.00	-0.09	-0.08	0.01	-0.03	-0.03	0.00
27	1	-0.01	-0.02	0.03	0.04	-0.04	-0.08	-0.01	-0.05	0.00
28	1	0.02	0.07	0.03	-0.16	-0.16	-0.06	-0.02	-0.03	0.00
29	6	0.01	0.04	-0.06	0.02	0.02	-0.06	0.00	0.01	0.00
30	1	0.05	0.09	-0.08	0.03	0.03	-0.06	0.00	0.00	-0.01
31	1	-0.02	0.13	0.07	0.02	0.04	-0.01	-0.01	0.03	-0.01
32	6	-0.07	-0.06	0.12	-0.08	-0.04	0.13	-0.15	0.05	-0.01
33	1	-0.16	-0.10	0.05	-0.12	0.03	0.11	0.08	-0.15	0.14
34	6	-0.08	-0.04	0.06	-0.04	-0.06	-0.02	0.00	-0.05	0.01
35	1	-0.16	0.03	0.00	-0.05	0.04	-0.11	0.44	-0.32	0.27
36	6	0.00	0.02	-0.05	-0.01	0.00	-0.03	0.01	-0.01	0.02
37	1	0.01	-0.09	0.13	0.02	0.01	-0.04	-0.05	-0.03	0.03
38	1	-0.08	-0.05	-0.25	0.05	0.00	0.04	-0.07	-0.02	-0.08
39	1	-0.02	-0.09	0.00	0.00	0.03	-0.10	0.00	-0.04	0.15
40	6	0.01	-0.03	0.04	-0.03	0.12	0.04	0.00	0.02	0.01
41	1	-0.05	-0.06	0.04	0.04	0.23	-0.05	-0.01	0.02	0.00
42	6	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.03	0.00	0.00	-0.02
43	1	0.03	0.00	-0.04	-0.02	0.07	-0.01	0.02	0.03	-0.06
44	1	0.03	0.01	-0.05	-0.07	-0.02	0.22	0.01	0.01	0.01
45	1	0.01	-0.03	0.05	0.00	0.10	-0.04	0.01	0.02	-0.01
46	6	0.01	-0.06	-0.05	-0.01	0.06	0.12	-0.01	0.00	0.02
47	1	0.07	-0.03	-0.13	-0.10	0.05	0.23	-0.04	0.00	0.05
48	6	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.01
49	1	0.06	0.04	0.06	-0.08	-0.17	-0.09	-0.01	0.02	0.00
50	1	0.00	0.01	0.01	0.04	0.01	0.06	0.01	-0.01	0.00
51	6	-0.05	0.02	0.01	0.13	-0.03	-0.05	-0.01	0.00	0.01
52	1	-0.08	0.02	0.00	0.18	-0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.01
53	6	-0.01	-0.01	0.02	0.03	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
54	1	-0.03	0.00	0.05	0.09	-0.01	-0.12	-0.01	0.00	0.00
55	6	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.04	0.01	-0.03	-0.09	0.00	0.08	0.02	0.00	-0.02
57	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01
58	1	-0.09	0.02	0.12	0.27	-0.05	-0.30	-0.05	0.01	0.05



59	8	-0.10	-0.10	0.02	-0.03	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.00
60	8	-0.01	-0.06	-0.03	0.00	0.03	0.01	0.03	0.06	-0.01
61	8	-0.04	-0.01	0.06	0.00	0.05	-0.07	-0.02	0.02	0.00
62	6	-0.13	-0.02	0.02	0.06	0.01	-0.02	0.14	-0.01	0.08
63	6	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01	-0.05	-0.01	-0.04
64	6	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.04
65	8	0.03	0.00	0.05	-0.01	0.00	-0.03	-0.05	-0.01	0.07
66	1	-0.02	0.04	-0.03	0.00	-0.02	0.00	0.12	-0.08	0.20
67	6	0.01	0.03	0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.01
68	1	0.00	0.04	0.01	-0.01	-0.03	-0.01	0.09	0.10	0.04
69	1	0.01	0.05	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.17	-0.11
70	1	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.05	-0.05	-0.04
71	6	0.03	-0.02	-0.04	-0.02	0.01	0.03	0.04	-0.01	-0.07
72	1	0.03	-0.02	-0.06	-0.02	0.01	0.03	0.00	0.02	0.08
73	1	0.00	-0.02	-0.02	-0.02	0.01	0.02	0.18	0.00	-0.13
74	1	0.02	-0.02	-0.03	-0.02	0.01	0.03	0.11	0.01	-0.04

	67	68	69
	A	A	A
Frequencies --	732.3236	739.1239	750.9877
Red. masses --	3.3080	1.3881	4.1446
Frc consts --	1.0452	0.4468	1.3772
IR Inten --	0.8362	16.1963	5.0319
Raman Activ --	10.8568	0.0788	4.4818
Depolar (P) --	0.1545	0.7232	0.2789
Depolar (U) --	0.2677	0.8394	0.4361

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.05	0.04
2	6	0.12	-0.07	0.12	0.00	0.00	-0.01	0.08	0.00	-0.05
3	6	0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.12	0.10	-0.01
4	6	0.09	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.16	0.11	0.05
5	6	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.08	-0.02	0.04
6	6	-0.01	-0.02	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.05	0.04	0.03
7	8	-0.04	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.01
8	6	0.01	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.07
9	6	-0.02	0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.06	-0.09	-0.06
10	1	-0.13	0.17	0.08	0.01	-0.01	0.00	0.04	-0.04	-0.04
11	8	-0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00
12	6	-0.02	0.02	-0.11	0.00	-0.01	0.00	0.05	-0.08	-0.12
13	1	-0.04	-0.01	-0.08	0.00	-0.01	0.01	0.29	-0.03	-0.15
14	6	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.03	0.01	0.00	0.00
15	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00
16	6	-0.11	0.02	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.01	-0.02
17	1	-0.10	0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.00	-0.09
18	1	-0.11	0.01	-0.08	0.01	0.00	0.01	0.05	-0.04	0.02
19	1	-0.11	0.02	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.01	-0.08
20	6	0.06	-0.04	0.05	0.00	0.01	0.00	0.09	-0.03	0.04
21	1	0.06	-0.05	0.04	0.00	0.01	0.00	0.09	-0.05	0.03
22	6	-0.07	0.05	-0.11	0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00
23	1	-0.08	0.05	-0.14	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.02	-0.09
24	1	-0.04	0.06	-0.14	0.01	-0.02	0.02	0.09	-0.06	0.05
25	1	-0.04	0.03	-0.08	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.02	-0.02
26	6	-0.02	-0.03	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.07	0.05	0.01

27	1	0.01	-0.06	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.02	0.10	0.01
28	1	-0.01	-0.05	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.02	0.08	0.00
29	6	-0.01	-0.02	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.08	-0.02
30	1	0.01	0.01	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.11	-0.02
31	1	0.01	-0.05	0.06	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	-0.01
32	6	0.14	-0.06	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.07	-0.04	0.15
33	1	-0.08	0.08	-0.15	-0.01	0.01	0.01	-0.16	0.17	0.12
34	6	-0.02	0.07	0.05	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.10	-0.09
35	1	-0.45	0.29	-0.16	0.01	0.00	-0.01	-0.06	0.07	-0.24
36	6	0.02	-0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.05
37	1	-0.08	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.14	-0.06	0.26
38	1	-0.08	-0.01	-0.08	0.00	0.00	-0.01	0.09	-0.07	0.01
39	1	0.00	-0.03	0.19	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.05	-0.20
40	6	0.00	0.05	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.10	0.02
41	1	0.02	0.08	-0.02	0.00	0.03	-0.01	0.02	-0.08	0.00
42	6	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
43	1	0.02	0.04	-0.06	-0.02	0.00	0.02	-0.05	-0.09	0.12
44	1	0.01	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.13
45	1	0.01	0.03	-0.01	0.00	0.02	-0.05	-0.02	-0.03	-0.06
46	6	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.11
47	1	-0.06	0.00	0.06	-0.01	0.00	0.00	0.18	-0.02	-0.21
48	6	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.02	-0.01
49	1	-0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.06	0.05	0.06
50	1	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.00	-0.06	-0.01	-0.04
51	6	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.02
52	1	-0.02	0.00	0.01	0.04	0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.02
53	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
54	1	0.02	0.00	-0.02	0.37	-0.06	-0.38	-0.05	0.01	0.05
55	6	-0.01	0.00	0.01	-0.10	0.02	0.09	0.01	0.00	-0.01
56	1	0.04	-0.01	-0.04	0.48	-0.08	-0.47	-0.05	0.01	0.05
57	6	0.01	0.00	-0.01	0.07	-0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.07	0.01	0.06	-0.33	0.05	0.31	-0.02	0.00	0.00
59	8	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02
60	8	0.01	0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.03	-0.01
61	8	-0.02	0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.09	0.02
62	6	0.14	0.00	0.07	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.02	0.03
63	6	-0.04	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.02
64	6	-0.06	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
65	8	-0.05	-0.02	0.06	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.01
66	1	0.12	-0.09	0.19	0.00	0.00	-0.01	0.13	-0.09	0.13
67	6	-0.02	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01
68	1	0.07	0.07	0.04	0.00	-0.01	0.00	0.03	-0.02	0.02
69	1	0.01	-0.16	-0.10	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.10	-0.04
70	1	0.04	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.02
71	6	0.03	-0.01	-0.05	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.01
72	1	0.00	0.02	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.07
73	1	0.16	0.00	-0.11	-0.01	0.00	0.01	0.08	0.00	-0.04
74	1	0.08	0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.05

	70	71	72
	A	A	A
Frequencies --	765.0018	769.6190	783.7759
Red. masses --	3.2856	4.1455	3.5753

Frc consts	--	1.1329		1.4467		1.2940
IR Inten	--	11.7201		62.4072		11.5031
Raman Activ	--	14.1992		8.3682		4.2390
Depolar (P)	--	0.1084		0.1555		0.3379
Depolar (U)	--	0.1955		0.2692		0.5052

  

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.06	0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.14	-0.12	0.04
2	6	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.02	0.07	0.04	0.00
3	6	0.00	0.05	0.02	0.04	-0.03	-0.02	-0.04	-0.08	0.05
4	6	0.07	-0.02	-0.01	0.03	0.06	0.01	0.05	-0.02	-0.01
5	6	0.05	-0.07	0.11	0.01	0.04	-0.07	0.04	0.00	0.01
6	6	0.12	-0.04	0.04	-0.05	0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.00
7	8	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.03	0.08	0.01
8	6	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.04	0.05	0.00
9	6	0.00	0.00	0.03	0.01	0.01	0.04	-0.04	-0.02	0.00
10	1	0.01	-0.04	0.02	0.05	-0.04	0.01	0.00	0.02	-0.01
11	8	-0.01	-0.04	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.04	-0.04	-0.03
12	6	-0.01	-0.01	0.02	0.02	0.05	0.06	0.00	0.03	0.03
13	1	-0.07	-0.02	0.03	0.01	0.11	0.00	-0.04	0.03	0.03
14	6	0.07	0.00	0.02	-0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
15	8	-0.06	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
16	6	0.02	0.00	0.01	0.02	0.00	0.01	0.10	-0.01	0.07
17	1	0.02	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.01	0.10	-0.10	0.05
18	1	0.04	-0.01	0.02	0.00	0.01	0.00	0.20	-0.10	0.13
19	1	0.00	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.03	-0.01	-0.05	-0.02
20	6	-0.03	0.06	-0.02	-0.04	0.02	-0.03	-0.11	-0.07	0.09
21	1	-0.03	0.09	-0.01	-0.05	0.05	-0.01	-0.14	-0.12	0.10
22	6	0.02	0.00	0.03	0.01	-0.01	0.00	-0.05	-0.01	-0.01
23	1	-0.01	-0.05	-0.01	0.02	-0.03	0.06	-0.03	0.18	-0.18
24	1	0.06	-0.10	0.11	-0.03	0.00	0.01	0.01	0.14	-0.17
25	1	-0.04	-0.01	-0.06	-0.04	0.02	-0.01	0.23	-0.09	0.22
26	6	-0.05	-0.09	0.03	0.02	0.03	-0.01	-0.04	-0.01	-0.04
27	1	0.02	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.01	-0.13	-0.05	0.03
28	1	-0.11	-0.12	-0.02	0.03	0.04	0.01	0.08	0.01	0.03
29	6	0.01	-0.01	-0.02	0.00	-0.04	0.00	0.01	0.19	-0.11
30	1	0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.06	0.02	0.09	0.36	-0.13
31	1	-0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.02	-0.03	0.06	0.14	0.03
32	6	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.02	-0.04	0.00	-0.08	0.04
33	1	0.01	0.02	-0.01	0.06	-0.07	-0.02	-0.19	0.10	-0.09
34	6	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.03	0.03	0.01	-0.08	-0.06
35	1	0.02	0.02	-0.04	0.04	-0.03	0.09	-0.27	0.03	-0.16
36	6	-0.02	0.00	-0.09	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.03
37	1	-0.12	0.01	-0.17	0.02	-0.02	0.04	-0.06	0.01	-0.09
38	1	-0.10	0.03	-0.13	-0.01	-0.01	-0.07	-0.04	0.02	-0.03
39	1	-0.04	0.01	0.08	0.00	-0.02	-0.03	-0.01	0.01	0.07
40	6	-0.02	0.04	0.05	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.05	-0.10
41	1	0.04	0.15	-0.05	-0.04	-0.08	0.03	0.06	0.04	-0.05
42	6	0.07	0.05	-0.13	-0.02	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.00
43	1	-0.04	0.03	-0.02	0.04	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01
44	1	-0.04	0.04	-0.09	0.02	-0.01	0.04	0.01	0.00	0.00
45	1	0.04	0.14	-0.33	0.00	-0.04	0.14	0.00	-0.01	0.02
46	6	-0.03	0.03	-0.06	0.01	-0.05	0.01	-0.01	0.00	0.01

47	1	-0.06	-0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.04	-0.06	0.00	0.06
48	6	-0.10	0.08	0.01	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	-0.04	0.24	0.02	0.05	-0.08	0.03	-0.01	-0.02	0.00
50	1	-0.10	-0.07	-0.16	0.05	0.04	0.08	-0.01	0.00	0.00
51	6	-0.01	-0.02	0.17	-0.03	0.02	-0.06	0.01	0.00	0.01
52	1	0.02	-0.03	0.17	-0.04	0.03	-0.06	0.01	0.01	0.01
53	6	0.00	0.05	-0.02	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
54	1	-0.26	0.08	0.19	0.08	-0.03	-0.04	-0.01	0.00	0.00
55	6	0.02	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
56	1	-0.19	-0.02	0.18	0.05	0.02	-0.05	0.00	0.00	0.00
57	6	0.02	-0.03	-0.04	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.28	0.02	0.18	0.10	0.00	-0.05	-0.02	0.00	0.02
59	8	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.10	0.05	0.06
60	8	-0.03	-0.02	0.02	-0.13	-0.09	0.03	-0.01	-0.02	0.01
61	8	0.01	-0.04	-0.01	-0.03	0.02	0.03	-0.01	0.01	-0.01
62	6	0.07	-0.04	-0.02	0.29	-0.16	-0.03	0.02	-0.03	-0.01
63	6	-0.01	0.02	-0.01	-0.03	0.06	-0.04	0.00	0.00	-0.01
64	6	0.01	0.01	-0.03	0.04	0.02	-0.09	0.01	0.00	-0.02
65	8	-0.01	0.02	-0.03	-0.05	0.08	-0.09	0.00	0.02	-0.02
66	1	0.08	-0.05	0.03	0.37	-0.21	0.20	0.04	-0.02	0.01
67	6	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.02	-0.03	0.01	0.01	0.00
68	1	-0.01	-0.06	0.00	-0.02	-0.23	0.02	-0.01	-0.03	0.00
69	1	-0.01	-0.01	0.02	-0.02	-0.08	0.07	0.00	0.01	0.02
70	1	0.00	0.06	0.05	0.03	0.24	0.21	0.00	0.04	0.03
71	6	-0.04	0.01	0.04	-0.13	0.04	0.15	-0.02	0.00	0.02
72	1	-0.03	0.00	0.05	-0.10	-0.01	0.21	-0.02	0.00	0.03
73	1	-0.01	-0.01	0.02	0.02	-0.03	0.06	-0.01	0.00	0.02
74	1	-0.05	0.01	0.08	-0.17	0.02	0.30	-0.03	0.00	0.04

		73		74		75
		A		A		A
Frequencies --		796.7954		802.8851		810.0882
Red. masses --		3.7833		1.7632		3.7229
Frc consts --		1.4152		0.6697		1.4394
IR Inten --		15.3191		51.1580		0.7347
Raman Activ --		3.7433		3.2321		13.0197
Depolar (P) --		0.6559		0.6289		0.6108
Depolar (U) --		0.7922		0.7722		0.7584

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

15	8	0.03	0.00	0.02	0.02	-0.01	-0.03	0.02	0.00	0.01
16	6	0.05	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
17	1	0.04	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
18	1	0.14	-0.06	0.07	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
19	1	0.00	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	-0.02
20	6	-0.08	0.14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.08	0.03
21	1	-0.09	0.23	0.04	-0.01	0.01	0.00	0.04	-0.16	-0.02
22	6	0.03	0.01	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.01
23	1	-0.11	-0.05	-0.22	0.00	0.00	0.00	0.03	0.13	-0.07
24	1	0.28	-0.31	0.31	0.00	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.13
25	1	-0.01	-0.07	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.19	-0.08	0.19
26	6	0.04	0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.13	-0.01	0.11
27	1	0.06	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.51	0.06	-0.13
28	1	0.01	0.02	-0.01	0.00	-0.03	0.00	-0.15	-0.19	-0.13
29	6	-0.01	0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.01	0.05	-0.02
30	1	0.03	0.10	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.03	0.08	-0.03
31	1	-0.02	0.10	0.07	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	-0.01
32	6	0.04	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03
33	1	-0.01	0.13	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.06	-0.05
34	6	0.04	-0.04	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.01
35	1	-0.03	0.07	-0.20	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.04	-0.04
36	6	0.03	-0.01	0.04	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.02
37	1	-0.11	0.02	-0.10	-0.03	0.00	-0.03	-0.03	0.06	-0.11
38	1	-0.07	0.02	0.01	-0.02	0.01	-0.03	0.00	0.04	0.10
39	1	0.01	0.01	0.26	-0.01	0.00	0.03	0.01	0.05	0.07
40	6	0.01	-0.05	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.22
41	1	0.00	-0.04	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.07	0.20	0.01
42	6	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.02	-0.05	0.02	0.00	-0.04
43	1	0.03	0.00	-0.02	0.03	0.01	-0.06	0.01	0.08	-0.07
44	1	0.03	0.00	0.00	0.04	0.02	-0.09	-0.02	0.01	0.10
45	1	0.00	-0.03	0.09	0.01	0.00	-0.02	0.03	0.09	-0.10
46	6	0.00	-0.09	0.01	0.01	0.04	-0.01	-0.01	-0.06	0.01
47	1	-0.08	-0.02	-0.01	0.03	0.00	0.02	0.00	-0.02	-0.05
48	6	0.02	-0.03	0.00	-0.03	0.03	0.02	0.00	0.01	0.02
49	1	0.07	-0.01	0.05	-0.01	0.13	0.00	0.02	0.08	0.02
50	1	0.07	0.03	0.07	-0.02	-0.06	-0.08	0.09	0.01	0.04
51	6	-0.08	0.04	-0.05	-0.02	-0.03	0.05	-0.06	0.02	-0.02
52	1	-0.12	0.04	-0.07	-0.10	-0.04	0.00	-0.09	0.02	-0.03
53	6	0.00	-0.04	0.01	-0.03	0.02	0.03	-0.01	-0.02	0.01
54	1	0.05	-0.04	0.00	0.17	-0.02	-0.18	0.03	-0.02	0.01
55	6	0.01	0.00	0.02	-0.05	0.01	0.04	0.01	0.00	0.01
56	1	0.03	0.04	-0.03	0.33	-0.07	-0.33	0.00	0.03	0.00
57	6	0.00	0.02	0.02	-0.11	0.01	0.11	0.00	0.02	0.01
58	1	0.10	0.01	-0.03	0.54	-0.09	-0.54	0.06	0.00	-0.02
59	8	-0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.05	-0.10
60	8	-0.01	0.04	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.03
61	8	-0.04	0.04	0.04	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.03	0.02
62	6	0.01	0.04	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.02
63	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
64	6	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01
65	8	-0.01	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.02
66	1	0.00	-0.01	0.04	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.03	-0.06

67	6	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
68	1	0.02	0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01
69	1	0.00	-0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.03
70	1	0.01	-0.05	-0.04	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.01
71	6	0.02	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02
72	1	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
73	1	0.04	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.03
74	1	0.03	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00

76			77			78		
A			A			A		
Frequencies --			831.3156			843.0694		
Red. masses --			4.1813			2.3243		
Frc consts --			1.7025			0.9733		
IR Inten --			15.1706			32.2094		
Raman Activ --			6.9360			5.1332		
Depolar (P) --			0.7493			0.3503		
Depolar (U) --			0.8567			0.5189		

Atom		AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.05	-0.03	-0.08	-0.10	
2	6	-0.01	0.00	0.00	0.18	-0.09	0.11	-0.01	0.02	0.02	
3	6	0.00	0.04	-0.06	-0.01	0.02	-0.03	0.03	0.00	-0.09	
4	6	0.05	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.04	0.01	-0.02	
5	6	-0.06	-0.04	0.28	-0.02	0.00	0.00	-0.10	-0.04	-0.01	
6	6	-0.14	0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.05	-0.02	-0.03	
7	8	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.01	-0.02	0.01	0.01	0.01	
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00	-0.02	-0.07	-0.01	-0.03	
9	6	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.16	-0.04	0.13	
10	1	0.01	-0.02	0.00	0.03	0.02	-0.01	0.24	-0.09	0.08	
11	8	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.00	-0.02	-0.02	0.03	0.00	
12	6	0.02	0.03	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.00	-0.05	
13	1	0.04	0.04	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	-0.06	0.04	-0.11	
14	6	-0.10	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.01	0.05	
15	8	0.04	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	-0.04	
16	6	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.03	0.06	0.08	-0.02	0.08	
17	1	-0.01	0.00	-0.01	0.08	0.01	0.07	-0.03	0.01	-0.07	
18	1	0.02	0.00	0.01	0.02	0.01	0.03	0.22	-0.02	0.07	
19	1	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.01	0.12	0.18	-0.03	0.04	
20	6	-0.01	0.01	0.00	-0.04	-0.03	0.03	-0.14	0.04	-0.06	
21	1	0.00	0.02	0.00	-0.10	-0.07	0.07	-0.23	0.25	0.09	
22	6	0.01	-0.01	0.02	-0.05	0.05	-0.07	0.05	-0.06	0.05	
23	1	0.00	0.01	-0.03	-0.11	0.02	-0.19	0.11	-0.04	0.20	
24	1	0.04	-0.02	0.02	0.06	-0.06	0.00	-0.09	0.10	-0.06	
25	1	0.03	-0.02	0.02	-0.05	0.01	-0.13	0.04	-0.01	0.14	
26	6	0.03	-0.03	0.00	0.02	0.00	0.02	0.06	0.03	0.02	
27	1	0.08	-0.13	0.02	0.09	0.02	-0.03	0.17	-0.04	-0.01	
28	1	0.05	-0.05	0.00	-0.04	-0.05	-0.03	0.01	0.01	-0.02	
29	6	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.03	0.00	-0.01	0.01	-0.04	
30	1	0.00	0.02	0.00	0.02	0.10	-0.02	0.02	0.10	-0.04	
31	1	-0.01	0.01	0.01	0.02	-0.05	0.03	0.03	-0.06	0.00	
32	6	0.01	0.00	0.00	-0.06	0.05	-0.06	0.06	-0.02	-0.05	
33	1	-0.02	0.03	-0.02	0.45	-0.32	0.29	-0.05	0.00	-0.14	
34	6	0.01	-0.01	0.00	-0.09	0.06	-0.07	0.00	0.03	0.06	

35	1	-0.03	0.02	-0.02	0.40	-0.29	0.26	-0.19	0.05	0.05
36	6	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.07
37	1	-0.12	0.01	-0.14	0.01	0.01	0.00	0.05	-0.01	0.11
38	1	-0.11	0.04	-0.09	0.01	0.00	0.03	0.04	-0.02	0.07
39	1	-0.02	0.01	0.18	0.00	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.00
40	6	0.03	-0.02	0.05	0.00	0.01	0.03	0.00	0.04	0.07
41	1	0.02	0.00	0.02	-0.01	0.05	-0.01	-0.08	0.04	0.03
42	6	-0.03	0.03	-0.05	0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.01
43	1	0.10	0.04	-0.19	0.00	0.01	-0.01	0.04	0.03	-0.07
44	1	0.11	0.03	-0.12	-0.01	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.06
45	1	0.00	-0.08	0.18	0.01	0.02	-0.03	0.00	-0.02	0.10
46	6	0.12	0.26	0.05	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.03	0.01
47	1	-0.09	0.12	0.43	0.02	0.00	-0.01	0.14	-0.01	-0.07
48	6	0.06	-0.04	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.04	0.00
49	1	0.06	-0.28	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.05	-0.10
50	1	-0.28	0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.01
51	6	-0.06	-0.05	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.03	0.03
52	1	-0.15	-0.01	-0.12	-0.01	0.00	-0.01	0.17	-0.01	0.08
53	6	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.01
54	1	0.07	-0.04	0.04	0.01	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.07
55	6	0.03	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02
56	1	-0.10	0.09	0.09	-0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.07	0.06
57	6	0.03	0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00
58	1	-0.08	0.07	0.12	-0.01	0.00	0.01	-0.05	-0.04	0.02
59	8	-0.03	-0.03	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02
60	8	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.04	-0.09
61	8	0.04	-0.09	-0.07	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.02	0.00
62	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.06	0.03
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.02
64	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.02
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.03
66	1	0.03	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.01	0.10	-0.05	0.14
67	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	-0.01
68	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.03	0.03
69	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.16	-0.09
70	1	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.04	-0.02
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.03
72	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.03	-0.05
73	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.02	-0.05
74	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01

79

80

81

A

A

A

Frequencies --	862.9942	870.9888	886.3304
Red. masses --	3.1444	1.3412	2.0080
Frc consts --	1.3798	0.5995	0.9294
IR Inten --	10.4041	1.8110	9.5352
Raman Activ --	13.1553	2.3985	6.1863
Depolar (P) --	0.2230	0.6567	0.7498
Depolar (U) --	0.3647	0.7928	0.8570

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.06	0.08	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.02
2	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00

3	6	0.03	0.03	-0.07	0.00	0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.01
4	6	0.04	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.05	0.00
5	6	-0.04	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.09	0.01
6	6	-0.11	0.02	-0.07	0.00	0.00	-0.01	0.05	-0.02	-0.02
7	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
8	6	0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
9	6	-0.05	0.04	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.03
10	1	-0.10	0.05	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.03	0.03	-0.03
11	8	0.01	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.02
12	6	0.03	0.06	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.06	0.00
13	1	0.09	0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.07	0.07	-0.01
14	6	0.10	-0.02	0.07	-0.02	0.00	0.02	-0.02	0.03	-0.01
15	8	-0.07	0.02	-0.07	-0.01	0.00	0.00	0.05	-0.05	0.06
16	6	-0.03	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
18	1	-0.07	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
19	1	-0.07	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
20	6	0.05	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01
21	1	0.10	-0.11	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.03	0.00
22	6	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
23	1	-0.10	0.06	-0.22	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.04
24	1	0.13	-0.10	0.08	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03	0.02
25	1	0.03	-0.04	-0.05	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.03
26	6	0.02	0.05	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02
27	1	-0.04	-0.18	0.08	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.02
28	1	0.12	0.22	0.07	0.01	0.01	0.00	0.00	0.09	0.02
29	6	-0.02	0.02	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.04
30	1	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.03
31	1	-0.03	0.06	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.06
32	6	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.01	0.03	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01
34	6	0.01	-0.02	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
35	1	0.05	-0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.02
36	6	0.02	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00
37	1	-0.06	0.04	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.08
38	1	-0.02	0.03	0.07	0.00	0.00	0.00	0.05	0.02	0.13
39	1	0.01	0.04	0.13	0.00	0.00	0.01	0.00	0.05	-0.03
40	6	0.02	-0.02	0.06	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.02	0.01
41	1	-0.02	-0.04	0.07	0.00	0.01	0.00	-0.04	0.00	0.02
42	6	-0.07	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.02	0.03
43	1	0.12	-0.02	-0.12	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.03	0.14
44	1	0.12	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.02	-0.09	-0.03	0.07
45	1	-0.02	-0.17	0.39	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.05	-0.16
46	6	-0.04	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.05
47	1	0.03	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.02	0.14	-0.01	-0.05
48	6	-0.02	0.03	-0.03	0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.01	0.07
49	1	-0.16	-0.19	-0.11	0.00	-0.05	0.00	-0.11	0.22	-0.11
50	1	-0.10	0.08	0.01	-0.02	0.02	0.01	0.18	-0.11	-0.04
51	6	0.17	-0.02	0.06	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03
52	1	0.26	0.05	0.16	0.03	0.01	0.02	0.01	-0.11	-0.11
53	6	0.01	0.10	0.01	0.10	-0.02	-0.10	-0.02	0.00	-0.03
54	1	-0.03	0.07	-0.09	-0.58	0.11	0.58	0.01	0.03	0.04



55	6	-0.01	0.02	-0.02	-0.06	0.01	0.06	-0.04	-0.03	-0.03
56	1	0.01	-0.13	0.07	0.37	-0.06	-0.37	-0.06	0.08	-0.09
57	6	-0.01	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	0.00
58	1	-0.04	-0.09	0.01	0.04	-0.01	-0.04	-0.05	0.07	-0.05
59	8	-0.02	-0.04	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.02	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.01
61	8	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	-0.06
62	6	-0.02	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.00	-0.01
63	6	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.03	0.03
64	6	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.04
65	8	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
66	1	0.06	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.45	-0.25	0.37
67	6	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	-0.03
68	1	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.05	0.08
69	1	0.00	0.03	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.26	-0.06
70	1	0.00	0.08	0.06	0.00	0.00	0.00	0.11	0.22	0.17
71	6	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01
72	1	-0.04	0.02	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.04
73	1	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
74	1	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02

		82		83		84
		A		A		A
Frequencies --	892.2404		892.8982		897.6559	
Red. masses --	2.2877		3.8788		2.8466	
Frc consts --	1.0730		1.8220		1.3514	
IR Inten --	16.1490		30.4383		6.9061	
Raman Activ --	13.2213		1.8183		4.3578	
Depolar (P) --	0.7494		0.7486		0.7130	
Depolar (U) --	0.8568		0.8563		0.8324	

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

23	1	0.03	0.01	0.02	-0.07	-0.06	0.03	0.00	0.01	-0.03
24	1	0.02	0.01	0.00	-0.11	0.00	-0.02	0.04	-0.02	0.02
25	1	0.06	-0.04	0.07	-0.22	0.14	-0.22	0.04	-0.03	0.04
26	6	0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.00	0.09	0.00	0.03	-0.06
27	1	0.02	0.03	-0.02	0.13	0.17	-0.08	-0.11	-0.09	0.06
28	1	0.02	-0.10	-0.02	-0.21	-0.14	-0.08	0.08	0.20	0.06
29	6	0.02	-0.03	0.00	-0.06	0.07	0.01	0.00	0.00	0.02
30	1	-0.02	-0.09	0.02	0.05	0.23	-0.03	-0.02	-0.03	0.02
31	1	-0.01	0.03	-0.04	0.03	-0.07	0.12	-0.02	0.03	0.00
32	6	-0.02	0.00	0.02	0.06	-0.01	-0.05	-0.01	0.00	0.01
33	1	0.02	-0.05	0.05	-0.07	0.14	-0.13	0.01	-0.02	0.02
34	6	-0.02	0.00	-0.01	0.05	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00
35	1	0.06	-0.02	0.02	-0.17	0.06	-0.05	0.02	-0.01	0.00
36	6	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.03	0.01	-0.01	0.00
37	1	-0.01	0.02	-0.04	0.09	-0.02	0.08	-0.03	0.01	-0.05
38	1	0.01	0.01	0.06	0.06	-0.03	0.00	-0.02	0.01	0.01
39	1	0.00	0.03	0.00	-0.01	-0.01	-0.21	0.00	0.01	0.07
40	6	0.00	0.03	-0.04	0.00	-0.08	0.03	-0.01	0.03	0.01
41	1	0.05	0.07	-0.06	-0.14	-0.21	0.11	0.01	0.04	0.00
42	6	0.01	0.01	-0.03	0.01	0.01	-0.04	0.02	-0.03	0.05
43	1	0.02	0.02	-0.04	0.01	0.04	-0.05	-0.11	-0.06	0.19
44	1	0.02	0.01	-0.03	0.00	0.02	0.00	-0.11	-0.04	0.08
45	1	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.03	-0.03	-0.02	0.04	-0.18
46	6	0.01	-0.01	-0.02	0.02	0.02	0.01	-0.01	0.02	0.05
47	1	-0.11	0.01	0.06	0.02	0.01	0.02	0.17	0.00	-0.07
48	6	0.02	-0.02	-0.03	0.00	-0.02	-0.01	-0.03	0.00	0.10
49	1	0.10	-0.09	0.08	-0.01	-0.05	-0.02	-0.11	0.30	-0.11
50	1	-0.08	0.05	0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.26	-0.15	-0.04
51	6	-0.04	0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.03	-0.01	-0.05
52	1	-0.06	0.06	0.04	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.15	-0.16
53	6	0.04	-0.06	0.06	0.05	-0.05	0.04	0.05	-0.11	0.06
54	1	-0.03	-0.09	-0.04	-0.07	-0.08	0.01	-0.05	-0.15	-0.02
55	6	0.08	0.05	0.07	0.07	0.05	0.07	0.10	0.05	0.09
56	1	0.11	-0.09	0.14	0.12	-0.09	0.11	0.13	-0.07	0.15
57	6	-0.03	-0.05	-0.02	-0.02	-0.04	-0.02	-0.03	-0.02	-0.03
58	1	0.11	-0.08	0.11	0.09	-0.07	0.11	0.13	-0.06	0.14
59	8	0.02	-0.01	0.05	-0.03	0.08	-0.14	0.01	-0.03	0.03
60	8	0.02	0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00
61	8	-0.01	-0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.07	-0.08
62	6	-0.09	0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.06	-0.03	0.01
63	6	0.05	-0.03	0.04	0.01	-0.01	0.01	-0.03	0.02	-0.03
64	6	-0.03	0.02	-0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.02	0.02
65	8	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01
66	1	0.48	-0.25	0.40	0.09	-0.05	0.07	-0.29	0.15	-0.25
67	6	-0.04	0.02	-0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.01	0.02
68	1	0.10	-0.04	0.09	0.02	-0.01	0.02	-0.06	0.02	-0.05
69	1	-0.01	-0.30	-0.08	0.00	-0.05	-0.01	0.00	0.19	0.05
70	1	0.12	0.21	0.16	0.02	0.04	0.03	-0.07	-0.13	-0.09
71	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
73	1	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
74	1	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

			85			86			87		
			A			A			A		
Frequencies --			917.3279			924.8345			933.4560		
Red. masses --			3.0276			2.4609			2.3695		
Frc consts --			1.5011			1.2401			1.2165		
IR Inten --			16.3893			53.3900			35.1689		
Raman Activ --			6.5524			2.0903			4.3679		
Depolar (P) --			0.7435			0.2313			0.5275		
Depolar (U) --			0.8529			0.3757			0.6907		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6		0.01	-0.01	0.05	0.00	0.00	-0.01	0.06	-0.01	-0.06
2	6		-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01
3	6		0.07	0.08	0.03	0.00	-0.01	0.01	-0.05	0.13	-0.03
4	6		0.06	0.07	0.02	0.01	0.05	-0.06	-0.02	-0.01	0.01
5	6		0.04	-0.05	0.03	-0.03	0.00	0.00	0.06	0.01	0.01
6	6		0.01	0.03	-0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.06	0.01
7	8		0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
8	6		-0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.01	-0.07	-0.03	0.00
9	6		-0.05	-0.11	0.06	-0.03	-0.02	0.03	0.03	0.04	-0.02
10	1		0.00	-0.22	0.02	-0.14	0.00	0.09	0.05	0.17	-0.01
11	8		-0.01	0.13	0.05	-0.02	0.05	0.05	0.04	-0.05	-0.05
12	6		-0.07	-0.08	0.06	-0.01	-0.07	-0.09	-0.03	-0.03	-0.01
13	1		-0.08	-0.08	0.06	0.01	-0.13	-0.02	-0.11	-0.07	0.03
14	6		0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
15	8		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6		0.01	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.02	0.02	-0.02	0.05
17	1		0.02	0.00	0.02	0.02	-0.02	0.01	-0.09	0.03	-0.10
18	1		-0.02	0.01	-0.01	0.04	-0.02	0.03	0.14	0.00	0.03
19	1		0.02	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.16	-0.02	0.03
20	6		0.01	-0.04	0.00	-0.02	0.02	0.02	0.01	-0.03	0.00
21	1		-0.02	-0.08	0.02	-0.05	0.05	0.04	-0.04	-0.01	0.04
22	6		-0.03	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.02	-0.02
23	1		-0.05	0.03	-0.08	0.01	-0.01	0.04	0.11	-0.09	0.24
24	1		0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.14	0.08	-0.06
25	1		0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	-0.09	0.07	-0.02
26	6		-0.04	0.00	-0.10	0.00	0.01	0.00	-0.05	-0.06	-0.09
27	1		-0.19	-0.22	0.10	0.01	0.01	0.00	-0.22	-0.23	0.09
28	1		0.05	0.30	0.10	-0.01	0.02	0.00	0.09	0.17	0.10
29	6		0.07	-0.04	-0.14	0.03	-0.04	-0.09	-0.09	0.06	0.06
30	1		0.05	0.00	-0.11	0.04	0.04	-0.07	0.04	0.21	0.00
31	1		0.11	-0.14	-0.16	0.06	-0.11	-0.04	0.00	-0.08	0.17
32	6		-0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.04
33	1		0.00	0.05	0.04	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.05
34	6		0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.02	0.04
35	1		0.05	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.10	0.01	0.05
36	6		0.02	0.04	-0.05	0.04	0.03	0.04	-0.01	-0.01	0.00
37	1		-0.06	-0.07	0.08	-0.02	-0.08	0.18	0.01	0.02	-0.03
38	1		-0.13	-0.02	-0.33	-0.09	-0.03	-0.21	0.02	0.00	0.04
39	1		-0.01	-0.10	0.12	0.01	-0.10	0.18	0.00	0.02	-0.06
40	6		0.03	-0.07	0.08	-0.01	0.00	0.00	0.04	-0.03	0.05
41	1		0.08	-0.04	0.06	-0.02	-0.01	0.00	0.23	0.13	-0.05
42	6		-0.02	0.00	0.06	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.05	0.04

43	1	-0.01	-0.10	0.10	-0.02	0.00	0.02	-0.03	-0.17	0.19
44	1	0.03	0.00	-0.11	-0.03	-0.01	0.04	0.04	0.03	-0.31
45	1	-0.04	-0.11	0.13	0.00	0.01	-0.03	-0.05	-0.15	0.06
46	6	-0.03	-0.02	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.02	-0.03	-0.03
47	1	-0.08	0.00	0.02	0.13	-0.01	-0.06	-0.23	0.02	0.07
48	6	0.00	-0.02	0.03	-0.02	0.02	0.02	0.03	-0.05	-0.01
49	1	0.00	0.08	-0.01	-0.04	0.06	-0.03	0.12	-0.04	0.09
50	1	0.11	-0.05	0.01	0.01	-0.03	-0.04	0.02	-0.01	0.03
51	6	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.02	-0.01	-0.02	0.05	0.02
52	1	0.02	-0.03	-0.03	0.03	-0.05	-0.03	-0.02	0.04	0.02
53	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
54	1	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.03
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01
59	8	-0.02	-0.02	-0.05	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	0.02
60	8	0.00	-0.01	0.00	0.05	0.07	0.04	0.01	0.02	0.01
61	8	0.00	0.05	-0.04	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.02	-0.01
62	6	-0.04	0.06	-0.02	-0.06	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00
63	6	0.03	0.04	0.04	-0.03	-0.12	-0.04	-0.01	-0.03	-0.01
64	6	-0.02	0.03	0.02	0.02	-0.07	-0.08	0.00	-0.01	-0.02
65	8	0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
66	1	0.17	-0.03	0.18	0.01	-0.18	-0.06	0.00	-0.04	-0.02
67	6	-0.05	-0.05	-0.02	0.07	0.14	0.02	0.02	0.03	0.00
68	1	0.07	0.04	0.04	-0.07	-0.14	-0.01	-0.02	-0.03	0.00
69	1	0.00	-0.22	-0.13	-0.01	0.25	0.24	0.00	0.06	0.05
70	1	0.06	-0.05	-0.03	-0.04	0.31	0.22	-0.01	0.07	0.05
71	6	0.03	0.02	-0.01	-0.05	-0.06	0.02	-0.01	-0.02	0.00
72	1	0.10	-0.06	-0.13	-0.24	0.16	0.29	-0.06	0.04	0.08
73	1	-0.03	-0.05	0.00	0.04	0.14	0.03	0.02	0.04	0.00
74	1	-0.08	-0.02	0.06	0.23	0.04	-0.20	0.07	0.01	-0.05

		88		89		90
		A		A		A
Frequencies --		944.6300		955.2738		959.3293
Red. masses --		3.0138		2.0619		2.2075
Frc consts --		1.5845		1.1086		1.1970
IR Inten --		55.3146		11.9495		37.8196
Raman Activ --		7.8419		6.7222		4.4382
Depolar (P) --		0.2732		0.1666		0.1804
Depolar (U) --		0.4292		0.2856		0.3056

	Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.00	-0.02	-0.02	-0.03	-0.01	-0.06	-0.02	-0.02	
2	6	-0.01	0.00	0.01	0.03	-0.01	0.02	0.04	-0.01	0.03	
3	6	-0.03	0.03	-0.01	-0.01	0.03	0.07	0.03	-0.02	0.07	
4	6	0.05	0.03	-0.03	0.01	-0.03	0.01	0.04	0.05	0.00	
5	6	-0.02	0.13	-0.05	-0.03	-0.02	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	
6	6	0.04	-0.03	-0.07	-0.02	0.07	0.03	-0.01	0.01	-0.01	
7	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	
8	6	-0.03	0.02	0.00	0.03	0.12	0.01	0.06	0.01	0.06	
9	6	-0.06	0.07	-0.04	-0.03	0.04	-0.02	0.04	0.01	0.01	
10	1	-0.10	0.17	0.00	-0.10	0.03	0.02	0.14	0.07	-0.03	

11	8	0.03	-0.04	-0.02	-0.02	0.00	0.03	0.03	-0.07	-0.09
12	6	0.00	-0.09	0.00	0.07	0.00	-0.04	-0.07	-0.08	0.02
13	1	-0.02	-0.15	0.07	0.13	0.00	-0.03	-0.22	-0.13	0.06
14	6	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
15	8	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.02	0.02	0.02	0.01	0.10	0.01	-0.08	0.00	-0.01
17	1	0.01	-0.05	-0.02	0.08	-0.19	0.01	-0.21	0.08	-0.18
18	1	0.12	-0.05	0.07	0.27	-0.18	0.21	0.07	0.04	-0.04
19	1	-0.05	-0.02	-0.06	-0.40	-0.03	-0.30	0.11	0.01	-0.02
20	6	0.00	0.01	0.03	-0.04	0.03	0.02	-0.02	0.04	-0.04
21	1	-0.01	-0.03	0.02	-0.04	0.01	0.01	0.03	0.11	-0.05
22	6	0.02	-0.01	-0.01	0.00	-0.03	-0.02	-0.01	-0.04	0.02
23	1	0.05	-0.04	0.11	0.06	0.03	0.08	0.02	0.07	-0.01
24	1	-0.07	0.04	-0.03	-0.08	0.11	-0.12	-0.01	0.07	-0.08
25	1	-0.05	0.04	-0.03	0.06	-0.01	0.11	0.11	-0.06	0.15
26	6	-0.01	0.01	-0.06	0.00	-0.06	0.03	0.02	0.00	0.01
27	1	-0.10	-0.08	0.03	0.05	-0.03	-0.01	0.06	-0.01	-0.01
28	1	0.04	0.18	0.04	-0.07	-0.08	-0.01	-0.05	0.01	-0.01
29	6	-0.05	0.00	0.03	0.02	-0.11	0.02	0.04	0.08	0.12
30	1	0.05	0.10	-0.01	0.02	-0.12	0.02	-0.14	-0.30	0.14
31	1	0.01	-0.08	0.13	0.02	-0.13	0.02	-0.15	0.41	-0.14
32	6	0.02	-0.01	-0.04	0.00	-0.02	-0.04	-0.01	-0.01	-0.03
33	1	0.01	-0.02	-0.05	0.00	-0.12	-0.06	0.03	-0.09	0.00
34	6	0.00	0.00	0.02	-0.03	-0.02	-0.03	-0.02	-0.01	-0.03
35	1	-0.08	-0.01	0.02	-0.02	-0.10	0.04	0.04	-0.12	0.07
36	6	0.03	0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.02	0.06	-0.01
37	1	-0.05	-0.03	0.04	0.00	0.03	-0.09	-0.01	-0.10	0.22
38	1	-0.09	0.01	-0.15	0.04	0.01	0.10	-0.12	-0.04	-0.34
39	1	0.01	-0.05	0.16	0.00	0.04	-0.03	0.00	-0.14	0.10
40	6	-0.02	0.01	0.01	0.02	-0.04	0.02	-0.01	-0.03	0.02
41	1	0.03	0.05	-0.01	0.10	0.04	-0.04	-0.01	-0.05	0.03
42	6	0.00	-0.06	0.05	-0.01	0.06	0.01	-0.01	0.01	0.01
43	1	-0.03	0.05	0.01	-0.01	-0.14	0.13	0.02	-0.02	-0.01
44	1	-0.08	-0.06	0.26	0.07	0.05	-0.32	0.03	0.01	-0.05
45	1	0.01	0.07	-0.03	-0.04	-0.14	0.10	-0.01	-0.04	0.07
46	6	0.09	0.07	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
47	1	0.37	-0.03	-0.12	0.13	0.01	-0.13	0.04	0.00	-0.05
48	6	-0.08	0.11	0.01	-0.02	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.02
49	1	-0.07	0.20	-0.02	-0.09	0.02	-0.09	-0.03	0.04	-0.03
50	1	-0.16	-0.04	-0.17	0.08	-0.07	-0.02	0.06	-0.02	0.01
51	6	0.00	-0.09	-0.03	0.04	0.02	-0.03	0.02	0.00	-0.01
52	1	0.08	-0.19	-0.08	0.05	-0.02	-0.05	0.02	-0.02	-0.02
53	6	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.03	-0.02	0.02	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01
55	6	0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.02	0.04	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
59	8	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.03	-0.05	0.00	0.03	-0.06
60	8	0.02	-0.04	0.06	0.00	-0.01	0.02	0.01	0.01	0.01
61	8	-0.03	-0.12	0.11	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.01
62	6	-0.02	0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00

63	6	0.03	0.04	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
64	6	-0.01	0.03	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01
65	8	0.01	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
66	1	0.09	0.07	0.08	0.01	0.02	0.01	0.02	-0.03	0.02
67	6	-0.04	-0.05	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
68	1	0.05	0.07	0.02	0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00
69	1	0.01	-0.15	-0.12	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.01
70	1	0.04	-0.10	-0.07	0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.03	0.02
71	6	0.02	0.03	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
72	1	0.11	-0.07	-0.14	0.03	-0.02	-0.03	-0.02	0.01	0.02
73	1	-0.05	-0.06	0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.02	0.00
74	1	-0.13	-0.02	0.09	-0.03	0.00	0.02	0.02	0.00	-0.02

91

92

93

A

A

A

Frequencies --	961.5710	967.0043	970.4134
Red. masses --	1.8356	2.6881	2.4793
Frc consts --	1.0000	1.4810	1.3756
IR Inten --	31.6338	17.1455	9.8765
Raman Activ --	9.8258	3.2892	10.5646
Depolar (P) --	0.5414	0.3612	0.4919
Depolar (U) --	0.7025	0.5307	0.6594

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.01	0.02	0.02	0.03	-0.02	-0.06	-0.01	-0.05
2	6	-0.03	0.01	0.03	-0.03	0.00	0.00	0.06	-0.02	-0.02
3	6	-0.01	-0.01	-0.05	-0.04	-0.04	-0.08	-0.01	0.00	0.08
4	6	-0.03	0.02	0.02	0.01	0.08	-0.06	-0.01	0.01	0.08
5	6	0.03	-0.02	0.04	-0.08	-0.06	0.05	0.03	-0.05	0.05
6	6	0.01	-0.07	-0.03	-0.04	0.00	0.06	0.01	-0.06	-0.06
7	8	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.01
8	6	0.00	0.08	0.06	-0.04	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.08
9	6	-0.01	-0.04	0.00	-0.04	0.03	-0.03	0.01	0.10	-0.04
10	1	0.02	-0.03	-0.01	-0.11	0.13	0.02	-0.06	0.16	0.00
11	8	0.02	0.01	-0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.02
12	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.07	-0.03	0.03	-0.07	-0.05
13	1	0.03	0.00	-0.01	0.07	-0.12	0.03	0.07	-0.09	-0.02
14	6	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.03	0.02	0.00	-0.01
15	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.03	0.08	0.05	0.02	-0.01	0.01	0.07	-0.01	-0.05
17	1	-0.15	-0.12	-0.20	0.03	-0.01	0.02	0.31	-0.05	0.29
18	1	0.44	-0.16	0.21	0.01	-0.01	0.02	-0.28	0.01	-0.04
19	1	-0.21	-0.05	-0.30	0.01	-0.01	0.02	-0.14	0.03	0.10
20	6	0.02	-0.01	0.01	0.02	0.02	0.02	-0.04	0.05	-0.01
21	1	0.01	-0.03	0.01	0.02	0.02	0.02	-0.03	0.10	0.00
22	6	0.00	0.02	-0.01	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.05	0.02
23	1	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	-0.04	0.01	0.06	0.02	0.08
24	1	0.01	-0.03	0.02	0.03	-0.06	0.07	-0.05	0.09	-0.08
25	1	-0.03	0.01	-0.05	-0.05	0.02	-0.07	0.09	-0.04	0.14
26	6	0.02	0.07	-0.04	0.01	0.01	0.08	0.06	0.07	-0.04
27	1	-0.03	0.00	0.03	0.10	0.17	-0.05	0.05	-0.05	0.03
28	1	0.08	0.13	0.02	0.00	-0.27	-0.07	0.02	0.22	0.02
29	6	0.00	-0.03	0.03	-0.05	0.00	0.00	-0.07	-0.05	0.04
30	1	0.01	-0.08	0.01	0.06	0.16	-0.04	0.04	0.14	0.01

31	1	0.03	-0.09	-0.03	0.03	-0.14	0.13	0.00	-0.14	0.20
32	6	0.02	-0.02	-0.08	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.07
33	1	0.01	-0.05	-0.10	0.01	0.02	-0.02	-0.01	-0.03	0.07
34	6	-0.01	-0.03	-0.02	0.01	0.01	0.02	0.00	0.02	0.02
35	1	-0.04	-0.16	0.09	-0.06	0.04	-0.01	0.00	0.14	-0.09
36	6	-0.01	0.01	0.00	0.05	0.05	0.04	-0.03	0.03	-0.05
37	1	0.03	-0.01	0.05	-0.04	-0.09	0.21	0.05	-0.04	0.11
38	1	0.01	-0.01	-0.03	-0.14	-0.02	-0.30	0.02	-0.04	-0.12
39	1	-0.01	-0.01	-0.06	0.02	-0.13	0.25	-0.03	-0.04	-0.18
40	6	-0.02	0.03	0.00	0.01	0.03	-0.08	-0.04	-0.03	0.04
41	1	-0.11	-0.05	0.05	-0.07	-0.03	-0.04	-0.07	-0.06	0.07
42	6	0.00	-0.06	-0.02	0.01	0.03	-0.05	-0.02	-0.05	0.00
43	1	0.02	0.13	-0.14	0.01	0.01	-0.03	0.04	0.09	-0.13
44	1	-0.06	-0.05	0.30	0.02	0.03	-0.10	-0.02	-0.04	0.23
45	1	0.04	0.13	-0.08	0.01	0.01	-0.05	0.02	0.05	0.05
46	6	-0.04	-0.01	-0.01	-0.08	-0.01	-0.03	-0.04	-0.01	-0.01
47	1	-0.26	0.01	0.16	-0.04	0.09	-0.21	-0.23	0.00	0.14
48	6	0.05	0.00	-0.02	0.07	-0.08	0.06	0.04	0.01	0.00
49	1	0.14	-0.06	0.12	0.02	-0.01	-0.04	0.11	-0.03	0.10
50	1	-0.02	0.10	0.09	0.28	-0.04	0.13	0.02	0.09	0.09
51	6	-0.04	0.00	0.04	0.04	0.05	-0.02	-0.04	0.00	0.02
52	1	-0.08	0.07	0.08	-0.01	0.07	-0.02	-0.06	0.05	0.06
53	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.02	0.00
54	1	0.02	0.01	-0.01	-0.03	0.02	-0.01	0.02	0.02	0.01
55	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
56	1	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00
57	6	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.03	0.01	0.00	-0.01	0.01
58	1	0.02	-0.01	0.00	0.02	-0.04	0.04	0.02	-0.02	0.01
59	8	0.01	-0.02	0.02	0.00	-0.03	0.07	0.01	0.04	-0.08
60	8	0.00	0.01	0.00	0.03	-0.04	0.09	0.01	0.00	0.03
61	8	0.01	0.02	-0.01	0.01	0.03	-0.06	0.02	0.03	-0.02
62	6	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.03	-0.03	-0.01	0.00	-0.01
63	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.03	0.00	0.00	-0.01
66	1	0.00	-0.01	0.00	0.08	0.10	0.04	0.02	0.01	0.01
67	6	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	-0.01	0.00	0.05	0.09	0.02	0.01	0.01	0.00
69	1	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.11	-0.11	0.00	-0.02	-0.01
70	1	0.00	0.01	0.01	0.04	-0.10	-0.08	0.01	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.02	0.00	0.01	0.00
72	1	-0.01	0.01	0.02	0.11	-0.08	-0.14	0.01	-0.01	0.00
73	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.07	0.03	-0.01	-0.01	0.00
74	1	0.02	0.00	-0.01	-0.16	-0.02	0.11	-0.01	0.00	0.00

	94	95	96
	A	A	A
Frequencies --	982.8653	993.1115	998.7131
Red. masses --	2.1024	2.1495	2.6840
Frc consts --	1.1966	1.2490	1.5773
IR Inten --	23.0630	22.8186	27.5923
Raman Activ --	4.4849	4.3633	6.2284
Depolar (P) --	0.6742	0.3256	0.5353

Depolar (U) --				0.8054		0.4912			0.6974		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	0.00	0.00	-0.04	-0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.05	
2	6	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03	
3	6	-0.03	0.01	0.02	0.09	-0.04	-0.08	0.16	-0.05	-0.08	
4	6	-0.01	-0.02	0.04	-0.04	0.03	-0.03	-0.04	0.00	-0.03	
5	6	0.00	-0.01	0.01	0.04	-0.06	-0.04	-0.06	0.10	0.02	
6	6	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.05	0.02	0.01	-0.02	
7	8	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
8	6	-0.01	-0.04	0.05	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.02	
9	6	-0.09	0.01	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.04	-0.02	
10	1	-0.30	0.14	0.14	-0.05	0.05	0.01	-0.02	0.02	-0.01	
11	8	-0.03	-0.02	0.05	0.00	-0.01	0.01	-0.02	-0.02	0.02	
12	6	0.08	0.01	-0.10	0.01	-0.04	-0.04	0.04	-0.04	-0.02	
13	1	0.31	0.02	-0.09	0.08	-0.05	-0.02	0.08	-0.03	-0.02	
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.00	
15	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
16	6	-0.05	-0.05	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	
17	1	-0.26	0.15	-0.22	0.00	-0.01	-0.01	0.04	0.00	0.05	
18	1	0.04	0.11	-0.10	0.02	-0.01	0.01	-0.07	0.02	-0.03	
19	1	0.35	0.00	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.03	
20	6	-0.01	0.06	0.06	0.00	0.04	0.00	-0.06	0.05	0.02	
21	1	-0.01	0.11	0.07	0.00	0.06	0.01	-0.10	0.01	0.04	
22	6	0.03	-0.03	-0.01	-0.03	-0.01	0.03	-0.06	0.00	0.01	
23	1	0.08	-0.04	0.16	-0.06	0.10	-0.17	-0.10	0.15	-0.25	
24	1	-0.10	0.08	-0.07	0.10	-0.01	0.00	0.10	0.01	-0.04	
25	1	-0.04	0.04	0.04	0.12	-0.08	0.09	0.14	-0.10	0.10	
26	6	0.03	0.02	-0.01	-0.04	-0.02	-0.03	-0.07	-0.06	-0.05	
27	1	0.03	-0.02	0.01	-0.10	-0.07	0.03	-0.11	-0.19	0.03	
28	1	0.01	0.06	0.00	0.07	0.00	0.04	0.06	0.03	0.06	
29	6	0.10	0.06	-0.11	0.00	-0.01	0.00	0.04	-0.02	0.01	
30	1	-0.05	-0.12	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.14	0.06	
31	1	-0.04	0.33	-0.19	-0.01	0.00	0.02	-0.05	0.16	-0.07	
32	6	0.02	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	
33	1	0.06	0.01	-0.02	0.00	-0.02	-0.01	-0.02	-0.05	-0.02	
34	6	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	
35	1	-0.02	-0.07	0.08	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.04	-0.03	
36	6	-0.02	-0.03	-0.02	-0.04	0.05	0.05	-0.03	0.00	0.04	
37	1	0.02	0.04	-0.11	0.18	-0.06	0.35	0.10	0.01	0.10	
38	1	0.08	0.01	0.16	0.10	-0.09	-0.07	0.11	-0.03	0.12	
39	1	-0.01	0.06	-0.10	-0.02	-0.07	-0.27	0.00	0.01	-0.18	
40	6	-0.02	-0.01	0.01	0.02	0.05	0.02	0.04	0.06	0.05	
41	1	-0.01	0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.06	-0.02	-0.02	0.11	
42	6	-0.01	-0.01	0.00	0.04	0.04	-0.01	0.04	0.00	0.03	
43	1	0.01	0.02	-0.03	-0.06	-0.10	0.17	-0.10	-0.06	0.19	
44	1	0.00	-0.01	0.04	-0.02	0.03	-0.20	-0.09	-0.01	-0.03	
45	1	0.00	0.00	0.02	-0.02	-0.03	-0.14	-0.02	0.03	-0.18	
46	6	-0.01	0.00	0.00	0.08	-0.04	0.11	-0.06	0.09	-0.11	
47	1	-0.06	0.01	0.02	0.19	-0.17	0.21	-0.36	0.21	-0.04	
48	6	0.01	0.00	0.00	-0.05	0.02	-0.11	0.08	-0.06	0.06	
49	1	0.03	-0.01	0.02	-0.15	-0.29	-0.09	0.26	0.19	0.17	
50	1	0.01	0.03	0.03	-0.32	0.09	-0.06	0.17	-0.11	0.01	



51	6	-0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.02	0.05	0.00	0.05	0.00
52	1	-0.02	0.02	0.02	-0.08	0.08	0.12	0.05	-0.05	-0.07
53	6	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.04	-0.02	-0.03	-0.01	-0.04
55	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00
57	6	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.04	-0.01	0.00	-0.02	0.01
58	1	0.01	-0.01	0.01	-0.05	0.05	-0.06	0.02	-0.02	0.02
59	8	0.01	0.01	-0.02	-0.01	-0.02	0.02	-0.02	-0.01	0.00
60	8	0.02	-0.03	0.07	0.01	-0.01	0.04	0.00	0.01	0.00
61	8	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.05	-0.02	-0.01	-0.08	0.04
62	6	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00
63	6	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
66	1	0.05	0.06	0.02	0.04	0.07	0.00	-0.01	-0.02	0.00
67	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
68	1	0.02	0.06	0.01	0.02	0.06	0.01	0.00	-0.01	0.00
69	1	0.01	-0.04	-0.05	0.01	-0.04	-0.05	0.00	0.01	0.01
70	1	0.02	-0.05	-0.04	0.02	-0.05	-0.04	0.00	0.01	0.01
71	6	0.00	0.02	0.01	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.01	0.00
72	1	0.05	-0.03	-0.06	0.03	-0.03	-0.02	0.02	-0.01	-0.02
73	1	-0.05	-0.03	0.02	-0.02	-0.03	0.01	0.00	-0.01	0.00
74	1	-0.07	-0.01	0.04	-0.05	0.00	0.05	-0.02	0.00	0.01

97

98

99

A

A

A

Frequencies --	1009.8140	1015.3161	1020.7406
Red. masses --	2.6193	2.3485	2.0111
Frc consts --	1.5737	1.4264	1.2346
IR Inten --	6.3114	43.5319	6.3182
Raman Activ --	13.7312	8.8798	4.1772
Depolar (P) --	0.7270	0.4776	0.0994
Depolar (U) --	0.8420	0.6465	0.1809

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.01	0.01	-0.04	0.02	-0.04	0.00	-0.01	0.02
2	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.01
3	6	0.00	0.03	0.02	0.05	-0.02	0.01	0.00	0.03	0.05
4	6	0.00	-0.01	-0.04	0.01	0.00	0.04	-0.01	-0.02	-0.07
5	6	-0.03	0.00	-0.02	0.01	0.02	0.00	-0.04	0.00	-0.01
6	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01
7	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00
8	6	0.01	0.01	-0.01	-0.03	-0.05	0.03	0.00	-0.01	0.00
9	6	0.01	0.00	0.00	0.05	0.09	-0.06	0.06	0.02	-0.01
10	1	0.02	-0.02	0.00	0.02	0.00	-0.05	0.07	-0.06	-0.02
11	8	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.05	0.10	-0.02	-0.01	0.03
12	6	0.00	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.06	-0.03	0.04	-0.01
13	1	-0.04	-0.01	0.01	-0.08	0.01	0.04	-0.17	0.01	0.00
14	6	0.00	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00
15	8	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
16	6	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.06	-0.01	0.00	0.01
17	1	0.03	0.00	0.03	-0.23	0.01	-0.23	-0.02	0.00	-0.03
18	1	-0.03	0.00	-0.01	0.24	-0.02	0.06	0.03	-0.01	0.01

19	1	-0.02	0.00	0.01	0.13	-0.04	-0.07	0.00	0.00	-0.02
20	6	-0.02	-0.01	0.00	0.15	0.03	-0.07	0.01	-0.02	-0.04
21	1	-0.03	-0.03	0.01	0.23	0.05	-0.14	0.01	-0.04	-0.04
22	6	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.05	0.04	-0.01	-0.01	-0.01
23	1	0.01	-0.01	0.03	0.00	0.16	-0.12	0.02	0.02	0.02
24	1	-0.03	0.02	-0.02	0.05	0.10	-0.12	-0.04	0.05	-0.06
25	1	-0.02	0.02	0.00	0.21	-0.12	0.24	0.02	0.00	0.05
26	6	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.02	-0.02	0.02	0.00
27	1	-0.06	0.03	0.00	-0.03	0.07	-0.02	-0.06	0.07	0.00
28	1	-0.03	0.05	0.01	-0.03	-0.06	-0.01	-0.05	0.07	0.00
29	6	0.01	0.00	0.01	-0.05	-0.02	-0.11	0.00	-0.01	-0.02
30	1	-0.02	-0.04	0.02	0.11	0.31	-0.14	-0.01	0.03	0.00
31	1	-0.01	0.04	-0.03	0.06	-0.18	0.23	0.00	0.00	0.01
32	6	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02
33	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.06	0.19	-0.01	-0.08	0.08	-0.03
34	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.03	-0.01	0.01	-0.02
35	1	0.00	0.01	-0.01	0.20	-0.14	0.13	0.12	-0.05	0.04
36	6	0.02	0.00	0.02	-0.02	0.01	-0.02	0.03	-0.02	0.03
37	1	-0.02	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.03	-0.04	0.01	-0.05
38	1	-0.02	0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.03	-0.03	0.02	0.05
39	1	0.01	0.00	0.09	-0.01	-0.01	-0.10	0.02	0.01	0.13
40	6	0.02	-0.02	0.00	0.02	-0.01	-0.02	0.02	-0.03	0.01
41	1	0.06	0.02	-0.03	0.01	-0.06	0.03	0.06	0.01	-0.02
42	6	0.05	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.00
43	1	-0.11	-0.04	0.19	0.02	0.04	-0.06	-0.03	0.02	0.02
44	1	-0.11	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.07	-0.04	-0.01	0.07
45	1	-0.01	0.06	-0.25	0.01	0.03	0.03	0.01	0.04	-0.07
46	6	0.06	0.02	0.06	0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.02	-0.01
47	1	0.09	-0.01	0.07	0.02	0.03	-0.04	-0.10	0.02	0.05
48	6	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	-0.02	0.02	0.03	-0.01	-0.01
49	1	0.02	-0.05	0.01	-0.02	0.09	-0.02	0.05	-0.05	0.04
50	1	-0.05	0.05	0.02	0.05	-0.07	-0.04	-0.03	0.02	0.01
51	6	-0.13	0.01	-0.08	0.00	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.03
52	1	-0.18	0.00	-0.11	0.01	-0.03	-0.07	0.01	0.03	0.05
53	6	0.05	0.22	0.01	0.01	0.03	0.00	-0.01	-0.02	0.00
54	1	0.38	0.35	0.31	0.04	0.04	0.03	-0.07	-0.05	-0.07
55	6	-0.06	-0.04	-0.05	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01
56	1	-0.02	-0.19	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.02	0.00
57	6	0.01	-0.19	0.04	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.02	0.00
58	1	0.25	-0.26	0.28	0.04	-0.04	0.05	-0.04	0.03	-0.06
59	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03	0.01	0.03	0.00
61	8	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01
62	6	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.03	-0.05	0.02
63	6	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.02	0.05	-0.04	-0.12
64	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.05	0.04	-0.07
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.03
66	1	0.02	0.03	0.00	-0.06	-0.07	0.00	0.29	0.41	-0.02
67	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.04	-0.04	0.07
68	1	0.01	0.03	0.00	-0.02	-0.06	-0.01	0.10	0.39	0.05
69	1	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.04	0.06	-0.04	-0.24
70	1	0.01	-0.02	-0.02	-0.01	0.05	0.04	0.06	-0.31	-0.26

71	6	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.07	-0.01	0.10
72	1	0.00	-0.01	-0.01	0.03	-0.02	-0.02	-0.13	0.06	0.11
73	1	-0.01	-0.01	0.01	0.03	-0.02	-0.04	-0.13	0.06	0.14
74	1	-0.02	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.03	-0.02	0.01	0.00
		100			101			102		
		A			A			A		
Frequencies --		1024.8858			1027.2885			1028.6798		
Red. masses --		2.1903			1.6535			1.9066		
Frc consts --		1.3555			1.0281			1.1887		
IR Inten --		14.1758			30.2585			48.7095		
Raman Activ --		11.1627			3.8663			7.4719		
Depolar (P) --		0.6293			0.7235			0.7496		
Depolar (U) --		0.7725			0.8395			0.8569		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.02	-0.05	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01
3	6	0.02	-0.08	-0.04	-0.02	-0.03	0.02	-0.02	-0.04	0.03
4	6	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.03
5	6	0.08	0.02	0.03	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.01
6	6	0.00	0.03	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
8	6	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.02
9	6	-0.05	-0.06	0.04	0.01	0.01	0.00	0.04	0.03	-0.03
10	1	-0.05	0.02	0.05	0.01	0.01	0.00	0.04	-0.05	-0.04
11	8	0.04	0.03	-0.04	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.02	0.04
12	6	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.03
13	1	0.11	0.05	-0.06	-0.03	-0.01	0.02	-0.09	0.00	0.03
14	6	-0.03	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01
15	8	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.01
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.02
17	1	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.06	0.01	-0.06
18	1	0.02	-0.01	0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.08	-0.01	0.02
19	1	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.03
20	6	0.03	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.04	0.00	-0.02
21	1	0.08	0.11	-0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.05	-0.05	-0.04
22	6	0.01	0.02	0.05	0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.00	-0.01
23	1	-0.06	-0.01	-0.10	-0.01	-0.06	0.03	0.00	0.01	-0.01
24	1	0.12	-0.12	0.14	0.00	-0.05	0.06	-0.01	0.02	-0.03
25	1	0.00	-0.03	-0.06	-0.07	0.04	-0.09	0.01	-0.01	0.02
26	6	0.04	-0.07	0.00	0.04	-0.02	-0.01	0.04	-0.02	-0.01
27	1	0.17	-0.21	0.00	0.09	-0.14	0.02	0.09	-0.11	0.01
28	1	0.07	-0.11	0.00	0.04	0.03	0.01	0.03	0.01	0.01
29	6	-0.04	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.04
30	1	0.05	0.06	-0.04	0.00	0.02	0.00	0.01	0.04	-0.02
31	1	0.04	-0.14	0.05	0.00	0.02	0.01	0.01	0.00	0.01
32	6	0.01	0.00	-0.01	0.07	-0.05	0.05	-0.08	0.05	-0.04
33	1	0.00	0.00	-0.02	-0.39	0.31	-0.26	0.40	-0.26	0.28
34	6	-0.01	0.01	0.01	-0.06	0.05	-0.04	0.07	-0.05	0.03
35	1	-0.01	-0.03	0.04	0.42	-0.26	0.25	-0.39	0.24	-0.25
36	6	-0.05	0.01	-0.04	0.01	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01
37	1	0.07	0.00	0.06	-0.01	-0.01	0.02	-0.02	-0.01	0.01
38	1	0.07	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.01

39	1	-0.03	0.01	-0.22	0.01	-0.01	0.06	0.01	-0.01	0.06
40	6	-0.06	0.06	0.00	-0.06	0.03	0.02	-0.06	0.03	0.01
41	1	-0.14	-0.02	0.06	-0.10	0.02	0.02	-0.10	0.01	0.02
42	6	-0.04	0.03	0.02	0.01	0.04	0.02	0.01	0.05	0.01
43	1	0.05	-0.06	-0.02	-0.03	-0.11	0.15	-0.02	-0.11	0.14
44	1	0.09	0.03	-0.14	0.01	0.03	-0.22	0.02	0.03	-0.23
45	1	-0.03	-0.11	0.19	-0.03	-0.09	-0.02	-0.03	-0.10	0.01
46	6	0.01	-0.01	-0.04	-0.05	-0.01	-0.01	-0.06	-0.02	-0.01
47	1	-0.02	-0.03	0.00	-0.08	-0.02	0.04	-0.08	-0.03	0.03
48	6	-0.04	0.04	0.05	0.05	0.07	0.00	0.05	0.09	0.00
49	1	0.01	0.23	0.03	0.12	-0.02	0.12	0.14	0.00	0.14
50	1	0.08	-0.05	-0.04	0.00	0.17	0.11	0.02	0.20	0.13
51	6	0.02	-0.02	-0.06	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.12	-0.01
52	1	0.05	-0.13	-0.14	-0.01	-0.04	0.05	0.00	-0.06	0.04
53	6	0.01	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
54	1	0.15	0.09	0.15	0.09	0.03	0.09	0.12	0.04	0.12
55	6	-0.02	-0.03	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.01	-0.03	0.00
56	1	-0.02	-0.04	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.01	-0.03	0.00
57	6	0.01	-0.02	0.01	0.01	0.03	0.00	0.01	0.04	0.01
58	1	0.08	-0.04	0.11	0.02	0.03	0.02	0.03	0.03	0.04
59	8	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.02
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	-0.02
61	8	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
62	6	0.00	0.04	0.01	0.00	-0.03	0.00	-0.01	-0.04	0.01
63	6	0.02	-0.01	-0.07	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.01	0.00
64	6	0.03	0.03	-0.04	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00
65	8	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
66	1	0.19	0.18	0.03	-0.07	-0.04	-0.02	-0.02	0.02	-0.02
67	6	-0.02	-0.03	0.03	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
68	1	0.03	0.16	0.01	0.00	-0.04	0.00	0.01	0.03	0.01
69	1	0.03	0.00	-0.11	-0.01	-0.01	0.03	0.00	-0.01	-0.01
70	1	0.01	-0.16	-0.13	0.00	0.05	0.04	0.01	0.00	0.00
71	6	-0.03	-0.05	0.06	0.01	0.03	-0.02	-0.01	0.02	-0.01
72	1	-0.17	0.12	0.12	0.07	-0.06	-0.04	0.05	-0.05	-0.02
73	1	-0.11	0.13	0.13	0.04	-0.07	-0.05	0.03	-0.06	-0.04
74	1	0.14	0.01	-0.18	-0.07	-0.01	0.10	-0.08	0.00	0.11

103

104

105

A

A

A

Frequencies --	1042.2788	1044.7341	1048.8530
Red. masses --	2.7726	2.4358	1.9348
Frc consts --	1.7746	1.5664	1.2540
IR Inten --	72.6715	62.2356	37.6705
Raman Activ --	2.7214	12.9459	1.8533
Depolar (P) --	0.2022	0.1833	0.3832
Depolar (U) --	0.3364	0.3098	0.5541

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

7	8	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.03	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.06	0.10	-0.07	-0.06	-0.06	0.05	0.02	0.07	-0.06
10	1	0.08	0.02	-0.09	-0.07	0.00	0.06	0.05	0.00	-0.07
11	8	-0.05	-0.04	0.06	0.03	0.02	-0.05	-0.03	-0.03	0.05
12	6	0.01	-0.07	0.03	0.00	0.01	-0.02	0.01	-0.04	0.06
13	1	-0.07	-0.08	0.03	0.12	0.04	-0.03	0.00	-0.01	0.03
14	6	-0.04	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.01
15	8	-0.01	0.06	-0.02	-0.02	0.03	-0.02	0.01	-0.03	0.01
16	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.01	-0.01
18	1	0.00	0.02	-0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00
19	1	0.04	0.00	0.03	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
20	6	-0.07	-0.01	0.03	0.03	0.04	-0.02	-0.01	0.00	0.02
21	1	-0.20	-0.17	0.10	0.06	0.12	-0.03	-0.03	-0.08	0.02
22	6	-0.03	0.01	-0.05	-0.02	-0.04	0.03	0.00	0.01	-0.02
23	1	-0.01	0.04	-0.02	0.01	0.09	-0.05	0.01	-0.02	0.03
24	1	-0.05	0.07	-0.09	0.02	0.06	-0.08	-0.04	0.01	-0.02
25	1	0.00	0.02	0.01	0.12	-0.07	0.15	-0.04	0.03	-0.04
26	6	-0.05	0.03	0.03	-0.08	0.04	0.01	0.06	-0.02	-0.03
27	1	-0.12	0.22	-0.03	-0.25	0.26	-0.01	0.09	-0.16	0.03
28	1	-0.06	-0.07	-0.02	-0.10	0.04	0.00	0.12	0.00	0.02
29	6	0.07	-0.03	-0.01	-0.04	0.01	0.02	0.03	-0.01	-0.03
30	1	-0.10	-0.13	0.10	0.05	0.04	-0.04	-0.02	-0.01	0.01
31	1	-0.06	0.23	-0.09	0.03	-0.13	0.05	-0.02	0.10	0.00
32	6	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	-0.12	-0.02	-0.10	0.03	0.02	0.02	-0.01	0.02	-0.01
34	6	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
35	1	0.06	0.03	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
36	6	-0.04	0.02	0.00	0.02	-0.03	-0.01	0.01	0.01	-0.02
37	1	0.08	-0.01	0.11	-0.06	0.04	-0.17	-0.04	-0.01	-0.02
38	1	0.05	-0.04	-0.04	-0.01	0.04	0.10	-0.06	0.02	-0.08
39	1	-0.02	-0.01	-0.19	0.01	0.05	0.11	0.00	-0.01	0.07
40	6	0.06	-0.02	-0.03	0.09	-0.05	-0.01	-0.07	0.04	0.01
41	1	0.12	0.06	-0.10	0.13	-0.04	0.00	-0.14	-0.02	0.04
42	6	-0.06	-0.01	-0.04	0.02	0.01	-0.03	0.03	0.02	0.01
43	1	0.13	0.09	-0.27	-0.02	0.00	0.03	-0.05	-0.06	0.13
44	1	0.12	0.01	0.06	-0.02	0.01	-0.03	-0.02	0.01	-0.09
45	1	0.02	-0.01	0.23	0.01	0.02	-0.09	-0.01	-0.01	-0.10
46	6	-0.02	-0.05	-0.02	-0.07	0.00	0.01	0.00	0.00	0.03
47	1	0.05	-0.09	-0.02	0.04	0.02	-0.12	0.14	0.04	-0.14
48	6	-0.03	0.06	0.03	0.07	0.06	-0.02	0.02	-0.03	-0.02
49	1	-0.02	0.13	0.02	0.08	-0.13	0.08	-0.04	-0.14	-0.05
50	1	0.07	0.05	0.03	0.02	0.22	0.17	-0.01	0.04	0.05
51	6	0.05	-0.07	-0.04	0.01	-0.11	0.01	-0.03	0.02	0.01
52	1	0.04	-0.08	-0.05	-0.03	0.02	0.12	-0.08	0.09	0.05
53	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.02	0.00
54	1	0.25	0.07	0.24	0.15	0.02	0.14	-0.13	-0.03	-0.12
55	6	-0.04	-0.08	-0.02	-0.02	-0.06	-0.01	0.02	0.05	0.01
56	1	-0.05	-0.06	-0.04	-0.02	-0.07	-0.01	0.03	0.03	0.02
57	6	0.03	0.04	0.02	0.03	0.07	0.02	-0.02	-0.03	-0.01
58	1	0.13	0.02	0.14	0.07	0.06	0.07	-0.07	-0.02	-0.08

59	8	0.00	-0.03	0.06	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
60	8	-0.01	0.01	-0.03	-0.01	-0.05	0.03	-0.02	-0.02	-0.03
61	8	0.00	0.03	-0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01
62	6	0.01	0.03	0.01	0.02	0.06	-0.01	0.03	0.06	0.01
63	6	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.04	0.00	-0.05	0.06	-0.02
64	6	0.00	0.02	-0.01	-0.01	0.02	0.00	-0.02	0.04	-0.01
65	8	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
66	1	0.05	0.03	0.02	0.07	-0.11	0.10	0.14	-0.12	0.16
67	6	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.02	-0.01	0.02	-0.03	0.00
68	1	0.00	0.02	-0.01	-0.05	-0.09	-0.05	-0.08	-0.07	-0.07
69	1	0.00	0.01	-0.02	-0.01	0.06	0.04	0.00	0.11	0.04
70	1	-0.01	-0.05	-0.03	-0.05	-0.01	0.00	-0.08	-0.07	-0.04
71	6	-0.01	-0.03	0.01	0.05	-0.06	0.03	0.07	-0.08	0.05
72	1	-0.08	0.06	0.06	-0.06	0.12	-0.10	-0.09	0.17	-0.16
73	1	-0.02	0.06	0.03	-0.21	0.14	0.18	-0.32	0.20	0.28
74	1	0.09	0.01	-0.09	0.15	-0.01	-0.32	0.19	-0.02	-0.45

106

107

108

A

A

A

Frequencies --	1056.4076	1059.5729	1067.1028
Red. masses --	3.1649	1.8837	1.6818
Frc consts --	2.0810	1.2460	1.1283
IR Inten --	50.8446	10.9040	24.1877
Raman Activ --	8.0894	11.4422	5.7115
Depolar (P) --	0.3438	0.7496	0.7233
Depolar (U) --	0.5116	0.8569	0.8394

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
2	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
3	6	0.02	0.03	-0.02	0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.01
4	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.11	0.00	0.00	-0.03
5	6	0.02	-0.02	0.01	-0.05	0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.00
6	6	-0.01	0.01	0.01	0.00	-0.03	0.03	0.00	0.00	-0.01
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	-0.01	0.01	-0.04	0.01	-0.02	0.01	0.01	0.00
10	1	-0.01	0.00	0.01	-0.03	0.02	-0.02	0.02	-0.01	-0.01
11	8	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
12	6	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.06	0.07	-0.01	0.01	-0.02
13	1	0.01	-0.01	-0.01	0.15	0.00	0.01	-0.04	0.00	-0.01
14	6	-0.03	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	8	0.03	-0.13	0.05	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
19	1	0.02	0.00	0.01	0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
20	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.03	0.03	0.00	0.00	-0.01
21	1	-0.03	0.01	0.02	-0.01	0.02	0.04	0.00	-0.02	-0.01
22	6	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01
23	1	-0.01	0.05	-0.05	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.01
24	1	0.01	0.02	-0.03	0.01	0.02	-0.03	-0.01	0.01	-0.01
25	1	0.05	-0.03	0.05	0.03	-0.02	0.04	0.00	0.01	0.00
26	6	-0.05	0.01	0.04	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00

27	1	-0.09	0.21	-0.03	-0.07	0.01	0.02	0.02	-0.02	0.00
28	1	-0.13	-0.05	-0.03	0.07	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
29	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	-0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
31	1	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00
32	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
33	1	-0.02	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.02	0.01
34	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01
35	1	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01
36	6	-0.01	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.01
37	1	0.03	0.01	0.02	-0.08	0.02	-0.15	0.01	0.00	0.02
38	1	0.04	-0.01	0.03	-0.07	0.04	-0.06	0.01	-0.01	0.01
39	1	-0.01	0.01	-0.07	0.00	0.02	0.08	0.00	0.00	0.00
40	6	0.06	-0.03	-0.03	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
41	1	0.10	0.03	-0.07	-0.03	-0.05	0.05	-0.01	0.00	0.00
42	6	-0.01	0.02	-0.01	0.02	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
43	1	0.03	-0.02	-0.03	-0.03	-0.03	0.06	0.00	0.00	0.01
44	1	0.04	0.02	-0.07	-0.01	0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00
45	1	-0.01	-0.04	0.07	0.00	0.01	-0.09	0.00	0.00	0.00
46	6	-0.03	-0.04	-0.02	-0.03	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
47	1	-0.10	-0.11	0.14	0.26	0.05	-0.29	-0.05	-0.01	0.06
48	6	0.02	0.12	0.02	0.04	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
49	1	0.19	0.20	0.20	-0.04	-0.17	-0.05	0.01	0.02	0.01
50	1	0.03	0.16	0.07	0.03	0.11	0.12	-0.01	-0.02	-0.02
51	6	-0.02	-0.15	-0.11	-0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
52	1	-0.03	-0.23	-0.18	-0.10	0.10	0.09	0.01	-0.01	-0.01
53	6	0.03	0.12	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	-0.31	0.02	-0.29	-0.04	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
55	6	0.09	0.21	0.06	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.12	0.14	0.10	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
57	6	-0.08	-0.10	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.31	-0.06	-0.28	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
59	8	-0.01	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.07	0.00	-0.03	0.02
61	8	0.02	0.03	0.00	0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.06	0.01	0.01	0.02	0.00
63	6	0.00	0.00	0.01	0.06	-0.03	0.01	-0.04	0.04	-0.05
64	6	0.00	0.01	0.00	0.05	0.01	0.01	0.12	-0.05	0.09
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
66	1	-0.01	0.01	0.00	-0.08	0.19	-0.14	-0.25	0.21	-0.24
67	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	-0.11	0.05	-0.08
68	1	0.00	-0.02	0.00	0.07	0.03	0.05	0.22	-0.10	0.20
69	1	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.14	-0.07	-0.06	-0.55	-0.10
70	1	0.00	0.00	0.00	0.07	0.02	0.00	0.27	0.35	0.21
71	6	-0.01	-0.01	-0.01	-0.11	-0.02	-0.04	0.01	-0.04	0.03
72	1	-0.03	0.01	0.05	-0.18	0.02	0.42	-0.07	0.08	-0.02
73	1	0.03	0.01	-0.02	0.37	0.02	-0.25	-0.13	0.10	0.12
74	1	0.04	0.01	-0.01	0.13	0.05	0.18	0.10	0.00	-0.20

109

110

111

A

A

A

Frequencies -- 1073.0176

1080.9064

1085.2223

Red. masses -- 2.2455

2.2448

1.7785

Frc consts	--	1.5233	1.5453	1.2341
IR Inten	--	197.5919	144.3970	29.9371
Raman Activ	--	15.9455	1.9949	3.0875
Depolar (P)	--	0.4194	0.4590	0.6674
Depolar (U)	--	0.5909	0.6292	0.8005

  

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.01	0.02	-0.08	0.03	-0.01	0.01	0.00	0.01
2	6	-0.03	0.01	0.07	-0.04	0.01	0.14	-0.01	0.00	0.01
3	6	-0.01	-0.01	0.01	0.04	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.01	0.02	-0.10	0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.01
5	6	-0.01	-0.04	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
6	6	-0.02	0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.01
7	8	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	-0.02	0.03	0.01	-0.05	0.09	0.00	0.00	-0.01
9	6	0.01	0.02	-0.02	-0.03	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00
10	1	0.03	-0.06	-0.04	0.02	-0.06	-0.06	0.01	-0.02	0.00
11	8	-0.01	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.04	-0.03	0.05	-0.05	0.08	-0.01	0.01	-0.01
13	1	-0.06	-0.03	0.05	0.09	-0.02	0.05	-0.01	0.00	-0.01
14	6	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.03	-0.03
15	8	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.06	0.06	0.05
16	6	0.00	0.01	-0.02	0.02	0.03	-0.07	0.00	0.00	0.00
17	1	0.06	-0.02	0.06	0.22	-0.07	0.21	0.01	0.00	0.01
18	1	-0.06	-0.01	0.00	-0.22	-0.04	-0.01	-0.01	0.00	0.00
19	1	-0.07	0.01	-0.01	-0.24	0.04	-0.01	0.01	0.00	0.01
20	6	0.01	0.01	-0.01	-0.03	0.02	0.05	0.00	0.01	-0.01
21	1	0.04	-0.02	-0.05	0.12	0.07	-0.06	-0.01	0.00	0.00
22	6	0.02	-0.02	-0.03	0.07	-0.03	-0.04	-0.01	-0.01	-0.01
23	1	0.06	-0.04	0.13	0.15	-0.15	0.34	0.01	0.02	0.00
24	1	-0.11	0.08	-0.08	-0.23	0.10	-0.07	-0.02	0.03	-0.04
25	1	-0.05	0.05	0.02	-0.16	0.14	-0.03	0.02	-0.01	0.04
26	6	0.01	-0.01	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01
27	1	0.09	-0.05	-0.01	-0.06	0.04	0.00	-0.01	-0.03	0.01
28	1	-0.02	-0.03	-0.01	0.01	-0.05	0.00	0.04	0.01	0.01
29	6	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.01
30	1	0.01	0.02	-0.02	0.02	0.03	-0.04	0.00	-0.01	0.01
31	1	0.00	0.02	0.01	0.00	0.07	0.01	0.00	-0.01	0.00
32	6	0.00	0.01	0.01	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.01
33	1	0.07	0.16	0.09	0.19	0.36	0.18	0.01	0.04	0.02
34	6	0.01	-0.02	-0.04	0.01	-0.03	-0.08	0.00	0.00	-0.01
35	1	-0.02	-0.07	0.00	-0.14	-0.22	0.08	0.00	-0.01	-0.01
36	6	0.00	0.00	0.05	-0.02	0.02	0.01	0.01	-0.01	0.00
37	1	0.05	-0.01	0.10	0.07	-0.01	0.09	-0.02	0.01	-0.03
38	1	0.03	-0.02	0.03	0.04	-0.03	-0.03	-0.01	0.01	0.02
39	1	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.02	-0.10	0.00	0.01	0.03
40	6	-0.01	0.01	-0.01	0.04	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.01
41	1	-0.05	-0.02	0.00	0.02	-0.03	0.04	-0.03	-0.02	0.03
42	6	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01
43	1	-0.04	-0.03	0.08	0.00	0.01	-0.01	0.02	0.02	-0.05
44	1	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01
45	1	0.00	0.01	-0.05	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.04
46	6	0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00



47	1	-0.22	-0.05	0.27	-0.03	-0.02	0.04	0.02	0.03	-0.07
48	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01
49	1	0.05	0.08	0.04	0.01	0.04	0.02	-0.02	-0.04	-0.02
50	1	-0.05	-0.08	-0.09	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.00
51	6	0.01	0.02	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.04	0.01	0.05
52	1	0.07	-0.06	-0.04	0.02	-0.03	-0.02	0.08	0.06	0.12
53	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.06	0.06
54	1	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.02	0.43	0.08	0.41
55	6	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.04	-0.02
56	1	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.15	0.60	-0.25
57	6	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.13	-0.08	-0.12
58	1	0.02	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.17	-0.07	-0.16
59	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
60	8	-0.01	-0.11	0.07	-0.02	0.06	-0.09	0.00	-0.01	0.01
61	8	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
62	6	0.01	0.13	-0.03	0.00	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00
63	6	0.05	0.04	0.06	-0.02	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
64	6	-0.01	0.09	0.02	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
66	1	0.01	0.02	0.05	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
67	6	0.02	-0.07	-0.03	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
68	1	-0.10	-0.17	-0.09	0.03	0.07	0.03	0.00	-0.01	0.00
69	1	-0.01	0.05	0.04	0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
70	1	-0.08	-0.09	-0.04	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	-0.07	-0.06	-0.06	0.02	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
72	1	-0.24	0.11	0.41	0.06	-0.02	-0.11	-0.01	0.00	0.01
73	1	0.32	0.11	-0.20	-0.11	-0.02	0.07	0.02	0.00	-0.01
74	1	0.30	0.06	-0.04	-0.07	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01

112

113

114

A

A

A

Frequencies --	1092.7044	1096.2182	1120.5923
Red. masses --	2.4005	2.1798	3.2207
Frc consts --	1.6887	1.5433	2.3829
IR Inten --	33.2245	62.1695	35.6177
Raman Activ --	4.4492	5.2610	10.2656
Depolar (P) --	0.5198	0.7447	0.6728
Depolar (U) --	0.6841	0.8537	0.8044

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.12	0.02	0.10	0.07	0.03	0.02	-0.02	-0.03	-0.01
2	6	-0.06	0.02	0.11	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.02	0.05
3	6	-0.02	0.00	-0.02	-0.04	-0.01	0.00	0.03	-0.01	-0.09
4	6	-0.03	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.26
5	6	0.05	0.04	0.03	-0.04	-0.07	-0.05	-0.05	0.00	-0.07
6	6	0.02	-0.02	0.03	-0.02	0.04	-0.09	-0.05	0.05	-0.10
7	8	0.01	-0.02	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.01
8	6	-0.04	0.04	-0.05	-0.02	0.04	-0.04	-0.03	-0.02	0.00
9	6	0.02	-0.05	0.04	-0.08	-0.04	-0.01	0.10	0.04	-0.02
10	1	0.04	-0.14	0.01	-0.06	-0.07	-0.03	0.06	0.11	0.02
11	8	0.01	0.01	-0.04	0.02	0.01	-0.03	-0.03	-0.02	0.03
12	6	-0.05	0.03	-0.07	0.07	-0.04	0.10	-0.10	0.00	-0.11
13	1	-0.03	0.03	-0.06	0.27	0.03	0.04	-0.05	0.08	-0.17
14	6	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.01	0.02	-0.01	-0.01

15	8	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.01	-0.01
16	6	0.03	-0.03	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.02	0.03	-0.01
17	1	0.06	0.03	0.06	-0.05	0.06	-0.03	0.09	-0.06	0.06
18	1	-0.07	0.04	-0.04	0.00	0.05	-0.05	-0.01	-0.05	0.05
19	1	0.08	0.00	0.08	0.15	-0.01	0.08	-0.13	0.01	-0.04
20	6	0.03	0.09	-0.06	0.03	0.09	0.03	-0.02	-0.04	-0.03
21	1	-0.10	-0.03	0.02	-0.05	0.03	0.08	-0.04	0.01	-0.01
22	6	-0.07	-0.07	-0.06	-0.05	-0.04	-0.01	0.01	0.02	0.01
23	1	0.08	0.21	0.01	0.02	0.15	-0.05	-0.03	-0.05	-0.03
24	1	-0.14	0.29	-0.36	-0.01	0.13	-0.17	0.02	-0.06	0.08
25	1	0.17	-0.05	0.31	0.14	-0.06	0.20	-0.06	0.02	-0.11
26	6	0.03	-0.02	-0.03	0.01	-0.01	0.06	-0.04	-0.01	0.07
27	1	0.01	-0.10	0.02	0.20	0.00	-0.05	0.15	0.02	-0.05
28	1	0.16	-0.06	0.02	-0.17	-0.02	-0.05	-0.16	-0.11	-0.05
29	6	-0.01	-0.02	0.05	-0.02	-0.02	0.03	0.05	0.00	0.00
30	1	-0.04	-0.07	0.06	0.02	-0.03	-0.01	-0.09	-0.01	0.10
31	1	0.00	-0.06	-0.05	0.00	-0.08	0.03	-0.01	0.09	-0.12
32	6	0.01	0.00	0.04	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.02
33	1	0.04	0.32	0.11	-0.05	-0.04	-0.07	0.07	0.21	0.10
34	6	0.02	-0.04	-0.07	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.03
35	1	-0.02	-0.06	-0.06	0.02	0.04	-0.01	-0.07	-0.07	0.02
36	6	0.01	-0.03	-0.01	0.04	0.02	-0.01	0.04	-0.01	-0.09
37	1	-0.03	0.03	-0.11	-0.08	-0.03	0.00	-0.17	0.00	-0.23
38	1	-0.01	0.03	0.08	-0.09	0.02	-0.15	-0.17	0.07	-0.14
39	1	0.00	0.04	0.06	0.02	-0.05	0.17	0.01	0.02	0.20
40	6	-0.06	0.04	0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.06	0.01	-0.06
41	1	-0.17	-0.08	0.10	0.00	0.06	-0.13	-0.04	-0.12	0.03
42	6	-0.02	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.05	0.04	0.00	0.06
43	1	0.05	0.01	-0.08	-0.07	-0.06	0.16	-0.12	-0.06	0.24
44	1	0.05	0.01	-0.03	-0.07	-0.01	-0.01	-0.13	-0.02	-0.01
45	1	0.00	-0.02	0.07	-0.02	-0.01	-0.07	-0.02	0.00	-0.17
46	6	0.00	-0.02	0.01	0.04	-0.01	-0.01	0.01	-0.03	0.01
47	1	0.15	0.01	-0.16	-0.29	-0.11	0.41	-0.10	-0.07	0.15
48	6	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.02	-0.03
49	1	-0.05	0.01	-0.04	0.09	0.07	0.09	0.11	0.00	0.10
50	1	0.05	0.01	0.03	-0.15	-0.09	-0.14	-0.15	-0.02	-0.09
51	6	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.02	0.03	-0.01	0.00	0.03
52	1	-0.09	0.03	-0.04	0.19	-0.11	-0.01	0.23	-0.12	0.03
53	6	-0.01	0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00
54	1	-0.09	-0.01	-0.08	0.04	-0.01	0.04	0.04	0.00	0.03
55	6	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
56	1	0.03	-0.10	0.05	-0.02	0.03	-0.03	-0.01	0.01	-0.02
57	6	0.02	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00
58	1	0.03	0.00	0.04	-0.01	0.01	-0.02	-0.03	0.03	-0.05
59	8	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.01	0.04
60	8	0.01	0.00	0.04	-0.02	0.03	-0.08	0.03	-0.01	0.08
61	8	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01
62	6	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.02	-0.01
63	6	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.00
64	6	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02
65	8	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01
66	1	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	-0.01

67	6	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02
68	1	0.01	0.05	0.02	0.01	0.02	0.01	0.03	0.08	0.03
69	1	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.01
70	1	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.00
71	6	0.01	0.02	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	0.02	0.00
72	1	0.06	-0.04	-0.07	0.00	0.01	-0.02	0.05	-0.04	-0.05
73	1	-0.01	-0.05	0.00	-0.05	0.01	0.04	-0.01	-0.05	-0.01
74	1	-0.08	-0.01	0.06	0.01	0.00	-0.03	-0.05	0.00	0.03
		115			116			117		
		A			A			A		
Frequencies --		1134.3370			1144.4015			1149.5402		
Red. masses --		1.6287			2.6343			2.9135		
Frc consts --		1.2348			2.0327			2.2684		
IR Inten --		2.0658			27.0332			200.0358		
Raman Activ --		19.6536			7.8819			6.6811		
Depolar (P) --		0.4121			0.6811			0.4517		
Depolar (U) --		0.5837			0.8103			0.6223		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	0.04	0.01	-0.03	0.05	0.02	0.02	0.00	0.03
2	6	0.04	-0.02	-0.04	0.04	-0.02	-0.06	0.00	0.00	-0.02
3	6	0.01	0.05	0.03	0.07	-0.07	-0.01	-0.02	0.00	-0.01
4	6	-0.02	0.05	0.01	-0.10	0.13	-0.05	0.07	-0.01	-0.02
5	6	0.02	0.00	-0.03	0.03	0.00	0.05	-0.01	-0.01	0.00
6	6	-0.09	-0.02	0.09	0.12	0.01	-0.07	-0.03	0.00	-0.02
7	8	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
8	6	0.01	0.00	-0.02	0.03	-0.06	0.06	0.05	-0.01	0.03
9	6	0.01	-0.01	-0.03	0.05	-0.03	-0.09	-0.02	0.00	0.00
10	1	0.03	-0.01	-0.04	0.16	-0.21	-0.17	0.08	-0.14	-0.07
11	8	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01
12	6	-0.02	-0.02	0.01	-0.08	-0.03	-0.01	0.01	0.02	0.00
13	1	0.02	-0.01	0.00	0.14	0.03	-0.04	-0.05	-0.06	0.08
14	6	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
15	8	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.02	-0.02	-0.02	0.00	-0.01
17	1	-0.04	0.00	-0.04	0.03	-0.04	0.03	-0.03	0.01	-0.02
18	1	0.05	0.00	0.01	-0.02	-0.03	0.02	-0.01	0.01	-0.02
19	1	0.02	-0.01	-0.02	-0.09	0.01	-0.04	0.01	0.00	0.00
20	6	-0.01	-0.01	0.03	-0.03	0.07	0.10	-0.01	0.02	0.01
21	1	-0.02	0.01	0.04	0.03	0.08	0.04	0.02	-0.04	-0.03
22	6	0.03	-0.02	-0.02	0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.02
23	1	0.07	-0.04	0.14	0.06	-0.01	0.10	0.02	0.01	0.03
24	1	-0.09	0.05	-0.04	-0.08	0.06	-0.06	-0.03	0.03	-0.03
25	1	-0.04	0.05	0.03	-0.01	0.03	0.07	0.00	0.01	0.03
26	6	0.00	0.02	-0.04	-0.03	-0.04	0.03	0.01	0.01	0.01
27	1	-0.15	0.03	0.04	0.13	-0.10	-0.04	0.06	-0.02	0.00
28	1	0.35	-0.25	0.03	-0.23	0.13	-0.01	-0.05	0.04	-0.01
29	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.02	-0.03	0.00	-0.02
30	1	0.00	0.01	0.01	0.04	0.05	-0.05	0.10	0.01	-0.12
31	1	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.02	0.09	-0.02	0.01	0.15
32	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.01	0.00	-0.01
33	1	-0.07	-0.22	-0.08	-0.04	-0.21	-0.10	-0.04	-0.13	-0.06
34	6	0.00	0.02	0.02	-0.01	0.03	0.04	0.00	0.01	0.01

35	1	0.13	0.12	-0.07	0.06	0.05	0.03	0.07	0.04	-0.02
36	6	0.02	-0.04	0.00	0.05	-0.08	0.01	-0.04	0.02	0.01
37	1	-0.06	0.04	-0.18	-0.13	0.07	-0.33	0.10	0.00	0.12
38	1	-0.05	0.04	0.07	-0.10	0.10	0.23	0.08	-0.04	0.02
39	1	0.02	0.07	0.10	0.04	0.15	0.26	-0.02	-0.02	-0.15
40	6	-0.01	0.04	0.01	0.02	0.04	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01
41	1	-0.21	-0.39	0.40	-0.04	0.04	-0.04	0.02	0.08	-0.11
42	6	0.04	0.01	-0.03	-0.07	0.00	0.02	0.02	0.00	0.01
43	1	-0.05	0.03	0.05	0.10	-0.02	-0.13	-0.05	-0.02	0.08
44	1	-0.07	0.00	-0.02	0.13	0.01	0.00	-0.04	0.00	-0.01
45	1	0.01	0.06	-0.17	-0.02	-0.08	0.27	0.00	0.02	-0.07
46	6	0.03	-0.03	-0.03	-0.01	-0.03	0.04	-0.01	0.02	0.00
47	1	-0.11	-0.13	0.23	0.16	-0.03	-0.11	-0.03	0.05	-0.02
48	6	-0.03	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.01
49	1	-0.01	0.09	0.01	0.10	0.00	0.09	-0.06	-0.05	-0.06
50	1	-0.03	-0.09	-0.10	-0.09	0.01	-0.02	0.05	0.03	0.05
51	6	0.06	0.00	-0.03	-0.05	0.02	0.02	0.00	-0.01	0.01
52	1	0.03	-0.05	-0.09	-0.03	-0.02	-0.02	0.01	0.03	0.05
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.02
55	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.02	-0.01
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.01	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01
59	8	0.01	-0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
60	8	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.02	-0.03	-0.08	0.02
61	8	0.00	0.01	0.00	0.01	0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.00
62	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.08	0.20	-0.02
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.02	0.06
64	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.18	-0.16
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01
66	1	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.29	-0.14
67	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.05	0.11	0.13
68	1	0.01	0.04	0.01	0.01	0.02	0.01	0.19	0.58	0.19
69	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.05	0.04	-0.14
70	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.04	-0.06
71	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01
72	1	0.02	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.08	-0.07	-0.09
73	1	-0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.05	-0.06	-0.05
74	1	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00

118

119

120

A

A

A

Frequencies --	1156.1874	1162.6332	1164.8183
Red. masses --	2.2635	2.2795	2.4665
Frc consts --	1.7827	1.8154	1.9718
IR Inten --	28.1722	50.6621	9.3342
Raman Activ --	11.6347	10.2198	9.3366
Depolar (P) --	0.6354	0.4074	0.6701
Depolar (U) --	0.7770	0.5789	0.8025

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.06	-0.09	-0.04	-0.04	0.08	0.12	-0.09	0.02
2	6	-0.02	0.02	0.05	-0.02	0.01	0.05	-0.02	0.02	-0.02

3	6	0.01	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.03	0.01
4	6	0.00	0.15	-0.08	0.04	0.10	-0.03	-0.05	0.03	0.04
5	6	-0.01	-0.03	0.01	0.04	0.00	0.07	-0.03	-0.01	-0.04
6	6	0.03	-0.03	0.01	-0.05	0.07	-0.07	0.03	-0.06	0.04
7	8	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00
8	6	-0.08	0.05	-0.06	0.09	0.01	-0.04	0.11	-0.06	0.13
9	6	-0.02	0.04	0.00	-0.03	0.03	0.08	0.00	0.05	0.09
10	1	-0.09	0.36	0.09	-0.10	0.26	0.16	-0.02	0.07	0.10
11	8	-0.01	-0.02	0.00	0.03	0.01	-0.01	0.04	0.00	0.00
12	6	0.01	-0.08	0.07	0.03	-0.07	0.01	0.05	-0.04	-0.03
13	1	0.12	-0.07	0.07	-0.04	-0.07	0.00	-0.02	-0.02	-0.06
14	6	0.00	0.02	0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.03	0.02
15	8	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.02	0.03	0.01
16	6	0.03	-0.01	0.02	-0.03	-0.01	0.02	-0.03	0.02	-0.06
17	1	0.02	0.01	0.01	-0.13	0.04	-0.11	0.05	-0.02	0.05
18	1	0.02	0.00	0.01	0.07	0.05	-0.03	-0.12	-0.02	-0.03
19	1	0.04	-0.01	0.03	0.10	-0.02	-0.03	-0.12	0.02	-0.02
20	6	0.05	-0.04	-0.05	-0.02	-0.03	-0.09	-0.09	0.01	-0.08
21	1	-0.03	0.05	0.04	-0.03	-0.02	-0.07	0.00	-0.04	-0.16
22	6	-0.01	0.04	0.05	0.02	0.00	-0.04	-0.06	0.03	0.01
23	1	-0.12	-0.01	-0.19	0.03	-0.07	0.10	-0.11	0.09	-0.21
24	1	0.16	-0.13	0.16	-0.11	0.02	-0.02	0.12	-0.04	0.01
25	1	0.01	-0.07	-0.13	-0.10	0.08	-0.05	0.09	-0.09	-0.01
26	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.03	0.02	0.01	-0.02
27	1	-0.02	0.03	0.00	0.20	-0.17	-0.02	-0.12	0.11	0.01
28	1	-0.04	0.06	0.00	-0.10	-0.04	-0.03	0.08	0.01	0.01
29	6	0.06	-0.02	0.03	-0.05	-0.02	-0.01	-0.08	0.02	-0.06
30	1	-0.13	-0.05	0.15	0.15	-0.04	-0.17	0.27	-0.04	-0.33
31	1	0.01	0.01	-0.19	-0.06	0.06	0.25	-0.09	0.18	0.42
32	6	0.01	0.01	0.03	-0.04	0.00	0.04	-0.01	0.02	-0.03
33	1	0.08	0.31	0.13	-0.07	-0.16	-0.01	0.04	0.03	0.01
34	6	0.00	-0.03	-0.02	0.02	-0.01	-0.04	0.00	-0.01	0.01
35	1	-0.19	-0.12	0.06	0.24	0.16	-0.20	-0.09	-0.14	0.12
36	6	0.00	-0.08	0.02	-0.04	-0.04	0.01	0.03	-0.02	-0.02
37	1	-0.02	0.10	-0.26	0.08	0.08	-0.10	-0.09	0.01	-0.13
38	1	0.02	0.05	0.29	0.11	0.00	0.23	-0.07	0.04	0.01
39	1	0.02	0.16	0.05	-0.01	0.12	-0.14	0.02	0.03	0.14
40	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.03	-0.02	0.00	0.01
41	1	-0.06	-0.06	0.04	-0.07	-0.11	0.04	-0.04	0.00	0.01
42	6	-0.02	0.01	-0.01	0.03	-0.03	0.03	-0.02	0.02	-0.02
43	1	0.04	-0.02	-0.05	-0.07	0.02	0.09	0.05	-0.02	-0.05
44	1	0.06	0.02	-0.04	-0.09	-0.03	0.08	0.07	0.02	-0.08
45	1	-0.01	-0.04	0.10	0.00	0.05	-0.12	-0.01	-0.04	0.08
46	6	0.02	-0.01	0.00	-0.03	-0.03	0.02	0.02	-0.01	-0.02
47	1	0.00	-0.10	0.14	0.16	0.01	-0.19	-0.07	-0.13	0.23
48	6	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.01
49	1	0.02	0.02	0.02	0.04	-0.04	0.03	0.02	0.05	0.03
50	1	-0.06	-0.05	-0.06	-0.03	0.04	0.02	-0.06	-0.08	-0.09
51	6	0.00	0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.03	0.02	0.01	-0.02
52	1	-0.07	0.00	-0.05	0.18	-0.08	0.05	-0.12	0.01	-0.09
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	-0.04	-0.02	-0.03	0.06	0.02	0.05	-0.08	-0.03	-0.07

55	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.03	0.00
56	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.03	0.00
57	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.02	0.01	-0.02	-0.02	-0.02
58	1	0.01	-0.02	0.02	-0.02	0.03	-0.04	0.02	-0.03	0.03
59	8	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
60	8	-0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.01	0.00
61	8	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.01	0.01
62	6	0.02	0.05	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00
63	6	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	-0.04	-0.04	0.00	0.02	0.02	0.00	0.01	0.01
65	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	-0.08	-0.03	0.00	0.04	0.02	0.00	0.01	0.01
67	6	-0.01	0.02	0.03	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01
68	1	0.05	0.15	0.05	-0.02	-0.06	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01
69	1	0.01	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01
70	1	0.04	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
73	1	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.01
74	1	0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

121

122

123

A

A

A

Frequencies --	1172.2135	1178.2209	1180.1007
Red. masses --	2.2510	1.9783	3.0281
Frc consts --	1.8224	1.6181	2.4846
IR Inten --	26.3241	2.8925	18.7873
Raman Activ --	10.8926	1.7435	1.4104
Depolar (P) --	0.6183	0.5381	0.5821
Depolar (U) --	0.7641	0.6997	0.7359

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.09	-0.02	-0.07	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01
2	6	0.02	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.02
3	6	-0.05	0.02	0.06	0.01	0.01	0.01	-0.02	0.00	0.01
4	6	0.02	0.04	-0.04	-0.09	-0.10	-0.03	0.08	0.03	-0.01
5	6	0.05	0.01	0.07	-0.03	0.01	0.03	0.02	0.01	0.04
6	6	-0.10	0.11	-0.01	0.06	0.13	0.02	-0.09	0.03	-0.02
7	8	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
8	6	-0.03	-0.01	0.08	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.02
9	6	0.01	-0.01	-0.02	-0.02	0.02	0.02	0.00	-0.02	-0.02
10	1	0.08	-0.18	-0.09	-0.07	0.12	0.07	0.06	-0.16	-0.07
11	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.07	0.04	0.02	-0.03	-0.01	-0.01
13	1	-0.09	-0.05	0.03	0.09	0.03	0.04	-0.12	-0.03	0.01
14	6	-0.01	-0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.04	0.09	0.03
15	8	-0.04	-0.06	-0.03	0.01	0.02	0.01	0.11	0.17	0.09
16	6	0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01
17	1	0.11	-0.01	0.11	-0.01	0.00	-0.02	0.02	0.01	0.03
18	1	-0.12	-0.02	-0.01	0.02	0.00	0.01	-0.03	0.00	-0.01
19	1	-0.09	0.03	0.05	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.03
20	6	-0.01	0.04	0.04	0.00	-0.03	-0.03	0.01	0.02	0.03
21	1	0.03	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0.02	-0.01	0.01
22	6	-0.05	0.01	0.04	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00

23	1	-0.08	0.11	-0.19	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.02
24	1	0.16	-0.05	0.03	0.01	-0.01	0.02	0.02	0.00	-0.01
25	1	0.14	-0.11	0.05	-0.01	-0.01	-0.03	0.03	-0.01	0.03
26	6	0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.05	-0.02	0.01	0.01	0.01
27	1	0.08	-0.15	0.02	-0.08	-0.03	0.01	0.11	-0.10	0.00
28	1	0.13	-0.15	0.00	0.21	-0.23	0.02	-0.03	-0.01	-0.02
29	6	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.02
31	1	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.02	-0.05	-0.04
32	6	0.04	0.01	-0.05	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01
33	1	0.08	0.15	0.01	0.01	0.02	0.02	0.01	0.01	-0.02
34	6	-0.02	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01
35	1	-0.28	-0.22	0.24	0.01	0.01	-0.02	-0.07	-0.04	0.06
36	6	-0.02	-0.03	0.01	0.05	0.05	0.00	-0.04	-0.02	0.01
37	1	0.03	0.04	-0.06	-0.08	-0.08	0.13	0.09	0.04	0.00
38	1	0.05	0.00	0.13	-0.09	0.00	-0.22	0.10	-0.03	0.13
39	1	0.00	0.06	-0.06	0.01	-0.13	0.17	-0.02	0.05	-0.16
40	6	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.04	0.03	0.00	-0.03	-0.01
41	1	0.03	-0.06	0.06	0.02	-0.14	0.23	0.03	0.05	-0.09
42	6	0.05	-0.05	0.00	-0.04	-0.05	-0.01	0.04	-0.02	0.01
43	1	-0.10	0.10	0.06	0.04	0.10	-0.16	-0.08	0.03	0.10
44	1	-0.15	-0.05	0.18	0.05	-0.03	0.20	-0.11	-0.02	0.04
45	1	0.03	0.14	-0.22	0.04	0.10	0.12	0.01	0.06	-0.18
46	6	-0.01	-0.04	0.01	-0.05	-0.05	0.06	-0.05	-0.02	0.02
47	1	0.12	0.00	-0.16	0.17	-0.01	-0.19	0.14	-0.02	-0.16
48	6	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.06	0.03	0.04	-0.02
49	1	0.03	-0.01	0.02	0.33	0.06	0.29	0.08	-0.03	0.07
50	1	0.02	0.02	0.02	-0.23	-0.03	-0.13	-0.14	0.00	-0.08
51	6	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.01	0.01	-0.04	0.01
52	1	0.24	-0.07	0.06	0.17	-0.22	-0.12	-0.03	-0.16	-0.12
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
54	1	0.17	0.06	0.16	-0.04	-0.01	-0.04	-0.42	-0.15	-0.38
55	6	0.01	0.07	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.02	-0.19	0.02
56	1	0.00	0.09	-0.02	0.01	-0.07	0.02	0.02	-0.31	0.07
57	6	0.04	0.04	0.04	-0.01	0.00	-0.01	-0.12	-0.07	-0.11
58	1	-0.03	0.06	-0.04	-0.01	0.00	-0.02	-0.06	-0.09	-0.04
59	8	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.01
61	8	0.00	0.01	-0.02	0.02	0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.01
62	6	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.00
63	6	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.01
64	6	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.01	0.01
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.02	0.01	-0.01	-0.07	-0.03	0.01	0.03	0.01
67	6	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.02	0.01	0.00	-0.01
68	1	-0.01	-0.04	-0.01	0.03	0.10	0.03	-0.01	-0.04	-0.01
69	1	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.01
70	1	-0.01	0.01	0.01	0.02	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.01
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
73	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.01
74	1	-0.02	0.00	0.01	0.04	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.01

			124			125			126		
			A			A			A		
Frequencies --			1192.9875			1199.1897			1209.0691		
Red. masses --			2.2771			1.7944			1.9362		
Frc consts --			1.9094			1.5204			1.6677		
IR Inten --			3.6039			8.0422			0.5017		
Raman Activ --			5.5890			13.5718			17.5202		
Depolar (P) --			0.2990			0.2435			0.6899		
Depolar (U) --			0.4603			0.3917			0.8165		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6		-0.07	-0.07	-0.01	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.01	0.01
2	6		-0.01	0.01	0.03	-0.02	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
3	6		0.02	-0.03	-0.01	0.03	-0.10	-0.02	0.00	0.02	-0.01
4	6		-0.02	0.00	0.02	-0.05	0.03	0.01	0.15	0.04	0.03
5	6		-0.01	0.01	-0.01	0.02	0.02	0.01	-0.12	-0.03	-0.04
6	6		-0.01	0.01	0.03	-0.09	0.03	0.09	0.04	-0.02	0.02
7	8		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6		0.04	0.22	-0.02	0.01	-0.06	-0.03	0.00	-0.01	0.01
9	6		0.03	-0.01	-0.07	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
10	1		0.16	-0.21	-0.16	-0.03	0.13	0.03	0.02	-0.15	-0.03
11	8		0.02	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
12	6		-0.04	0.01	-0.02	-0.03	-0.01	0.01	-0.02	-0.02	-0.02
13	1		-0.01	0.03	-0.04	0.20	0.07	-0.05	-0.17	-0.04	-0.01
14	6		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.03	0.04
15	8		0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.04	-0.03	-0.03
16	6		-0.02	-0.10	0.01	0.00	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
17	1		-0.12	0.22	-0.04	-0.01	-0.06	-0.03	0.01	0.00	0.01
18	1		-0.08	0.17	-0.19	0.07	-0.04	0.06	-0.01	0.00	0.00
19	1		0.32	0.00	0.22	-0.06	-0.01	-0.08	0.00	0.00	0.01
20	6		0.02	0.02	0.07	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.01	0.02
21	1		0.01	0.03	0.07	-0.02	0.08	0.02	0.03	-0.02	-0.02
22	6		0.03	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01
23	1		-0.03	-0.13	0.03	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.01	0.02
24	1		-0.03	-0.09	0.12	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.02
25	1		-0.10	0.06	-0.14	-0.02	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.02
26	6		0.00	0.00	-0.02	0.03	0.01	-0.05	0.03	-0.01	-0.01
27	1		-0.08	0.02	0.01	-0.07	-0.08	0.05	-0.13	0.16	0.01
28	1		0.06	-0.01	0.01	0.13	0.02	0.02	0.13	-0.10	0.00
29	6		-0.07	-0.08	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00
30	1		0.22	-0.21	-0.25	-0.04	0.05	0.05	-0.04	0.05	0.05
31	1		-0.05	-0.05	0.31	-0.01	0.04	-0.02	0.03	-0.07	-0.07
32	6		0.03	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01
33	1		0.01	0.06	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.02	-0.06	-0.03
34	6		0.00	-0.04	-0.05	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
35	1		-0.24	-0.19	0.07	0.14	0.10	-0.09	0.05	0.04	-0.03
36	6		0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.01	-0.01	-0.06	-0.02	0.00
37	1		-0.03	-0.01	-0.02	-0.06	-0.01	-0.06	0.13	0.05	0.00
38	1		-0.04	0.02	-0.02	-0.06	0.04	0.01	0.13	-0.05	0.12
39	1		0.01	0.00	0.05	0.01	0.02	0.12	-0.03	0.06	-0.19
40	6		0.01	-0.01	0.04	-0.03	-0.07	0.08	-0.06	-0.02	0.00
41	1		0.10	0.12	-0.07	0.23	0.56	-0.50	-0.05	0.09	-0.12
42	6		0.00	-0.01	-0.01	0.03	-0.03	-0.03	-0.03	0.01	-0.01



43	1	0.00	0.03	-0.03	-0.05	0.09	-0.01	0.04	-0.01	-0.05
44	1	0.00	0.00	0.03	-0.07	-0.02	0.09	0.06	0.01	-0.02
45	1	0.01	0.03	-0.01	0.04	0.11	-0.15	0.00	-0.02	0.09
46	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.02	-0.06	0.00	0.06
47	1	0.00	-0.03	0.02	0.04	-0.12	0.06	0.08	-0.04	-0.01
48	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.04	0.00	-0.03
49	1	0.04	0.02	0.04	0.05	0.04	0.05	0.32	0.07	0.27
50	1	-0.03	-0.02	-0.03	-0.05	-0.06	-0.08	-0.37	-0.18	-0.29
51	6	0.01	0.00	-0.01	0.04	0.00	-0.02	0.01	0.06	-0.01
52	1	0.00	-0.02	-0.03	-0.02	-0.02	-0.07	-0.07	-0.17	-0.26
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.01
54	1	0.02	0.00	0.02	0.02	0.00	0.02	0.07	-0.02	0.06
55	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.01
56	1	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.03	-0.01	-0.06	0.22	-0.09
57	6	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.04	-0.01	0.04
58	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.05	-0.02	0.05
59	8	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.05	-0.01	0.01	-0.01	0.02
60	8	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01
61	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.02	0.01	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.02
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.01
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.01	0.04	0.01
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01
68	1	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.01	-0.02	-0.05	-0.02
69	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02
70	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.01
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
72	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.02
73	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.01
74	1	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.02

127

128

129

A

A

A

Frequencies --	1219.3148	1236.5792	1246.6500
Red. masses --	1.9494	1.5197	2.9256
Frc consts --	1.7076	1.3692	2.6789
IR Inten --	19.5929	11.7625	254.8417
Raman Activ --	7.8591	18.8578	9.1404
Depolar (P) --	0.5946	0.4417	0.4728
Depolar (U) --	0.7457	0.6128	0.6421

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.02	-0.06	0.01	-0.05	-0.02
2	6	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.03	0.01	0.05
3	6	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.00
4	6	0.07	0.05	0.01	0.02	-0.02	-0.02	-0.04	-0.01	-0.01
5	6	-0.09	-0.06	-0.06	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01
6	6	0.07	0.11	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.01
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01
8	6	0.00	-0.02	0.00	-0.04	-0.08	-0.10	0.02	0.02	0.04
9	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.04	-0.04	-0.02	0.03	0.00
10	1	0.02	-0.02	-0.02	0.06	0.00	-0.07	0.06	0.00	-0.04

11	8	0.00	0.00	0.00	0.03	0.04	0.02	-0.02	-0.02	0.00
12	6	-0.03	-0.02	0.00	-0.04	0.02	0.01	0.03	0.01	0.02
13	1	0.02	0.00	-0.02	0.12	0.02	0.03	0.09	-0.06	0.09
14	6	-0.04	-0.08	-0.06	0.01	0.02	0.01	0.01	0.02	0.01
15	8	0.04	0.02	0.04	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00
16	6	0.00	0.01	0.00	0.01	0.04	0.03	-0.01	-0.01	-0.01
17	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.10	-0.04	0.01	0.03	0.02
18	1	0.01	-0.01	0.01	0.12	-0.06	0.10	-0.04	0.01	-0.03
19	1	-0.01	0.00	-0.02	-0.08	-0.02	-0.12	0.02	0.01	0.04
20	6	0.00	0.02	0.01	0.01	0.00	0.04	-0.01	0.01	0.00
21	1	-0.01	0.03	0.02	-0.16	0.08	0.21	0.06	0.02	-0.05
22	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.01	0.01
23	1	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.03	-0.04	-0.04	-0.01	-0.05
24	1	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.01	0.01	0.03	-0.02	0.03
25	1	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.03	-0.01	0.00	-0.02	-0.05
26	6	0.03	-0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
27	1	-0.21	0.18	0.01	0.00	0.02	0.00	0.03	-0.05	0.00
28	1	0.29	-0.30	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.00
29	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.01	0.01	0.00
30	1	0.01	-0.01	-0.01	0.20	-0.34	-0.23	-0.10	0.17	0.11
31	1	-0.01	0.03	0.02	-0.23	0.52	0.36	0.10	-0.21	-0.16
32	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.01
33	1	-0.01	-0.02	-0.01	0.07	0.19	0.12	-0.07	-0.16	-0.09
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.02	0.00	-0.02
35	1	0.06	0.05	-0.04	0.07	0.07	-0.04	0.14	0.09	-0.11
36	6	-0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.02	0.01	0.00
37	1	0.05	0.04	-0.05	0.02	0.00	0.03	-0.04	-0.02	0.02
38	1	0.04	-0.01	0.08	0.01	-0.02	-0.02	-0.04	0.02	-0.04
39	1	0.00	0.05	-0.06	0.00	-0.02	-0.04	0.01	-0.02	0.06
40	6	-0.07	-0.01	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.01	0.01
41	1	0.02	0.13	-0.09	0.00	-0.05	0.05	0.04	-0.02	0.05
42	6	-0.03	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01
43	1	0.03	0.06	-0.10	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.01
44	1	0.05	-0.02	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.04
45	1	0.03	0.05	0.12	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.00
46	6	0.04	0.03	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01
47	1	-0.16	0.04	0.15	-0.03	0.07	-0.06	0.00	-0.05	0.04
48	6	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
49	1	-0.11	-0.06	-0.11	0.01	-0.01	0.00	-0.05	-0.03	-0.04
50	1	0.20	0.12	0.19	-0.03	0.01	-0.01	0.05	0.04	0.04
51	6	-0.05	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
52	1	0.39	0.03	0.25	-0.05	-0.04	-0.05	-0.08	-0.01	-0.03
53	6	-0.01	0.05	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
54	1	0.01	0.06	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03	-0.02	-0.03
55	6	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.10	-0.33	0.15	-0.02	0.07	-0.03	-0.03	0.09	-0.04
57	6	-0.03	0.03	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
58	1	-0.08	0.05	-0.09	0.02	-0.01	0.03	0.04	-0.02	0.05
59	8	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01
60	8	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.06	-0.01
61	8	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.01	0.00	0.01	0.03	0.00	0.05	0.21	-0.01

63	6	0.00	-0.02	-0.02	0.00	-0.04	-0.03	0.01	-0.21	-0.16
64	6	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.05	-0.01	0.06
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.02	0.05
66	1	0.01	0.04	0.01	0.03	0.07	0.02	0.13	0.37	0.08
67	6	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.06	0.03	-0.06
68	1	-0.01	-0.04	-0.01	-0.02	-0.06	-0.02	-0.09	-0.30	-0.09
69	1	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.02	0.16
70	1	-0.01	0.01	0.01	-0.02	0.03	0.02	-0.10	0.13	0.09
71	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.02	0.01	-0.01	0.09	0.06
72	1	0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.02	-0.02	0.14	-0.10	-0.10
73	1	-0.02	-0.02	0.01	-0.02	-0.04	0.01	-0.12	-0.20	0.04
74	1	-0.03	0.00	0.01	-0.05	0.00	0.03	-0.26	-0.01	0.13

130

131

132

A

A

A

Frequencies --	1251.9233	1253.6896	1266.4233
Red. masses --	1.5500	2.2410	2.4139
Frc consts --	1.4313	2.0753	2.2810
IR Inten --	0.6008	120.7089	6.8831
Raman Activ --	8.7087	57.0914	16.4996
Depolar (P) --	0.5609	0.3379	0.6808
Depolar (U) --	0.7187	0.5051	0.8101

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.01	0.07	-0.07	-0.13	0.02	0.20	-0.07
2	6	0.01	0.00	-0.01	-0.09	0.04	0.18	-0.01	0.00	0.04
3	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.02	0.05	-0.01	0.01
4	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
5	6	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.01
6	6	0.03	0.10	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
7	8	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.01
8	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.05	-0.07	0.10	0.11
9	6	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.04	-0.02	-0.01
10	1	-0.01	0.06	0.02	0.08	-0.22	-0.12	0.06	0.51	0.07
11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05
12	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.01
13	1	0.04	0.02	-0.02	-0.05	-0.01	-0.01	0.05	0.04	-0.01
14	6	0.05	0.11	0.04	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
15	8	-0.03	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.03	-0.04
17	1	0.00	0.01	0.00	0.04	0.01	0.05	0.11	0.05	0.12
18	1	-0.01	0.00	-0.01	-0.04	-0.01	-0.01	-0.16	0.00	-0.05
19	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	0.05	-0.02	0.04	0.15
20	6	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.04	0.08	-0.04	-0.16	-0.03
21	1	0.00	0.01	-0.01	0.02	0.08	0.06	-0.09	-0.18	0.00
22	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.05	-0.01	-0.06	0.03
23	1	0.01	0.00	0.01	-0.10	0.04	-0.18	0.07	0.14	-0.01
24	1	-0.01	0.01	-0.01	0.14	-0.05	0.05	0.03	0.12	-0.14
25	1	0.00	0.01	0.01	0.04	-0.09	-0.10	0.04	-0.05	0.11
26	6	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
27	1	-0.06	0.05	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.01	-0.01	0.01
28	1	0.13	-0.18	0.00	-0.04	0.03	0.00	0.02	-0.02	-0.01
29	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.02	-0.03
30	1	0.00	0.01	0.00	-0.04	0.08	0.04	0.16	-0.34	-0.23

31	1	0.01	-0.03	-0.01	0.02	-0.06	-0.04	0.02	0.00	0.02
32	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	0.02	-0.01	-0.02
33	1	0.00	0.00	0.00	-0.14	-0.30	-0.16	-0.11	-0.28	-0.18
34	6	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.02
35	1	-0.03	-0.03	0.02	0.48	0.35	-0.38	0.06	0.05	-0.08
36	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	1	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.01
38	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
39	1	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
40	6	-0.02	0.00	0.01	0.03	0.01	0.00	-0.04	-0.03	-0.01
41	1	0.03	0.02	0.01	0.07	-0.08	0.11	-0.09	0.11	-0.18
42	6	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	-0.02	0.04	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01
44	1	-0.01	-0.02	0.11	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
45	1	0.02	0.05	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
46	6	0.02	0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01
47	1	-0.08	-0.01	0.08	0.01	-0.02	0.01	-0.05	0.10	-0.06
48	6	0.02	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
49	1	-0.24	-0.18	-0.23	-0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01
50	1	0.17	0.21	0.21	0.02	0.01	0.02	-0.03	0.00	-0.01
51	6	-0.04	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	-0.17	-0.19	-0.16	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02
53	6	0.02	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	-0.16	-0.10	-0.15	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01
55	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	-0.13	0.46	-0.20	-0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.00
57	6	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.28	-0.10	0.29	0.02	-0.01	0.02	-0.02	0.01	-0.03
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.02
60	8	0.00	0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
62	6	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.01	0.00
63	6	0.00	0.02	0.02	0.00	0.06	0.04	0.00	-0.01	-0.01
64	6	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
66	1	-0.01	-0.04	-0.01	-0.04	-0.09	-0.02	0.01	0.01	0.00
67	6	-0.01	0.00	0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
68	1	0.01	0.03	0.01	0.02	0.07	0.02	0.00	-0.01	0.00
69	1	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.01
70	1	0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
72	1	-0.01	0.01	0.02	-0.04	0.03	0.03	0.00	0.00	0.00
73	1	0.01	0.02	0.00	0.03	0.05	-0.01	0.00	-0.01	0.00
74	1	0.03	0.00	-0.01	0.06	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.00

133

134

135

A

A

A

Frequencies --	1271.8325	1278.0044	1287.2529
Red. masses --	1.5425	1.5726	1.9901
Frc consts --	1.4700	1.5133	1.9429
IR Inten --	4.2401	2.9774	7.0952
Raman Activ --	20.9966	29.5326	7.5823
Depolar (P) --	0.1960	0.3383	0.1005

		Depolar (U) --			0.3278			0.5055			0.1827		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.07	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.09	0.08			
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.03			
3	6	-0.01	0.03	0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.04	0.03	0.00			
4	6	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.08	-0.05	-0.02			
5	6	0.07	-0.06	-0.04	0.02	-0.01	-0.01	-0.05	0.02	-0.02			
6	6	-0.02	-0.04	-0.03	-0.02	-0.04	0.00	0.02	0.06	0.06			
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01			
8	6	0.03	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.01	-0.08	0.01	0.07			
9	6	0.03	-0.03	-0.03	0.01	-0.01	-0.01	0.04	-0.05	-0.04			
10	1	0.02	0.23	0.02	0.01	0.07	0.00	-0.02	0.30	0.05			
11	8	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02			
12	6	-0.07	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.01	-0.10	0.02	0.03			
13	1	0.35	0.08	-0.02	0.09	0.02	0.00	0.39	0.12	-0.03			
14	6	0.02	0.00	0.03	-0.09	0.01	-0.11	-0.01	-0.01	0.00			
15	8	0.00	0.02	-0.01	0.02	-0.07	0.03	0.00	0.00	0.00			
16	6	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.02			
17	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08	0.00	0.06			
18	1	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.09	-0.05	0.02			
19	1	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.03	0.07			
20	6	-0.01	0.04	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.05	0.06	-0.07			
21	1	-0.02	0.20	0.04	-0.01	0.05	0.01	0.02	0.31	0.03			
22	6	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02			
23	1	-0.03	-0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.05	0.01			
24	1	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.01	0.02			
25	1	-0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.02	-0.04			
26	6	0.01	0.02	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.03	-0.01			
27	1	-0.10	0.16	0.00	0.00	0.01	0.01	0.16	-0.21	-0.01			
28	1	0.14	-0.17	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.20	0.26	0.02			
29	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00			
30	1	-0.04	0.09	0.04	0.00	0.01	0.00	0.07	-0.20	-0.11			
31	1	0.05	-0.13	-0.05	0.01	-0.03	-0.01	0.02	-0.03	-0.02			
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.02			
33	1	-0.01	-0.03	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.07	-0.15	-0.11			
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00			
35	1	-0.02	-0.03	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.03	-0.01			
36	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.01			
37	1	-0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.05	0.02	0.04			
38	1	-0.02	-0.01	-0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.05	-0.05	-0.05			
39	1	0.01	-0.02	-0.04	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	-0.08			
40	6	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.02	-0.03			
41	1	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	0.04	-0.14	0.15			
42	6	0.01	0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.03	-0.02			
43	1	0.01	-0.05	0.05	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.06	-0.06			
44	1	-0.02	0.01	-0.07	0.00	0.01	-0.04	0.03	-0.02	0.09			
45	1	-0.03	-0.07	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	0.04	0.09	0.01			
46	6	0.03	0.03	0.08	-0.02	0.01	0.03	-0.03	0.00	-0.04			
47	1	-0.29	0.55	-0.34	-0.02	0.10	-0.10	0.10	-0.23	0.16			
48	6	-0.01	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.02			
49	1	0.02	0.07	0.02	0.10	0.05	0.10	-0.02	-0.06	-0.03			
50	1	-0.08	0.05	0.00	-0.13	-0.10	-0.13	-0.01	-0.06	-0.05			

51	6	-0.01	0.00	-0.01	0.06	0.01	0.04	0.02	-0.01	0.00
52	1	0.01	-0.13	-0.11	0.27	0.06	0.19	-0.17	0.08	-0.01
53	6	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.06	0.00	-0.01	0.00	-0.01
54	1	0.03	-0.01	0.02	-0.12	0.03	-0.12	0.03	0.02	0.04
55	6	-0.01	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.03	0.00	0.01	0.00
56	1	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.10	-0.01	0.02	-0.07	0.03
57	6	0.01	-0.01	0.01	-0.05	0.03	-0.06	0.00	0.00	0.00
58	1	-0.13	0.03	-0.14	0.57	-0.12	0.60	-0.03	0.00	-0.02
59	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
61	8	-0.02	-0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.01
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02
73	1	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
74	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01

136

137

138

A

A

A

Frequencies --	1287.9090	1297.4084	1301.7097
Red. masses --	2.3305	1.7024	1.7359
Frc consts --	2.2776	1.6884	1.7330
IR Inten --	1.5765	1.3878	7.1261
Raman Activ --	14.1367	21.5171	6.9678
Depolar (P) --	0.5582	0.7160	0.5342
Depolar (U) --	0.7165	0.8345	0.6964

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	0.08	-0.06	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.02	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.00
4	6	0.05	-0.02	-0.01	-0.02	0.04	0.03	-0.02	-0.01	-0.01
5	6	-0.03	0.01	-0.01	0.02	-0.09	-0.09	0.05	0.02	0.03
6	6	0.01	0.04	0.04	0.01	0.09	0.10	0.01	-0.04	-0.08
7	8	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.22	-0.02	-0.05	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01
9	6	0.03	-0.05	-0.05	-0.02	0.03	0.03	0.00	-0.01	-0.01
10	1	0.09	0.36	-0.02	-0.01	-0.18	-0.01	0.00	0.06	0.00
11	8	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.06	0.01	0.01	0.04	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00
13	1	0.21	0.07	-0.03	-0.15	-0.03	-0.02	0.03	-0.01	0.02
14	6	-0.01	0.00	0.00	-0.05	-0.01	-0.02	-0.03	-0.01	-0.04
15	8	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01
16	6	-0.06	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.13	0.01	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.08	0.08	-0.06	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00

19	1	0.09	-0.03	-0.11	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	6	-0.13	-0.05	0.06	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.24	0.03	0.18	0.05	-0.13	-0.06	-0.01	0.04	0.02
22	6	-0.01	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.01	0.09	-0.05	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
24	1	0.07	0.05	-0.07	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
25	1	0.03	-0.05	0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
26	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	0.02	0.02
27	1	0.08	-0.11	0.00	0.17	-0.25	0.00	-0.13	0.20	-0.01
28	1	-0.12	0.16	0.01	-0.17	0.24	0.02	0.18	-0.25	-0.01
29	6	-0.02	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	-0.11	0.38	0.16	-0.01	0.02	0.02	0.01	-0.02	-0.01
31	1	0.08	-0.25	-0.06	-0.02	0.06	0.02	0.01	-0.01	-0.01
32	6	-0.02	0.04	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.10	0.19	0.15	0.01	0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.01
34	6	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	-0.11	-0.15	0.09	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
36	6	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
37	1	0.02	0.02	0.01	-0.04	0.01	-0.06	-0.01	-0.01	0.02
38	1	0.02	-0.03	-0.03	-0.04	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00
39	1	0.00	-0.01	-0.06	0.01	0.02	0.02	0.00	-0.01	0.01
40	6	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.03
41	1	0.03	-0.07	0.08	-0.01	-0.04	0.02	0.10	0.04	0.03
42	6	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.03	-0.03	0.00	0.02	0.03
43	1	0.00	0.04	-0.04	-0.04	0.08	-0.05	0.02	-0.06	0.04
44	1	0.01	-0.01	0.05	0.03	-0.02	0.12	-0.01	0.01	-0.07
45	1	0.02	0.06	0.00	0.06	0.13	0.03	-0.04	-0.08	0.00
46	6	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.03	-0.09	0.00	-0.06
47	1	0.05	-0.13	0.09	-0.33	0.37	-0.18	0.12	-0.22	0.05
48	6	0.02	0.00	0.01	0.06	0.06	0.03	0.13	0.06	0.08
49	1	-0.02	-0.05	-0.02	-0.17	-0.15	-0.16	-0.34	-0.35	-0.33
50	1	-0.02	-0.04	-0.04	-0.22	-0.08	-0.17	-0.27	-0.19	-0.25
51	6	0.01	0.00	0.00	0.04	-0.01	0.02	-0.03	0.04	0.04
52	1	-0.10	0.04	-0.01	-0.28	-0.10	-0.20	0.01	-0.21	-0.17
53	6	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	-0.03	-0.01	-0.03
54	1	0.02	0.01	0.02	0.07	0.04	0.08	0.12	0.05	0.11
55	6	0.00	0.01	0.00	0.01	0.03	0.01	0.01	0.04	0.00
56	1	0.02	-0.04	0.02	0.06	-0.15	0.09	0.07	-0.20	0.11
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
58	1	-0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.01	0.03	0.00	-0.02	-0.01
59	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
60	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00</		

71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
73	1	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00
74	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			139			140			141		
			A			A			A		
Frequencies --			1322.4392			1338.9711			1343.2284		
Red. masses --			2.0573			1.4079			1.3888		
Frc consts --			2.1198			1.4872			1.4763		
IR Inten --			7.9781			2.6576			0.0396		
Raman Activ --			13.8929			14.3604			7.8405		
Depolar (P) --			0.6563			0.2962			0.7464		
Depolar (U) --			0.7925			0.4570			0.8548		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	0.03	0.06	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.02	
2	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	
3	6	-0.14	-0.17	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	
4	6	0.05	0.05	0.01	0.01	0.00	0.01	0.02	-0.03	-0.04	
5	6	-0.02	-0.03	-0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01	
6	6	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.08	0.11	-0.01	-0.01	0.01	
7	8	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
8	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00	
9	6	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.08	0.09	
10	1	0.01	0.04	0.02	-0.01	0.04	0.00	0.14	-0.27	-0.03	
11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.03	
12	6	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.08	-0.05	0.01	
13	1	0.01	0.05	-0.06	-0.06	-0.03	0.03	0.57	0.28	-0.27	
14	6	0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	
17	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.00	
18	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	
19	1	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	
20	6	0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	
21	1	0.00	-0.14	-0.05	-0.02	0.05	0.03	0.14	-0.38	-0.23	
22	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
23	1	0.03	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.03	
24	1	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.02	
25	1	0.03	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.02	
26	6	-0.03	0.02	0.01	-0.03	0.04	-0.02	0.01	0.00	0.00	
27	1	-0.06	0.12	-0.01	0.16	-0.25	0.02	0.00	0.00	0.00	
28	1	-0.01	0.03	0.03	-0.07	0.13	0.01	-0.03	0.03	0.00	
29	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.04	-0.01	
30	1	0.03	-0.07	-0.04	0.01	-0.03	-0.02	-0.08	0.21	0.12	
31	1	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.03	-0.01	-0.09	0.22	0.10	
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	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	
34	6	0.00	0.00	0.01	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	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	
37	1	0.05	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.04	-0.03	
38	1	0.03	0.00	0.06	0.00	0.01	0.01	0.02	-0.05	-0.07	



39	1	-0.01	0.03	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.06
40	6	0.08	0.07	0.09	0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01
41	1	0.76	-0.03	0.48	-0.08	-0.01	-0.05	-0.03	-0.02	0.00
42	6	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
43	1	0.01	-0.02	0.00	0.08	0.00	-0.10	0.01	0.00	-0.01
44	1	0.01	0.01	-0.01	0.09	0.02	-0.08	0.01	0.00	-0.03
45	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.02
46	6	0.02	0.01	0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01
47	1	-0.07	0.09	-0.02	0.00	-0.01	0.04	0.04	-0.05	0.03
48	6	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00
49	1	0.05	0.05	0.04	-0.08	-0.09	-0.10	-0.01	-0.02	-0.01
50	1	0.00	0.02	0.02	0.08	0.14	0.14	0.01	0.00	0.01
51	6	0.00	0.00	-0.01	-0.07	0.06	0.02	-0.01	0.01	0.00
52	1	0.06	0.00	0.02	0.58	-0.57	-0.24	0.10	-0.07	-0.02
53	6	0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
54	1	-0.02	-0.01	-0.02	-0.03	-0.01	-0.04	-0.01	0.00	-0.01
55	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	-0.02	0.04	-0.02	-0.02	0.06	-0.03	0.00	0.01	-0.01
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01
59	8	0.00	0.02	-0.09	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.03
73	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01
74	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02

142

143

144

A

A

A

Frequencies --	1351.4078	1364.8154	1367.4102
Red. masses --	1.6154	1.2713	1.8665
Frc consts --	1.7382	1.3953	2.0563
IR Inten --	3.8793	6.4354	5.4518
Raman Activ --	2.9367	2.7506	20.2257
Depolar (P) --	0.6670	0.6226	0.1185
Depolar (U) --	0.8002	0.7674	0.2119

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

7	8	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	0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00
10	1	0.01	-0.01	0.00	0.59	0.21	-0.30	0.01	-0.01	0.00
11	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.04	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.01	0.00	0.00	0.03	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
13	1	0.03	0.04	-0.04	-0.10	0.21	-0.29	0.02	0.01	-0.01
14	6	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.09	-0.02
15	8	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.03
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.04	0.07	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.03	0.03	0.01	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	0.08	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
20	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.01	-0.01	-0.01	0.05	-0.05	-0.06	0.00	-0.01	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	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.02	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
25	1	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
26	6	-0.13	0.14	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	0.00
27	1	0.41	-0.49	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.17	-0.01
28	1	0.38	-0.46	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.08	0.00
29	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.01	0.00	0.01	0.00
30	1	-0.01	0.02	0.01	0.09	-0.24	-0.13	0.01	-0.03	-0.02
31	1	-0.01	0.02	0.01	0.10	-0.22	-0.16	0.01	-0.02	-0.01
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.00	0.00	0.05	0.12	0.06	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
35	1	0.00	0.00	0.00	0.06	0.06	-0.03	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
37	1	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.04	-0.07	0.01	0.00	0.01
38	1	0.01	0.00	0.00	-0.07	-0.02	-0.10	0.01	0.00	0.01
39	1	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.02	-0.09	0.00	0.00	0.01
40	6	0.05	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
41	1	0.01	0.04	-0.12	-0.02	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.03
42	6	-0.01	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
43	1	-0.02	-0.11	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.02
44	1	0.03	0.02	0.10	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.02
45	1	0.01	-0.06	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02
46	6	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
47	1	0.04	-0.03	0.06	0.01	-0.01	0.00	0.05	-0.04	0.03
48	6	-0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.03	-0.09
49	1	0.07	0.06	0.05	0.00	0.00	0.00	0.11	0.06	0.09
50	1	0.06	0.05	0.07	0.00	-0.01	0.00	0.27	0.26	0.28
51	6	0.03	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.08	0.03	0.11
52	1	-0.24	0.08	-0.02	0.01	0.01	0.01	-0.18	-0.34	-0.33
53	6	-0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.07	-0.08
54	1	0.05	0.02	0.06	0.00	0.00	0.00	0.26	0.06	0.25
55	6	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.09	0.01
56	1	0.03	-0.08	0.05	0.00	0.01	0.00	0.14	-0.35	0.20
57	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.05	-0.02
58	1	0.02	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.09	0.11

59	8	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	-0.01	0.00	-0.12	-0.22	-0.01	0.00	-0.01	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.04	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.03	0.05	0.00	0.00	0.01
73	1	-0.01	0.00	0.00	-0.05	0.03	0.03	0.00	0.00	0.00
74	1	0.00	0.00	0.01	-0.05	-0.02	0.07	0.01	0.00	0.00

27	1	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
28	1	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
29	6	0.00	0.02	0.00	0.03	-0.10	-0.03	0.00	-0.03	-0.01
30	1	0.04	-0.11	-0.06	-0.16	0.45	0.24	-0.02	0.09	0.04
31	1	0.05	-0.10	-0.07	-0.17	0.38	0.19	-0.04	0.08	0.04
32	6	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.05	-0.05
33	1	0.03	0.06	0.03	-0.03	-0.09	-0.05	0.15	0.29	0.12
34	6	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.05	-0.02	0.06
35	1	0.03	0.03	-0.02	-0.03	-0.02	0.01	0.20	0.18	-0.12
36	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02
37	1	-0.01	0.01	-0.02	-0.02	0.01	-0.02	0.02	-0.05	0.08
38	1	-0.02	-0.01	-0.03	-0.06	0.01	-0.04	0.02	0.05	0.09
39	1	0.01	0.01	-0.03	0.01	0.03	-0.05	-0.01	0.00	0.07
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.01	0.01	0.01	0.00	0.01
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
45	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.02
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
63	6	-0.09	0.01	0.11	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01
64	6	0.00	-0.05	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
65	8	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.38	0.70	0.02	0.03	0.06	0.00	-0.03	-0.06	0.00
67	6	0.01	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
68	1	0.08	0.07	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00
69	1	-0.04	0.18	0.12	0.00	0.02	0.01	0.01	-0.03	-0.02
70	1	0.02	0.14	0.14	0.00	0.02	0.02	-0.01	-0.03	-0.03
71	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
72	1	0.08	-0.09	-0.16	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.01
73	1	0.15	-0.03	-0.09	0.02	0.01	-0.01	0.00	-0.03	-0.01
74	1	0.15	0.04	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04

148

149

150

A

A

A

Frequencies -- 1399.3170

1402.0625

1405.5801

Red. masses -- 1.1990

1.4004

1.3084

Frc consts --			1.3833			1.6220			1.5230		
IR Inten --			5.4113			12.7684			6.3221		
Raman Activ --			6.6084			4.8755			38.7377		
Depolar (P) --			0.5293			0.7456			0.5239		
Depolar (U) --			0.6922			0.8542			0.6876		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	
2	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	
3	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
4	6	0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	
5	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
6	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
7	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	
8	6	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.05	0.04	0.00	0.00	0.00	
9	6	-0.02	0.00	0.04	0.03	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	
10	1	0.29	0.09	-0.12	-0.20	0.03	0.10	-0.01	-0.01	0.00	
11	8	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	
12	6	-0.02	0.04	-0.05	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	
13	1	0.24	-0.41	0.46	-0.12	0.16	-0.17	-0.02	0.02	-0.03	
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
15	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
16	6	0.03	-0.01	0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	
17	1	-0.09	0.06	-0.12	-0.02	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	
18	1	-0.12	0.07	-0.04	-0.01	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	
19	1	-0.14	-0.04	-0.07	-0.05	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	
20	6	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	
21	1	-0.02	-0.18	-0.04	-0.07	0.03	0.06	-0.01	0.01	0.01	
22	6	-0.03	0.03	-0.05	-0.04	0.04	-0.06	0.00	0.00	0.00	
23	1	0.02	-0.14	0.25	0.03	-0.16	0.31	0.00	0.00	0.00	
24	1	0.08	-0.22	0.16	0.09	-0.27	0.19	0.00	0.00	0.00	
25	1	0.26	-0.06	0.21	0.31	-0.06	0.27	0.00	0.00	0.00	
26	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	
27	1	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	
28	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	
29	6	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	
30	1	0.02	-0.03	-0.02	-0.02	0.06	0.02	0.00	0.00	0.00	
31	1	0.01	-0.02	-0.04	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	
32	6	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.06	-0.08	0.00	0.00	0.00	
33	1	-0.03	-0.06	-0.03	0.19	0.37	0.14	0.00	0.00	0.00	
34	6	0.01	0.00	-0.01	-0.07	-0.03	0.07	0.00	0.00	0.00	
35	1	-0.04	-0.04	0.02	0.28	0.25	-0.19	0.00	0.00	0.00	
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	
37	1	-0.04	-0.02	0.01	-0.03	0.04	-0.07	0.00	0.01	-0.01	
38	1	-0.04	0.04	0.03	-0.01	-0.03	-0.07	0.00	-0.01	-0.01	
39	1	0.									

47	1	0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
63	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.05
64	6	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.03
65	8	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
66	1	-0.03	-0.06	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.14	0.22	-0.02
67	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	0.12	0.04
68	1	-0.02	-0.03	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.22	-0.35	-0.04
69	1	0.01	-0.05	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.07	-0.60	0.00
70	1	-0.01	-0.04	-0.04	0.00	0.01	0.01	-0.34	-0.32	-0.36
71	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.03
72	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.05	0.06
73	1	0.02	-0.05	-0.02	-0.01	0.02	0.01	-0.04	0.04	0.01
74	1	0.00	0.01	-0.07	0.00	0.00	0.03	-0.03	-0.03	0.06

151

152

153

A

A

A

Frequencies --	1413.9695	1414.8341	1416.3711
Red. masses --	1.3251	1.7452	1.4309
Frc consts --	1.5609	2.0583	1.6913
IR Inten --	11.5954	5.2808	0.6332
Raman Activ --	25.6085	12.6492	11.5796
Depolar (P) --	0.3239	0.7191	0.7353
Depolar (U) --	0.4894	0.8366	0.8475

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	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01
5	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00
6	6	0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.03
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
10	1	-0.03	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.02	0.03
11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
13	1	-0.03	0.05	-0.05	0.00	-0.03	0.03	0.00	-0.07	0.08
14	6	0.02	0.05	0.01	0.06	0.14	0.02	0.04	0.08	0.01

15	8	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	
17	1	0.02	-0.01	0.03	0.03	-0.01	0.04	0.03	-0.02	0.04	
18	1	0.03	-0.02	0.01	0.05	-0.03	0.02	0.05	-0.02	0.01	
19	1	0.03	0.01	0.02	0.05	0.01	0.03	0.05	0.01	0.02	
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
21	1	-0.02	0.03	0.03	-0.01	-0.01	0.01	0.02	0.02	-0.01	
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	
23	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.03	
24	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03	0.02	
25	1	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.03	
26	6	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	
27	1	0.03	-0.02	-0.01	0.05	-0.05	-0.01	-0.04	-0.02	0.04	
28	1	0.02	-0.01	0.01	0.04	-0.01	0.02	-0.09	0.04	-0.03	
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	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	
31	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	
33	1	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	
35	1	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	-0.02	0.01	-0.02	-0.02	0.01	
36	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.05	
37	1	-0.02	0.05	-0.08	0.00	-0.01	0.02	-0.06	0.10	-0.19	
38	1	-0.04	-0.03	-0.08	0.00	0.01	0.02	-0.10	-0.06	-0.20	
39	1	0.01	0.01	-0.08	0.00	0.00	0.02	0.03	0.04	-0.20	
40	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.03	0.00	-0.01	
41	1	0.01	0.00	0.00	-0.06	0.00	-0.03	0.12	0.00	0.05	
42	6	-0.01	-0.01	0.03	-0.03	-0.03	0.07	0.02	0.04	-0.10	
43	1	0.08	0.09	-0.12	0.17	0.16	-0.24	-0.23	-0.25	0.32	
44	1	0.06	-0.02	-0.16	0.14	-0.03	-0.30	-0.11	0.05	0.43	
45	1	-0.03	0.09	-0.14	-0.05	0.19	-0.27	0.08	-0.20	0.38	
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.00	
47	1	0.01	-0.01	0.01	-0.04	0.05	-0.02	0.03	-0.02	0.00	
48	6	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.03	0.01	0.00	0.02	
49	1	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.05	-0.03	
50	1	-0.03	-0.03	-0.03	-0.07	-0.07	-0.08	-0.08	-0.02	-0.02	
51	6	-0.02	-0.02	-0.03	-0.06	-0.05	-0.07	-0.05	-0.02	-0.05	
52	1	0.11	0.08	0.12	0.28	0.21	0.32	0.28	0.06	0.18	
53	6	-0.03	-0.02	-0.02	-0.07	-0.06	-0.06	-0.04	-0.04	-0.03	
54	1	0.05	0.00	0.05	0.13	0.01	0.13	0.07	0.00	0.07	
55	6	0.01	0.02	0.01	0.02	0.04	0.02	0.01	0.02	0.01	
56	1	0.02	-0.03	0.03	0.06	-0.09	0.07	0.03	-0.05	0.04	
57	6	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.07	0.01	0.00	-0.04	0.01	
58	1	0.01	-0.03	0.02	0.03	-0.09	0.05	0.02	-0.05	0.02	
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
62	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	
63	6	0.03	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	
64	6	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
66	1	-0.08	-0.15	0.00	0.04	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	

67	6	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	-0.02	-0.05	0.00	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	-0.14	0.02	0.00	0.08	-0.01	0.00	0.01	0.00
70	1	-0.09	-0.09	-0.08	0.05	0.05	0.05	0.01	0.00	0.00
71	6	-0.07	0.02	0.10	0.04	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00
72	1	0.12	-0.15	-0.42	-0.07	0.09	0.24	-0.01	0.01	0.01
73	1	0.44	-0.17	-0.21	-0.25	0.10	0.12	0.00	0.00	0.00
74	1	0.20	0.11	-0.43	-0.12	-0.06	0.25	-0.01	0.00	0.00

154

155

156

A

A

A

Frequencies --	1417.3472	1420.5762	1430.8730
Red. masses --	1.2798	1.2435	3.1249
Frc consts --	1.5148	1.4785	3.7696
IR Inten --	1.5081	63.3216	5.2082
Raman Activ --	2.4117	10.8875	17.6337
Depolar (P) --	0.5610	0.3972	0.3196
Depolar (U) --	0.7188	0.5686	0.4844

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



35	1	-0.13	-0.12	0.09	-0.08	-0.07	0.05	-0.03	-0.02	0.02
36	6	0.01	-0.01	0.05	-0.02	0.01	-0.09	0.01	0.00	-0.03
37	1	-0.08	0.11	-0.20	0.09	-0.21	0.35	-0.06	-0.12	0.12
38	1	-0.11	-0.07	-0.21	0.19	0.13	0.38	-0.07	0.13	0.15
39	1	0.04	0.03	-0.23	-0.06	-0.09	0.37	0.00	0.02	0.06
40	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.01	0.06	0.01	0.03
41	1	0.00	0.01	-0.01	-0.17	-0.01	-0.05	-0.26	-0.01	-0.07
42	6	0.00	-0.01	0.02	0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.01	0.00
43	1	0.05	0.06	-0.07	-0.07	-0.08	0.10	-0.05	0.04	0.03
44	1	0.01	-0.01	-0.09	-0.02	0.01	0.14	-0.03	-0.01	-0.01
45	1	-0.02	0.04	-0.08	0.03	-0.05	0.12	0.02	0.03	0.00
46	6	-0.01	0.02	0.00	0.02	-0.03	0.00	-0.18	0.23	0.02
47	1	0.05	-0.04	0.02	-0.08	0.05	-0.03	0.50	-0.28	0.17
48	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.02	-0.08	-0.02
49	1	0.02	0.00	0.02	-0.04	-0.01	-0.03	0.18	0.18	0.07
50	1	0.04	0.02	0.03	-0.04	-0.02	-0.03	0.05	0.09	0.17
51	6	0.02	0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.02
52	1	-0.11	-0.04	-0.09	0.06	0.03	0.05	0.03	0.01	0.01
53	6	0.02	0.02	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01
54	1	-0.03	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.02	-0.01	-0.01	-0.01
55	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	-0.02	0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.01
57	6	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01
58	1	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.04	0.00	-0.04
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.04	0.06
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.01
70	1	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00
71	6	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
72	1	-0.01	0.02	0.04	0.02	-0.02	-0.07	0.01	-0.02	-0.01
73	1	-0.05	0.02	0.02	0.07	-0.01	-0.03	-0.01	0.02	0.01
74	1	-0.02	-0.01	0.05	0.03	0.01	-0.05	0.02	0.01	0.02

157

158

159

A

A

A

Frequencies --	1432.3470	1441.0254	1459.7847
Red. masses --	1.4988	1.8012	1.3625
Frc consts --	1.8117	2.2037	1.7107
IR Inten --	13.1700	8.4482	4.0997
Raman Activ --	2.5850	14.8596	2.0734
Depolar (P) --	0.7017	0.2464	0.7087
Depolar (U) --	0.8247	0.3954	0.8295

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

1	6	0.03	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.04	0.02	0.03
---	---	------	-------	------	------	-------	-------	------	------	------

2	6	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
---	---	-------	------	------	-------	------	------	------	------	------

3	6	-0.04	-0.02	0.00	0.10	0.07	-0.01	0.00	0.00	0.00
4	6	0.02	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	-0.04	0.03	0.03	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
6	6	0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
8	6	-0.03	0.00	-0.06	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	0.02	-0.02
9	6	0.05	-0.06	-0.03	0.03	-0.04	-0.02	-0.03	0.07	0.01
10	1	-0.17	0.21	0.13	-0.08	0.15	0.06	0.09	-0.25	-0.10
11	8	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.01
13	1	-0.11	0.06	-0.05	-0.10	0.03	-0.04	0.11	-0.03	0.02
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	6	0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.02
17	1	-0.03	-0.04	-0.05	0.00	-0.02	0.01	0.01	-0.01	0.03
18	1	-0.03	0.08	-0.04	0.03	0.02	-0.01	0.00	0.13	-0.09
19	1	0.01	-0.05	-0.12	0.03	-0.01	-0.04	0.01	-0.06	-0.14
20	6	-0.07	0.04	0.07	-0.04	0.03	0.04	-0.04	-0.14	0.00
21	1	0.56	-0.09	-0.51	0.26	-0.11	-0.26	0.33	0.78	-0.04
22	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.02	-0.02	-0.03	-0.01	-0.02
23	1	0.02	0.03	0.05	0.00	-0.06	0.11	0.09	0.14	0.11
24	1	0.08	-0.02	-0.02	0.05	-0.12	0.08	0.14	-0.07	-0.01
25	1	0.02	-0.02	0.00	0.12	-0.02	0.10	-0.01	0.03	0.07
26	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.04	0.03	0.00	0.00	0.00
27	1	-0.07	0.03	0.00	0.18	-0.13	0.02	0.02	0.00	-0.01
28	1	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.01	0.01	0.01
29	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
30	1	0.07	-0.09	-0.07	0.03	-0.04	-0.03	0.08	0.01	-0.05
31	1	-0.02	0.02	-0.04	-0.01	0.01	-0.02	-0.03	0.03	-0.11
32	6	0.00	0.01	0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
33	1	-0.03	-0.06	-0.02	-0.02	-0.03	-0.01	0.01	0.02	0.01
34	6	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
35	1	-0.05	-0.04	0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01
36	6	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01
37	1	-0.02	0.09	-0.13	0.01	-0.05	0.07	-0.03	-0.03	0.02
38	1	0.00	-0.08	-0.14	0.03	0.05	0.10	0.00	0.02	0.04
39	1	0.01	-0.02	-0.12	-0.01	-0.01	0.11	0.00	-0.02	0.00
40	6	0.06	0.01	0.03	-0.17	-0.03	-0.08	-0.01	0.00	0.00
41	1	-0.27	0.01	-0.10	0.70	-0.01	0.23	0.04	0.00	0.02
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
43	1	-0.02	0.01	0.01	0.04	0.05	-0.06	0.01	0.04	-0.03
44	1	0.03	0.00	-0.02	0.01	-0.01	-0.10	-0.05	0.0	

55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
69	1	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.02
70	1	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.01
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02
73	1	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.00
74	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02

23	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01
26	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.04	0.00
27	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.38	-0.29	0.38
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.37	-0.29	-0.37
29	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02
38	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.01
39	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
41	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.01
43	1	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.27	0.02
44	1	0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.30	0.03	0.12
45	1	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.14	-0.18
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
47	1	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.01
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.02
50	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	-0.01
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	-0.03	-0.02	0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.02	0.05	-0.01	0.03	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00
67	6	-0.02	0.01	0.05	-0.04	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
68	1	-0.30	-0.33	-0.11	0.38	-0.41	0.41	0.00	0.01	0.00
69	1	0.17	0.20	-0.52	-0.13	0.24	0.28	0.00	-0.01	0.01
70	1	0.48	0.03	-0.03	0.35	-0.26	-0.37	-0.02	0.00	0.00
71	6	0.02	0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
72	1	-0.12	0.19	0.00	0.07	-0.10	0.09	0.00	0.00	0.01
73	1	0.12	-0.18	-0.09	-0.08	-0.07	0.01	0.00	-0.01	0.00
74	1	-0.24	-0.08	-0.20	0.07	0.03	-0.02	0.00	0.00	-0.01

			163			164			165		
			A			A			A		
Frequencies --			1481.7402			1485.6820			1488.1057		
Red. masses --			1.0998			1.0717			1.0535		
Frc consts --			1.4227			1.3937			1.3746		
IR Inten --			4.3280			6.7043			5.2919		
Raman Activ --			14.1082			7.8167			16.1909		
Depolar (P) --			0.7480			0.7358			0.6943		
Depolar (U) --			0.8558			0.8478			0.8196		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6		0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.01
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	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
5	6		-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
6	6		0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	8		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	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.02	0.00
9	6		0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
10	1		0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00
11	8		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1		0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.02
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	6		0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.04	0.00
17	1		0.00	0.01	0.00	0.13	0.04	0.23	0.06	0.40	0.24
18	1		0.01	0.00	0.00	0.12	0.30	-0.23	0.35	0.20	-0.18
19	1		0.00	0.00	0.00	0.01	-0.11	-0.30	-0.24	-0.06	-0.07
20	6		0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
21	1		0.01	0.00	-0.01	-0.12	-0.13	0.06	0.01	0.03	0.00
22	6		0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.02
23	1		-0.01	-0.02	0.00	0.15	0.17	0.25	-0.11	-0.28	0.04
24	1		-0.01	0.01	0.00	0.38	0.03	-0.13	-0.04	0.18	-0.13
25	1		0.01	-0.01	0.00	-0.11	-0.05	-0.23	0.20	-0.24	-0.19
26	6		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1		-0.02	-0.03	0.02	0.02	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.01
28	1		-0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.01
29	6		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01
30	1		0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.03	0.05	0.01	-0.03
31	1		0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.05	-0.02	0.02	-0.06
32	6		0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1		0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.00
34	6		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
35	1		0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01
36	6		0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.00
37	1		0.04	0.03	-0.02	-0.33	-0.09	-0.04	0.29	0.14	-0.05
38	1		0.03	-0.03	-0.03	0.08	0.06	0.16	0.07	-0.13	-0.16
39	1		-0.01	0.01	0.03	0.00	-0.31	-0.16	-0.02	0.15	0.20
40	6		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1		0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
42	6		0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

43	1	0.13	-0.01	-0.11	0.02	-0.04	0.00	-0.01	0.01	0.01
44	1	-0.11	0.00	0.04	0.03	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.01
45	1	-0.07	-0.16	-0.11	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.01
46	6	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
47	1	-0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
48	6	0.05	-0.06	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	-0.08	0.56	-0.35	0.00	0.02	-0.01	0.01	-0.03	0.02
50	1	-0.54	0.28	0.28	-0.02	0.01	0.01	0.03	-0.01	-0.01
51	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
69	1	0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
70	1	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.01
73	1	0.00	0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
74	1	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00

166	167	168
A	A	A

Frequencies --	1490.8318	1492.6161	1494.1815
Red. masses --	1.0625	1.0599	1.0559
Frc consts --	1.3914	1.3912	1.3890
IR Inten --	17.7098	9.3270	11.4059
Raman Activ --	3.4410	17.4033	9.3344
Depolar (P) --	0.7492	0.6115	0.6538
Depolar (U) --	0.8566	0.7589	0.7906

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	0.01
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.01	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	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
6	6	-0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00
7	8	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	0.01	0.00	-0.02
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
10	1	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.02	-0.03	-0.01

11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1	0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.03
17	1	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.02	0.01	-0.15	0.13	-0.20
18	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	-0.02	-0.33	0.24
19	1	-0.01	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.03	-0.12	0.14	0.4
20	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01
21	1	0.02	0.04	0.00	0.02	-0.01	-0.02	0.06	0.06	-0.03
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.02
23	1	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.10	0.20
24	1	-0.03	0.00	0.01	-0.03	-0.01	0.02	0.21	0.17	-0.19
25	1	0.01	0.01	0.02	0.00	0.01	0.03	0.09	-0.22	-0.29
26	6	-0.02	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.17	0.19	-0.20	0.08	0.05	-0.08	0.00	-0.01	0.01
28	1	0.19	0.15	0.19	0.06	0.09	0.08	-0.01	0.00	-0.01
29	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
30	1	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.05	0.02	-0.03
31	1	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.06
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	0.01	0.02	0.02
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	-0.01	0.01
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00
37	1	0.03	0.00	0.01	0.04	0.01	0.01	-0.18	0.00	-0.09
38	1	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	0.15	-0.03	0.07
39	1	0.00	0.04	0.00	0.00	0.04	0.02	-0.02	-0.26	-0.04
40	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.01
42	6	-0.04	0.00	-0.01	0.00	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00
43	1	0.02	-0.42	0.19	0.44	-0.32	-0.22	0.03	-0.02	-0.01
44	1	0.58	0.04	0.15	-0.15	0.04	0.36	-0.01	0.00	0.02
45	1	0.05	0.39	-0.14	-0.23	-0.44	-0.37	-0.01	-0.02	-0.02
46	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01
48	6	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	-0.01	0.09	-0.05	0.02	-0.14	0.08	0.00	0.00	0.00
50	1	-0.07	0.05	0.05	0.13	-0.07	-0.07	0.01	0.00	0.00
51	6	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00		

63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
68	1	0.02	0.03	0.01	0.02	0.02	0.01	0.06	0.05	0.03
69	1	-0.01	-0.01	0.04	-0.01	-0.01	0.03	-0.03	-0.02	0.09
70	1	-0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.06	-0.01	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
72	1	-0.02	0.02	0.03	-0.02	0.03	0.04	-0.08	0.12	0.04
73	1	0.00	-0.05	-0.01	0.00	-0.07	-0.01	0.04	-0.10	-0.04
74	1	-0.04	-0.01	-0.04	-0.05	-0.02	-0.06	-0.16	-0.05	-0.09

169

170

171

A

A

A

Frequencies --	1494.6062	1496.0744	1498.5877
Red. masses --	1.0512	1.0510	1.0659
Frc consts --	1.3835	1.3860	1.4104
IR Inten --	16.7694	20.9180	19.7850
Raman Activ --	18.0139	19.3754	13.2898
Depolar (P) --	0.6020	0.6653	0.7481
Depolar (U) --	0.7516	0.7990	0.8559

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
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	-0.02	0.00	0.01
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.01
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
10	1	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.07	0.02	-0.03
11	8	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	0.01	-0.01
13	1	0.00	0.02	-0.02	-0.05	0.03	-0.04	0.00	-0.04	0.04
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	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01
17	1	0.05	-0.05	0.06	0.00	-0.02	0.00	0.03	-0.35	-0.07
18	1	0.00	0.10	-0.07	-0.01	0.00	0.00	-0.23	-0.01	0.03
19	1	0.04	-0.04	-0.13	0.01	0.00	0.00	0.26	-0.01	-0.12
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
21	1	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.02
22	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
23	1	-0.01	0.03	-0.06	0.01	0.00	0.02	0.08	0.07	0.17
24	1	-0.06	-0.05	0.06	0.03	0.01	-0.01	0.23	-0.01	-0.06
25	1	-0.03	0.07	0.09	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	-0.04	-0.10
26	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	-0.02	-0.02	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00
28	1	-0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
29	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
30	1	-0.02	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.08	-0.02	0.05



31	1	0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.02	0.09
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
33	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	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	0.01	0.01	-0.01
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.00
37	1	0.07	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.33	0.25	-0.19
38	1	-0.02	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.34	-0.29	-0.20
39	1	0.00	0.07	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.05	0.37
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
42	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	-0.06	0.09	0.01	-0.02	0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.02
44	1	-0.05	-0.01	-0.07	-0.01	0.00	-0.02	0.03	0.00	0.00
45	1	0.03	0.02	0.06	0.01	0.01	0.02	0.01	0.03	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
47	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.02	0.02	-0.01	0.01
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.02
50	1	-0.03	0.02	0.02	-0.02	0.01	0.01	0.03	-0.01	0.00
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.01	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
68	1	0.19	0.15	0.09	-0.09	0.07	-0.08	0.00	0.00	0.00
69	1	-0.09	-0.05	0.27	0.03	-0.06	-0.07	0.00	0.00	0.00
70	1	-0.18	-0.02	0.00	-0.07	0.03	0.06	0.00	0.00	0.00
71	6	0.04	0.00	0.01	0.00	0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00
72	1	-0.26	0.37	0.13	0.20	-0.33	0.50	0.00	-0.01	-0.02
73	1	0.11	-0.32	-0.11	-0.33	-0.53	0.02	0.00	0.02	0.00
74	1	-0.49	-0.16	-0.30	0.19	0.10	-0.33	0.01	0.00	0.02

	172	173	174
	A	A	A
Frequencies --	1507.2569	1514.0912	1522.5028
Red. masses --	1.0543	1.0607	1.0929
Frc consts --	1.4111	1.4327	1.4927
IR Inten --	2.2136	12.9483	5.4574
Raman Activ --	5.2799	27.3727	13.4777
Depolar (P) --	0.7500	0.7216	0.7440

Depolar (U) --				0.8571		0.8383			0.8532		
Atom		AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.02	-0.01		0.01	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	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00		0.00	0.00	0.00
5	6	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00
7	8	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	0.01	-0.01	-0.01		0.00	-0.01	-0.02
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		-0.01	0.00	0.00
10	1	-0.03	-0.03	0.02	-0.01	0.03	0.01		0.02	0.00	-0.01
11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	-0.01
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00
13	1	0.02	0.02	-0.02	0.00	0.01	-0.01		0.01	-0.01	0.01
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	6	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.02	-0.01		0.01	-0.01	0.00
17	1	0.02	-0.21	-0.05	-0.07	0.28	-0.01		-0.05	0.20	-0.02
18	1	-0.13	-0.02	0.03	0.13	-0.08	0.04		0.09	-0.02	0.01
19	1	0.17	0.00	-0.05	-0.23	0.05	0.20		-0.16	0.02	0.10
20	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00		-0.01	-0.01	0.01
21	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.09	0.01		0.09	0.08	-0.05
22	6	-0.02	0.01	0.01	-0.02	-0.03	-0.02		0.00	-0.01	0.00
23	1	0.02	-0.10	0.23	0.24	0.45	0.14		0.03	0.08	-0.01
24	1	0.24	0.13	-0.17	0.35	-0.18	0.04		0.02	-0.04	0.02
25	1	0.10	-0.21	-0.26	-0.30	0.22	0.05		-0.05	0.05	0.04
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	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	-0.01	-0.01	-0.01	0.01		0.03	0.05	-0.06
30	1	-0.08	-0.04	0.04	0.12	0.07	-0.06		-0.52	-0.35	0.26
31	1	0.03	-0.03	0.10	-0.04	0.03	-0.13		0.20	-0.20	0.58
32	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00
33	1	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01		0.00	0.01	0.01
34	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00		0.00	0.00	0.00
35	1	0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01		0.00	0.00	0.00
36	6	0.01	-0.04	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01		0.00	0.00	0.00
37	1	0.15	-0.12	0.25	0.24	0.04	0.07		0.01	0.01	-0.01
38	1	-0.43	0.20	-0.01	-0.09	-0.01	-0.09		0.02	-0.01	-0.01
39	1	0.06	0.49	-0.12	0.00	0.26	0.11		0.00	0.00	0.02
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00
41	1	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00
43	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00		0.00	-0.01	0.00
44	1	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00		0.01	0.00	0.00
45	1	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00		0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00
47	1	-0.03	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00		0.00	0.00	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00
49	1	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00
50	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00

51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	-0.01	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
73	1	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
74	1	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01

175

176

177

A

A

A

Frequencies --	1530.1712	1625.9499	1648.5716
Red. masses --	3.9431	5.6809	6.9531
Frc consts --	5.4396	8.8487	11.1338
IR Inten --	23.5845	1.4847	54.0221
Raman Activ --	101.1704	24.0532	158.0979
Depolar (P) --	0.1357	0.1538	0.1882
Depolar (U) --	0.2390	0.2665	0.3168

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.01
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	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.02
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.08	-0.03
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
10	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
14	6	0.11	-0.04	0.12	0.23	-0.25	0.28	0.00	0.00	0.00
15	8	0.04	-0.04	0.04	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
17	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.05
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.04	0.02

[illegible]

71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
73	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
74	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
178				179				180		
A				A				A		
Frequencies --		1692.7491				1719.1678				1753.6214
Red. masses --		6.6007				11.6727				11.3940
Frc consts --		11.1436				20.3263				20.6443
IR Inten --		159.0973				374.9763				326.2675
Raman Activ --		264.4437				96.2937				24.7567
Depolar (P) --		0.2061				0.3500				0.1984
Depolar (U) --		0.3418				0.5185				0.3311
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.32	0.70	0.01	0.00	0.01	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	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	8	0.00	0.00	0.00	-0.22	-0.47	0.01	0.00	-0.01	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01
10	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.02	-0.03
11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.04
13	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.04	-0.08	0.07
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	6	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	1	0.00	0.00	0.00	0.01	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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	0.01	0.00	0.02	0.04	-0.01	-0.02	0.01	0.02
22	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.04	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.09	0.06	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.06	0.00	0.00	0.00
26										



[illegible]

59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01
67	6	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	-0.21	0.06	0.27	0.00	0.00	-0.01
69	1	0.00	0.00	0.00	0.63	0.01	0.21	0.03	0.00	0.01
70	1	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.48	-0.45	0.00	0.02	-0.02
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06
72	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.25	-0.18	-0.05
73	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.37	-0.18	0.76
74	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.12	0.36	-0.01

184

185

186

A

A

A

Frequencies --	3032.6993	3037.1375	3037.6919
Red. masses --	1.0627	1.0595	1.0605
Frc consts --	5.7587	5.7581	5.7654
IR Inten --	53.4612	41.1544	31.8756
Raman Activ --	124.5063	121.0025	223.2480
Depolar (P) --	0.1018	0.1476	0.0745
Depolar (U) --	0.1848	0.2573	0.1386

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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	1	0.01	0.00	0.03	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	6	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	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.09	0.02	-0.06	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01
18	1	0.00	0.05	0.07	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01
19	1	0.00	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.05	-0.01	0.05	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	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	6	0.00	0.00	0.00	0.05	0.04	-0.01	0.01	0.01	0.00



27	1	0.00	0.00	-0.01	-0.27	-0.23	-0.51	-0.05	-0.04	-0.09
28	1	0.00	0.00	0.01	-0.32	-0.28	0.61	-0.06	-0.05	0.11
29	6	-0.02	0.03	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.53	-0.17	0.71	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
31	1	-0.35	-0.15	0.03	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	0.01	0.00	-0.01	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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
39	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
43	1	0.00	0.00	0.00	0.06	0.04	0.06	0.06	0.04	0.06
44	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.08	0.00
45	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.01	-0.05	0.01	0.01
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.02	-0.03	-0.02
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.06	0.02
49	1	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.02	-0.06	-0.38	0.11	0.33
50	1	0.00	0.01	0.00	-0.02	-0.12	0.11	0.09	0.61	-0.55
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	-0.05	-0.03	-0.05	0.05
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
73	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
74	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00

187

188

189

A

A

A

Frequencies -- 3040.0004

3050.8703

3050.9200

Red. masses -- 1.0398

1.0557

1.0665

Frc consts --			5.6616			5.7896			5.8487		
IR Inten --			30.2712			2.6091			53.1131		
Raman Activ --			283.1418			311.9550			89.4753		
Depolar (P) --			0.0417			0.0503			0.1617		
Depolar (U) --			0.0800			0.0958			0.2784		
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	8	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	0.01	-0.02	0.01	-0.04	-0.03	0.01	-0.05	
10	1	-0.04	0.01	-0.08	0.26	-0.08	0.50	0.35	-0.10	0.65	
11	8	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	0.01	0.00	
13	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.05	0.00	-0.06	-0.06	
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	6	-0.05	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
17	1	0.56	0.13	-0.39	0.04	0.01	-0.03	0.05	0.01	-0.04	
18	1	0.00	0.35	0.46	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	
19	1	0.00	-0.35	0.11	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.03	0.01	
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	
21	1	-0.03	0.01	-0.04	0.05	-0.02	0.06	0.07	-0.02	0.08	
22	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
23	1	-0.05	0.02	0.02	-0.03	0.01	0.01	-0.04	0.02	0.02	
24	1	-0.01	-0.02	-0.03	-0.01	-0.03	-0.04	-0.01	-0.04	-0.04	
25	1	0.02	0.02	-0.01	0.02	0.03	-0.01	0.02	0.03	-0.01	
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	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	0.01	0.01	0.02	
28	1	0.00	0.00	0.01	-0.04	-0.04	0.08	0.03	0.03	-0.06	
29	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
30	1	-0.08	0.03	-0.11	-0.02	0.01	-0.03	-0.03	0.01	-0.04	
31	1	0.03	0.01	0.00	-0.01	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	-0.01	0.00	0.01	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	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	
37	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.04	-0.03	0.02	-0.05	-0.03	
38	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	-0.01	0.02	0.04	-0.02	
39	1										



[illegible]





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	8	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	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
10	1	-0.04	0.01	-0.06	0.06	-0.02	0.10	0.02	-0.01	0.05
11	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	0.00	0.03	0.03	0.01	-0.05	-0.05	0.00	0.00	0.00
13	1	0.03	-0.33	-0.31	-0.06	0.62	0.59	0.00	0.05	0.04
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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.01	-0.08
17	1	-0.01	0.00	0.01	0.04	0.01	-0.03	-0.53	-0.13	0.36
18	1	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.04	0.02	0.44	0.56
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.15	0.03
20	6	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	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.01	0.01	0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02
25	1	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.01
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	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	-0.01	0.00	0.00
30	1	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.03	-0.01	0.04
31	1	0.02	0.01	0.00	-0.04	-0.02	0.00	0.11	0.05	-0.01
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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
37	1	0.02	-0.04	-0.03	-0.02	0.06	0.03	-0.01	0.02	0.01
38	1	0.02	0.03	-0.02	-0.03	-0.06	0.03	0.00	-0.01	0.00
39	1	-0.05	0.00	0.00	0.09	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.0	

55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
67	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	-0.05	0.02	0.07	-0.03	0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
69	1	-0.04	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	-0.05	0.05	-0.03	-0.03	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
72	1	0.21	0.18	0.02	0.11	0.09	0.01	0.00	0.00	0.00
73	1	0.16	-0.07	0.34	0.10	-0.05	0.21	0.00	0.00	0.01
74	1	0.22	-0.70	-0.02	0.11	-0.36	-0.01	0.00	-0.02	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	0.01	0.01	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	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
29	6	-0.09	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.20	-0.08	0.29	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	1	0.82	0.39	-0.10	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	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	1	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
39	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.07	-0.02	0.00	0.00	0.00
43	1	0.00	0.00	0.00	0.39	0.23	0.40	-0.01	0.00	-0.01
44	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.72	-0.04	0.00	-0.01	0.00
45	1	0.00	0.00	0.00	0.30	-0.10	-0.09	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.04	-0.15
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	-0.07
68	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.54	0.17	0.70
69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.00	-0.08
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.17	0.15
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
72	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.14	-0.10	-0.02
73	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.04
74	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.00

[illegible]

43	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.07	-0.05	0.00	0.01	0.01	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.03	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.05	0.07	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	-0.01	0.00	0.00	-0.71	-0.51	-0.09	0.03	0.02	0.00	0.00
73	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.04	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00
74	1	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.39	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00

205	206	207
A	A	A

Frequencies --	3140.2706	3141.8739	3143.4693
Red. masses --	1.1003	1.0998	1.0997
Frc consts --	6.3928	6.3962	6.4023
IR Inten --	38.9181	28.9110	10.9021
Raman Activ --	116.5827	111.4035	48.9392
Depolar (P) --	0.6330	0.7411	0.5829
Depolar (U) --	0.7753	0.8513	0.7365

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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.04	-0.01	0.00	-0.01

[illegible]

63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
68	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
71	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
73	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
74	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

208

209

210

A

A

A

Frequencies --	3144.3416	3154.8146	3160.4647
Red. masses --	1.0877	1.0910	1.0887
Frc consts --	6.3363	6.3974	6.4073
IR Inten --	14.1749	36.7377	13.1398
Raman Activ --	225.2879	233.4891	103.7241
Depolar (P) --	0.4552	0.1956	0.2100
Depolar (U) --	0.6256	0.3272	0.3471

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	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	1	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	6	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	0.02	0.02	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	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	-0.07	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	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	0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.02	0.03	-0.01	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	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	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

31	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	6	0.05	0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	-0.58	-0.12	0.72	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	6	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.00	-0.22	-0.24	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00
39	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
46	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00
47	1	0.00	0.00	0.00	0.45	0.71	0.52	0.00	0.01	0.00
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
51	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
52	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
53	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
54	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
55	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
56	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
57	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
59	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
60	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
61	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
62	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
63	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
64	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.02	-0.07
65	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
66	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.55	0.22	0.78
67	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
68	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.04	0.14
69	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.02
70	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	0.04
71	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
72	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.05	-0.01	0.01	0.01	0.00
73	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
74	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00

211

212

213

A

A

A

Frequencies --	3170.4225	3175.3082	3189.3244
Red. masses --	1.1006	1.0950	1.0881
Frc consts --	6.5180	6.5050	6.5212
IR Inten --	12.9561	19.8811	8.3712
Raman Activ --	111.1091	372.2174	160.0412
Depolar (P) --	0.7239	0.2288	0.1687

Depolar (U) --			0.8398			0.3724			0.2887		
			Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X
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	0.00	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	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	8	0.00	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	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	1	0.01	0.00	0.02	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	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1	0.00	0.01	0.01	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	0.00
15	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.01	0.04	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.02	0.03	-0.01	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	0.03	0.02	0.05	
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	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	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	0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	
33	1	0.00	0.00	0.00	-0.20	-0.04	0.24	0.00	0.00	0.00	
34	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.06	0.00	0.00	0.00	
35	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.64	0.69	0.00	0.00	0.00	
36	6	-0.06	-0.07	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
37	1	-0.07	0.15	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
38	1	0.39	0.73	-0.37	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	
39	1	0.36	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	
40	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.06	-0.05	
41	1	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.25	0.71	0.65	
42	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
43	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
44	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
45	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
46	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
47	1	0.02	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
48	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
49	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	

[illegible]



[illegible]

[illegible]