

Supporting Information for

Predicted siliconoids by bridging Si₉ clusters through sp³-Si linkers

Laura-Alice Jantke, Thomas F. Fässler*

Outline

Bond lengths for Si₉ clusters within the different compounds

Band Structures and DOSs of Polymers

Position Parameters for Polymers

Vibrational Frequencies for Polymers

Position Parameters for Molecular Compounds

Vibrational Frequencies of Molecular Compounds

Bond lengths for Si₉ clusters within the different compounds

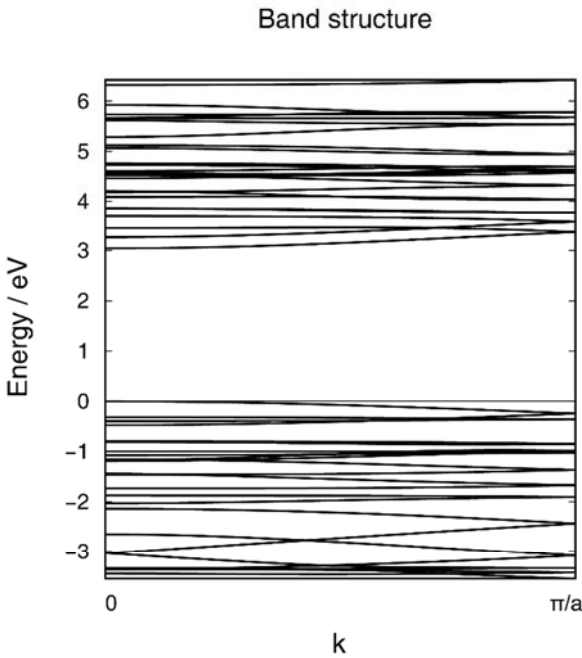
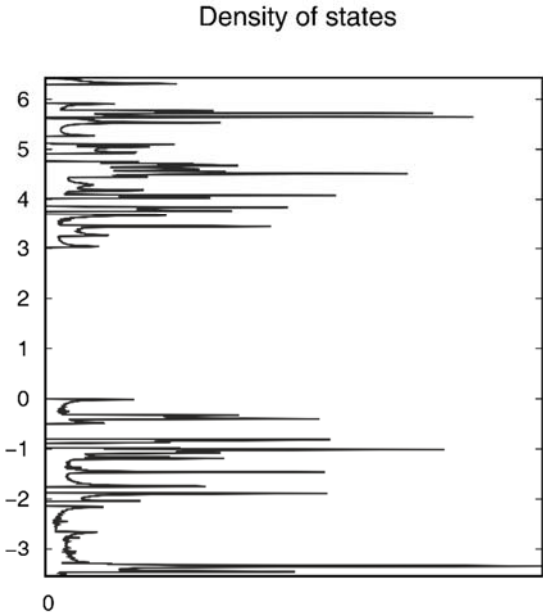
Table 1. Characteristic bond lengths for nido-clusters are listed for all Si₉ clusters. If a compound is built of more than one Si₉ cluster, just one is described. All position parameters are listed below.

Polymers	P1	P2				
AA/Å	2.35-2.36	2.35-2.36				
AB/Å	2.48-2.50	2.48-2.49				
BB/Å	2.66	2.66				
BC/Å	2.47-2.50	2.48-2.49				
<i>d1</i> /Å	3.33	3.33				
<i>d2</i> /Å	3.33	3.33				
<i>d1/d2</i>	1.00	1.00				
Charged compounds	M1	M2	M3	M4	M5	M6
AA/Å	2.39-2.46	2.37-2.51	2.36-2.52	2.36-2.52	2.37-2.50	2.37-2.51
AB/Å	2.39-2.50	2.42-2.50	2.42-2.51	2.42-2.51	2.41-2.51	2.41-2.50
BB/Å	2.49-2.69	2.62-2.66	2.61-2.64	2.61-2.65	2.61-2.67	2.60-2.65
BC/Å	2.40-2.46	2.43-2.44	2.43-2.44	2.43-2.44	2.43-2.45	2.43-2.45
<i>d1</i> /Å	4.00	3.69	3.77	3.77	3.68	3.66
<i>d2</i> /Å	2.69	3.18	3.08	3.09	3.19	3.23
<i>d1/d2</i>	1.49	1.16	1.22	1.22	1.15	1.13

Band Structures and DOSs of Polymers

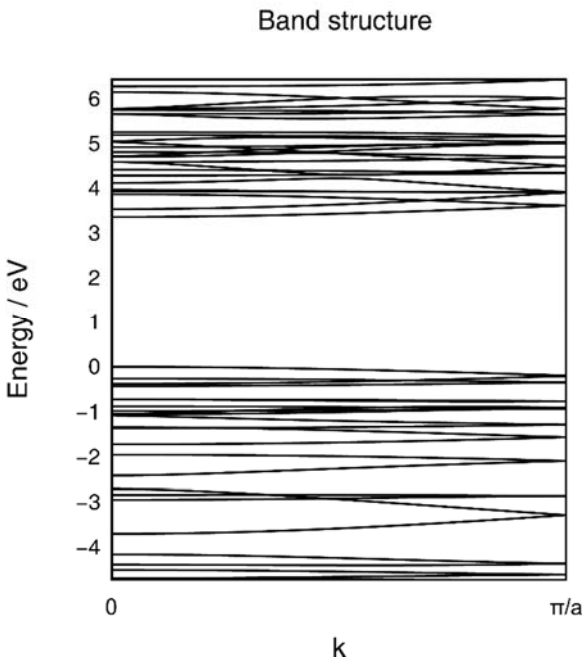
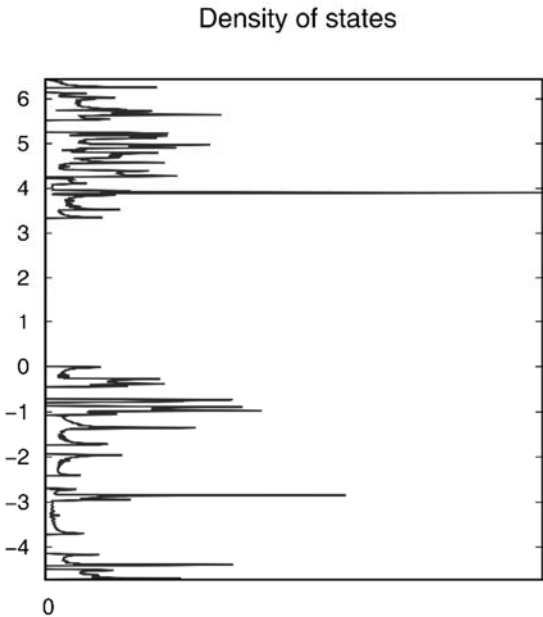
a)

P1



b)

P2



Position Parameters for Polymers

Structural parameters of optimized Si structures are given in the CRYSTAL09 input format.

rod group number^[1]
Minimal set of lattice parameters a, α
Number of non-equivalent atoms in the asymmetric unit
<atomic number> <fractional x> <y> <z>

P1 $\{\infty^1([\text{Si}_9]-(\text{SiCl}_2)_2)_n\}$

```
2
11.94126351
15
14 -1.932142114178E-04 2.589321202739E+00 1.198737178962E-02
14 -2.502405474650E-01 -1.894617377340E+00 -2.538754796034E+00
14 -4.056460692186E-01 6.715027824086E-03 -2.521081286482E+00
14 -2.502100885894E-01 1.908176834899E+00 -2.526997500799E+00
14 -2.504201134824E-01 1.208005072110E-02 -4.160146585580E+00
14 -1.515305017821E-01 1.179955838120E+00 -4.519897976044E-01
14 -1.515243520374E-01 -1.180720218369E+00 -4.591204025331E-01
14 -3.483536079691E-01 1.179933773658E+00 -4.474733537399E-01
14 -9.476036499905E-02 6.374222799127E-03 -2.527589500223E+00
14 -3.483689424697E-01 -1.180538035735E+00 -4.544008133251E-01
17 3.335927232329E-02 3.797689416371E+00 -1.609987738106E+00
17 -3.420854635892E-02 3.777145571534E+00 1.647890417290E+00
14 -4.996974961702E-01 2.589002595131E+00 1.642504958071E-02
17 -4.660307556026E-01 3.769929045571E+00 1.658460617160E+00
17 4.673417600768E-01 3.805291556766E+00 -1.601329444705E+00
```

P2 $\{\infty^1([\text{Si}_9]-(\text{SiH}_2)_2)_n\}$

```
2
11.61267826
15
14 -4.118501412985E-05 2.626690980419E+00 9.201747173875E-03
14 -2.501663109339E-01 -1.874362011965E+00 -2.705731230222E+00
14 -4.111954294786E-01 1.407028079905E-02 -2.689661706263E+00
14 -2.499013724987E-01 1.900330942397E+00 -2.686556005525E+00
14 -2.500763098151E-01 2.105374031059E-02 -4.316261340072E+00
14 -1.486481579765E-01 1.179662584809E+00 -6.127934796580E-01
14 -1.486661526535E-01 -1.178933956458E+00 -6.266181566326E-01
14 -3.513160932710E-01 1.184196279434E+00 -6.138978707452E-01
14 -8.888450950442E-02 1.219360343583E-02 -2.690937688903E+00
14 -3.513422319418E-01 -1.174792748084E+00 -6.245296223527E-01
1 3.464630207228E-02 3.476360738724E+00 -1.141148541898E+00
1 -3.475588248285E-02 3.470358930209E+00 1.163913561535E+00
14 4.999137588734E-01 2.626778060755E+00 1.350443019621E-02
1 -4.654987844882E-01 3.468632817290E+00 1.169981568997E+00
1 4.652371715662E-01 3.478585488227E+00 -1.135405295555E+00
```

Position Parameters for Molecular Complexes

Structural parameters of molecular compounds are given in xyz coordinates.

M1 η^3 -[Si(Si₉)Cl₃]³⁻

13

Cl	-2.85018	3.34859	0.86256
Si	-3.67725	3.10887	4.47120
Si	-4.89331	5.16904	4.57237
Si	-4.95337	3.92492	6.69517
Si	-4.17263	1.62696	6.28550
Si	-5.32026	1.24083	4.21852
Si	-5.77086	3.45466	3.14696
Si	-7.03613	4.26931	5.37698
Si	-6.58805	2.06526	6.44509
Si	-7.52282	2.18138	4.17294
Cl	-4.96948	0.93230	0.54568
Cl	-2.26231	0.49520	2.25328
Si	-3.91051	1.94720	2.18242

M2 η^1 -[Si(Si₉)Me₃]³⁻

22

C	-1.82426	2.96085	2.37631
C	-4.29693	2.48910	4.08976
Si	-4.76562	2.03607	0.70631
Si	-4.96695	3.99893	-0.60594
Si	-7.29788	3.12372	-0.88463
Si	-6.93328	1.09239	0.53777
Si	-4.98557	-0.00789	-0.57667
Si	-3.56678	2.08494	-1.39295
Si	-5.67159	2.98342	-2.68322
Si	-7.06504	0.91383	-1.87010
Si	-4.86206	0.69018	-2.89800
C	-2.77929	0.11474	2.94407
Si	-3.35119	1.87269	2.57654
H	-3.66301	2.44791	4.98087
H	-5.18313	1.87754	4.27568
H	-4.62606	3.52229	3.95538
H	-2.10026	3.99515	2.15915
H	-1.18984	2.60486	1.56198
H	-2.17472	-0.28159	2.12568
H	-3.63015	-0.55502	3.08681
H	-2.17562	0.09820	3.85718
H	-1.23448	2.95289	3.29833

M3 η^1 -[Si(Si₉)H₃]³⁻

13

H	-1.95413	2.64784	1.61298
Si	-4.32557	2.72589	3.75519
Si	-5.18488	4.89722	4.05227
Si	-4.78535	4.17575	6.43195
Si	-3.93701	1.86060	5.91135
Si	-5.79162	0.94278	4.49723
Si	-6.66835	3.06051	3.20704
Si	-7.02863	4.30019	5.49560
Si	-6.16278	2.20607	6.78716
Si	-7.87552	2.05524	5.05890
H	-4.01700	2.14551	0.55744
H	-2.91366	0.49632	1.89425
Si	-3.26118	1.94893	1.83184

M4 [SiCl₂(Si₉)₂]⁶⁻

21

Cl	-2.00867	3.41584	1.50924
Si	-4.40850	2.79318	4.02838
Si	-5.02071	5.01270	4.54152
Si	-4.53056	4.08653	6.82923
Si	-3.94174	1.75545	6.09343
Si	-5.97457	1.10526	4.77138
Si	-6.73923	3.39936	3.69564
Si	-6.81602	4.48153	6.07111
Si	-6.06290	2.22732	7.15106
Si	-7.90327	2.35868	5.55950
Si	-5.02029	1.96792	0.07361
Si	-5.62951	3.91608	-1.09992
Si	-7.71364	2.52655	-1.34617
Si	-6.87146	0.51932	-0.07747
Si	-4.74126	-0.01134	-1.30394
Si	-3.86543	2.37727	-2.01889
Si	-6.17623	2.85072	-3.19870
Si	-7.03804	0.49083	-2.48779
Si	-4.87458	0.82007	-3.58119
Cl	-2.57178	0.25614	2.26278
Si	-3.62021	2.08033	1.94577

M5 [SiCl(Si₉)₃]⁹⁻

29

Cl	-2.35300	3.84429	1.06947
Si	-4.35483	2.59718	3.60852
Si	-5.37222	4.71374	3.99731
Si	-4.35884	4.37769	6.26132
Si	-3.32871	2.16991	5.70966
Si	-5.29932	0.81927	4.94154
Si	-6.78321	2.67800	3.72596
Si	-6.75215	4.11796	5.88845
Si	-5.29142	2.29917	7.10754
Si	-7.33465	1.74311	5.89500
Si	-5.15418	1.98274	-0.19634
Si	-6.28424	3.98265	-0.78843
Si	-8.19419	2.37747	-0.99262
Si	-6.86098	0.35132	-0.35386
Si	-4.99842	0.39655	-2.03320
Si	-4.57019	2.98906	-2.32902
Si	-7.10667	3.31375	-2.95309
Si	-7.51335	0.73686	-2.65014
Si	-5.68185	1.62862	-4.00475
Si	1.42385	0.05985	0.85381
Si	-0.61043	-0.13992	-0.58444
Si	-1.68435	0.48590	1.43870
Si	0.16569	0.72672	2.91032
Si	1.09617	-1.48965	2.70220
Si	0.53915	-2.10756	0.20128
Si	-2.02122	-1.78491	0.67751
Si	-1.44595	-1.15962	3.20564
Si	-0.60121	-3.14462	2.09886
Si	-3.48067	2.02396	1.48102

M6 [Si(Si₉)₄]¹²⁻

37

Si	-0.02439	-1.91934	-0.92377
Si	0.46461	0.08198	-2.34358
Si	2.64570	-0.22326	-1.45036
Si	2.31184	-2.11036	-0.03226
Si	0.52860	-1.26366	1.35505
Si	-0.79400	0.29816	-0.29490
Si	1.39570	1.71208	-0.68527
Si	2.69675	0.12646	0.97494
Si	0.57814	1.17401	1.53082
Si	7.31603	-0.18729	1.91291
Si	6.70423	1.77703	0.48389
Si	6.43325	0.08842	-1.17850
Si	6.99301	-1.84750	0.07031
Si	9.20815	-1.24224	0.81807
Si	9.00069	1.37154	1.10537
Si	8.33446	1.62237	-1.38743
Si	8.53136	-0.99892	-1.71300

Si	10.2823	0.34138	-0.70388
Si	4.63702	4.19940	-2.99359
Si	4.86012	2.06385	-4.00278
Si	6.75192	2.49639	-5.39150
Si	6.58708	4.79844	-4.43104
Si	4.34474	5.57065	-4.96189
Si	2.94150	3.39359	-4.65072
Si	4.50473	2.15500	-6.41277
Si	5.88960	4.32129	-6.71537
Si	3.44553	4.29474	-6.84481
Si	2.76789	-2.03789	-5.82010
Si	4.63157	-1.73376	-4.35946
Si	6.44490	-2.13657	-5.84475
Si	4.58900	-2.45835	-7.48377
Si	3.22028	-4.26852	-6.60534
Si	3.24603	-3.72150	-4.04629
Si	5.88206	-3.79854	-4.05459
Si	5.85443	-4.34386	-6.62357
Si	4.51068	-5.56719	-4.98581
Si	4.63679	0.04601	-2.75081

Vibrational Frequencies of the molecular compounds

M1

Harmonic frequencies (cm⁻¹), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A⁴/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	--	49.2668			52.8607			58.5974		
Red. masses	--	29.3179			29.2531			31.9005		
Frc consts	--	0.0419			0.0482			0.0645		
IR Inten	--	1.0175			0.9052			0.1806		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.00	0.07	0.04	-0.11	-0.25	-0.19	0.40	-0.18	0.17
2	14	0.20	-0.03	0.27	0.15	0.29	0.13	-0.05	0.24	-0.12
3	14	0.03	-0.05	-0.08	-0.10	0.20	0.36	-0.28	0.11	-0.02
4	14	-0.15	0.15	-0.04	-0.09	-0.16	0.10	-0.01	0.07	-0.03
5	14	-0.08	0.13	0.38	0.03	-0.02	-0.07	0.22	0.17	-0.12
6	14	0.26	-0.12	0.22	0.22	0.26	-0.15	0.11	0.09	-0.03
7	14	0.31	-0.22	0.06	0.18	0.31	0.03	-0.16	0.04	-0.03
8	14	-0.09	-0.03	-0.18	-0.09	-0.11	0.03	-0.12	-0.16	0.05
9	14	-0.12	0.06	-0.05	-0.07	-0.14	-0.12	0.17	-0.09	0.07
10	14	0.23	-0.17	-0.17	0.19	0.03	-0.28	0.03	-0.19	0.10
11	17	-0.24	0.17	-0.04	-0.15	-0.20	0.09	-0.07	0.34	-0.15
12	17	-0.15	-0.04	-0.27	0.00	-0.01	0.06	-0.27	-0.35	0.05
13	14	-0.10	0.05	-0.07	-0.09	-0.11	-0.01	0.02	-0.04	0.02
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	95.8086			101.1573			130.0441		
Red. masses	--	32.0637			31.8252			31.8222		
Frc consts	--	0.1734			0.1919			0.3171		
IR Inten	--	0.3218			0.5268			10.7770		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.28	0.17	0.49	0.04	-0.04	-0.18	-0.19	0.20	0.33
2	14	0.09	0.12	0.09	0.09	0.02	0.14	0.11	0.00	-0.10
3	14	-0.04	0.11	-0.01	-0.11	-0.03	-0.10	0.11	-0.08	-0.21
4	14	0.17	-0.02	-0.13	0.18	-0.02	-0.14	0.07	-0.07	-0.16
5	14	-0.08	-0.07	-0.04	0.01	-0.09	0.09	0.13	-0.07	-0.24
6	14	0.11	0.16	-0.11	0.01	-0.07	0.06	0.05	-0.08	-0.10
7	14	-0.02	0.08	0.00	0.17	-0.17	0.03	0.05	0.00	-0.16
8	14	0.01	0.00	-0.06	-0.05	0.01	0.29	0.10	-0.08	-0.13
9	14	-0.08	0.19	0.20	0.02	-0.04	-0.05	0.10	-0.05	-0.16
10	14	0.09	-0.06	0.05	0.05	0.10	-0.01	0.15	-0.06	-0.24
11	17	0.22	-0.18	-0.37	0.16	-0.06	-0.37	-0.27	0.10	0.32
12	17	0.00	-0.12	-0.12	-0.28	0.19	0.48	-0.14	0.06	0.39
13	14	-0.20	-0.34	0.01	-0.28	0.17	-0.22	-0.10	0.05	0.19
		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies	--	146.4872			148.5590			183.8647		
Red. masses	--	31.0386			31.1002			31.3560		
Frc consts	--	0.3924			0.4044			0.6246		
IR Inten	--	0.8136			0.7766			0.4096		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.26	-0.12	-0.26	-0.25	0.25	-0.04	0.37	-0.04	0.23
2	14	0.03	-0.10	-0.05	0.03	-0.06	-0.19	0.04	-0.10	-0.20
3	14	0.26	-0.04	0.14	0.18	-0.03	0.14	0.30	-0.05	0.18
4	14	-0.11	-0.04	0.09	-0.33	0.05	0.18	-0.20	-0.04	0.05
5	14	-0.05	-0.03	0.01	0.24	0.29	0.05	0.12	0.13	-0.04
6	14	0.12	-0.01	-0.08	-0.04	-0.01	0.17	0.02	-0.01	0.01
7	14	-0.15	0.10	0.13	0.04	0.06	0.04	-0.15	0.12	0.16
8	14	0.03	0.02	-0.40	0.03	0.05	-0.04	-0.02	0.07	-0.21
9	14	-0.03	0.19	0.17	0.12	-0.26	-0.18	0.04	0.00	0.01
10	14	0.07	-0.32	0.14	-0.02	0.12	-0.07	-0.01	-0.16	0.09
11	17	0.04	0.35	-0.22	0.31	-0.14	-0.07	-0.16	-0.33	-0.11
12	17	0.06	0.00	0.33	-0.30	-0.33	0.03	-0.10	0.37	-0.03
13	14	0.03	-0.05	0.04	0.04	0.06	-0.01	-0.28	0.06	-0.17
		10			11			12		

		A			A			A		
Frequencies	--	186.7952			236.0959			237.1112		
Red. masses	--	31.3034			28.0021			30.3996		
Frc consts	--	0.6435			0.9196			1.0070		
IR Inten	--	0.3928			0.0881			8.9562		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.15	0.27	-0.19	-0.01	-0.04	0.01	0.08	0.34	-0.03
2	14	-0.03	0.04	0.13	-0.11	-0.20	-0.15	-0.21	-0.12	-0.24
3	14	-0.02	0.05	0.04	0.22	-0.04	-0.09	-0.16	0.11	0.37
4	14	0.15	-0.03	-0.02	0.22	0.17	-0.11	0.33	-0.03	-0.06
5	14	-0.19	-0.24	-0.07	-0.24	0.20	0.30	0.02	0.11	0.17
6	14	0.14	-0.01	-0.22	0.17	0.08	-0.04	-0.04	-0.07	0.11
7	14	-0.10	0.06	0.08	-0.32	0.31	-0.02	0.14	-0.03	0.04
8	14	-0.05	0.00	-0.12	0.07	-0.15	0.40	-0.08	-0.07	-0.13
9	14	-0.02	0.25	0.09	-0.15	-0.13	-0.15	-0.03	0.13	-0.02
10	14	0.09	-0.28	0.09	0.11	-0.22	-0.20	-0.06	0.01	-0.10
11	17	0.17	-0.24	0.29	0.03	0.02	0.01	-0.30	-0.09	-0.09
12	17	-0.37	-0.16	-0.05	0.01	-0.01	0.01	0.19	-0.19	0.22
13	14	0.09	0.32	-0.05	-0.02	0.01	0.01	0.15	-0.11	-0.26
		13			14			15		
		A			A			A		
Frequencies	--	238.3062			251.9102			281.2025		
Red. masses	--	29.2558			28.3077			28.5738		
Frc consts	--	0.9789			1.0584			1.3312		
IR Inten	--	1.8887			71.8627			42.3982		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.06	0.21	-0.03	-0.03	-0.12	0.01	0.02	0.05	-0.05
2	14	0.09	0.06	0.21	-0.24	0.01	0.12	0.45	0.02	-0.13
3	14	0.10	0.06	-0.24	0.04	0.29	0.02	0.11	-0.02	-0.02
4	14	-0.19	0.05	-0.05	0.27	-0.07	-0.26	-0.03	-0.10	-0.40
5	14	-0.16	-0.09	0.15	0.14	-0.14	0.22	0.05	0.05	-0.20
6	14	0.16	0.32	-0.23	-0.07	0.18	0.17	-0.04	0.05	0.10
7	14	-0.07	-0.07	0.04	-0.01	-0.02	0.26	-0.02	-0.03	0.45
8	14	0.13	0.10	-0.04	0.11	-0.06	-0.35	-0.32	0.08	0.18
9	14	0.09	-0.38	-0.12	0.14	-0.17	-0.28	-0.22	0.04	-0.04
10	14	-0.17	0.03	0.36	-0.28	-0.08	-0.07	-0.21	-0.07	0.00
11	17	-0.25	-0.09	-0.06	0.12	0.04	0.02	0.06	0.09	0.14
12	17	0.13	-0.14	0.16	-0.06	0.06	-0.09	0.16	-0.15	0.00
13	14	0.11	-0.05	-0.17	-0.13	0.08	0.23	-0.08	0.00	-0.04
		16			17			18		
		A			A			A		
Frequencies	--	282.3608			284.1437			287.2655		
Red. masses	--	28.5797			29.0939			27.9780		
Frc consts	--	1.3425			1.3840			1.3603		
IR Inten	--	43.0589			88.8874			0.0713		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.09	0.09	-0.12	0.13	0.19	-0.15	-0.01	-0.01	0.00
2	14	0.21	-0.03	-0.16	-0.06	0.12	0.30	0.02	-0.23	0.11
3	14	-0.02	-0.24	-0.01	0.17	0.04	-0.30	0.12	0.02	0.08
4	14	0.08	-0.23	-0.09	-0.12	-0.03	0.13	-0.10	0.44	-0.23
5	14	0.00	0.07	0.17	0.29	-0.20	-0.07	-0.11	-0.10	-0.03
6	14	-0.05	0.47	0.19	-0.21	0.03	0.32	-0.22	0.00	-0.15
7	14	0.05	0.02	-0.34	-0.21	0.20	0.01	0.20	0.20	0.04
8	14	0.06	-0.28	-0.18	0.06	-0.12	0.08	-0.30	-0.36	-0.05
9	14	-0.20	-0.09	0.34	-0.04	0.12	0.19	0.39	-0.10	0.28
10	14	-0.11	0.09	0.06	-0.01	-0.11	-0.35	0.00	0.13	-0.05
11	17	0.08	0.05	0.11	-0.14	-0.10	-0.17	0.00	0.00	0.01
12	17	-0.15	0.11	0.00	0.12	-0.11	0.03	0.00	0.01	0.00
13	14	-0.02	-0.09	0.01	-0.01	-0.02	0.05	0.00	0.01	0.00

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies	--	290.0030			290.4405			332.7448		
Red. masses	--	28.0093			28.0081			27.9826		
Frc consts	--	1.3879			1.3920			1.8254		
IR Inten	--	0.3087			0.2218			0.0264		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.01	-0.02	0.03	0.03	0.02	-0.03	0.02	-0.01	0.01
2	14	0.33	0.04	0.06	0.01	0.22	-0.09	0.17	-0.19	-0.15
3	14	-0.08	-0.25	0.07	0.09	0.31	-0.09	-0.37	-0.04	-0.28
4	14	0.20	0.28	0.44	0.03	0.07	0.06	-0.01	-0.13	0.14
5	14	-0.10	0.08	-0.09	-0.25	0.26	-0.20	-0.01	-0.04	0.21
6	14	-0.12	0.22	-0.10	-0.13	-0.24	-0.07	0.22	-0.12	-0.12
7	14	-0.07	-0.19	0.09	0.18	-0.11	0.24	-0.23	0.17	0.41
8	14	0.08	-0.19	-0.02	0.43	-0.30	-0.05	0.07	-0.04	-0.20
9	14	0.16	0.20	-0.26	-0.28	-0.22	0.25	0.11	0.00	0.16
10	14	-0.35	-0.15	-0.18	-0.06	-0.03	-0.03	0.04	0.40	-0.20
11	17	-0.01	-0.02	-0.04	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.01
12	17	0.00	0.02	0.01	-0.04	0.03	0.01	0.00	0.00	0.01
13	14	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00
		22			23			24		
		A			A			A		
Frequencies	--	334.7456			345.7672			348.5519		
Red. masses	--	27.9854			28.3773			27.9819		
Frc consts	--	1.8476			1.9989			2.0029		
IR Inten	--	0.4532			227.5538			0.6672		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.01	-0.01	-0.01	-0.07	-0.07	0.09	0.01	0.01	-0.01
2	14	-0.18	0.08	0.39	-0.30	-0.16	-0.20	-0.06	0.37	-0.19
3	14	0.24	-0.20	0.06	0.11	0.17	-0.16	0.27	-0.04	0.20
4	14	0.12	-0.14	-0.10	-0.22	-0.01	0.11	-0.03	0.15	-0.06
5	14	0.31	0.38	0.06	0.19	-0.17	0.03	-0.23	-0.28	-0.04
6	14	0.16	-0.14	-0.40	0.17	0.34	-0.15	0.37	-0.07	0.25
7	14	-0.12	-0.12	-0.02	0.24	-0.25	0.18	-0.30	-0.32	-0.04
8	14	-0.14	-0.15	-0.03	0.00	-0.05	0.23	-0.07	-0.10	-0.01
9	14	-0.14	0.08	0.09	-0.04	0.21	0.13	0.11	-0.02	0.06
10	14	-0.22	0.24	-0.04	-0.14	-0.08	-0.19	-0.05	0.31	-0.16
11	17	-0.01	-0.01	0.01	0.05	0.07	0.12	0.00	0.01	-0.01
12	17	-0.02	-0.02	0.00	-0.10	0.08	0.02	-0.01	0.00	0.00
13	14	0.03	0.03	0.00	0.13	-0.10	-0.28	0.00	-0.03	0.02
		25			26			27		
		A			A			A		
Frequencies	--	351.5256			352.3593			364.8786		
Red. masses	--	29.8061			29.8146			28.1679		
Frc consts	--	2.1700			2.1810			2.2095		
IR Inten	--	211.3823			211.9493			194.5516		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.14	0.15	-0.13	-0.14	-0.22	0.21	-0.05	-0.06	0.07
2	14	-0.12	0.00	0.08	-0.02	0.02	-0.01	-0.09	0.05	0.07
3	14	0.01	0.03	-0.01	-0.01	-0.05	0.03	0.08	-0.10	-0.15
4	14	-0.01	0.07	0.15	0.00	-0.01	0.02	0.39	0.17	0.26
5	14	0.02	0.00	0.01	0.03	-0.05	0.02	0.04	-0.01	-0.16
6	14	0.00	-0.08	-0.06	-0.01	0.09	0.07	-0.05	0.06	0.10
7	14	-0.02	0.01	-0.06	-0.02	0.01	-0.13	-0.02	0.02	0.11
8	14	0.06	0.00	-0.05	0.10	-0.09	-0.09	-0.36	0.29	-0.20
9	14	0.07	-0.01	-0.07	-0.06	-0.01	0.13	-0.18	-0.43	0.15
10	14	0.05	0.03	0.03	0.00	0.02	0.00	0.12	-0.02	-0.10
11	17	0.21	0.19	0.31	0.02	-0.01	0.04	0.04	0.04	0.07
12	17	0.15	-0.09	0.01	0.28	-0.27	0.02	-0.07	0.06	0.00
13	14	-0.67	-0.36	-0.26	-0.22	0.69	-0.36	0.16	-0.08	-0.26

28				29				30			
A				A				A			
Frequencies	--	366.5934			366.9681			378.1034			
Red. masses	--	27.9941			28.0058			28.7599			
Frc consts	--	2.2166			2.2221			2.4225			
IR Inten	--	2.7332			6.0819			1001.4382			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	17	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.10	-0.10	0.14	
2	14	0.05	0.02	0.09	0.05	-0.29	0.15	0.24	0.14	0.16	
3	14	-0.09	-0.04	0.23	-0.24	-0.04	0.27	0.00	0.17	0.05	
4	14	-0.07	-0.07	-0.22	-0.07	0.47	-0.19	-0.06	-0.08	-0.12	
5	14	-0.08	0.14	0.10	0.31	-0.18	-0.21	0.03	-0.06	0.16	
6	14	-0.19	0.09	-0.17	0.18	0.03	0.04	-0.13	-0.27	0.12	
7	14	-0.16	-0.25	-0.02	-0.15	-0.02	-0.01	-0.20	0.20	-0.12	
8	14	0.21	0.44	0.06	0.32	0.03	-0.03	0.11	-0.10	-0.01	
9	14	0.27	-0.15	0.34	-0.38	-0.08	0.00	0.09	0.09	-0.10	
10	14	0.03	-0.19	-0.42	-0.01	0.07	0.01	-0.17	-0.03	0.03	
11	17	0.01	0.02	0.04	0.00	0.00	0.01	0.07	0.09	0.15	
12	17	0.01	-0.01	0.00	-0.04	0.04	0.01	-0.15	0.13	0.02	
13	14	-0.01	-0.02	-0.02	0.03	-0.04	-0.01	0.31	-0.19	-0.54	

31				32				33			
A				A				A			
Frequencies	--	404.3920			455.2258			456.2502			
Red. masses	--	27.9956			27.9785			27.9790			
Frc consts	--	2.6974			3.4161			3.4315			
IR Inten	--	89.4600			3.4346			3.2515			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	17	0.02	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	
2	14	0.28	-0.04	-0.18	-0.16	-0.01	0.07	-0.10	0.48	-0.23	
3	14	0.06	0.38	-0.01	-0.10	-0.25	-0.05	-0.03	-0.46	0.01	
4	14	0.08	0.11	0.19	-0.01	-0.03	-0.06	-0.04	0.20	-0.10	
5	14	0.18	-0.19	0.27	-0.17	0.08	-0.21	0.17	-0.25	0.34	
6	14	0.10	-0.25	-0.21	0.41	-0.13	0.21	-0.19	-0.10	-0.22	
7	14	0.04	0.01	-0.33	0.30	0.36	-0.04	0.18	0.18	0.17	
8	14	-0.18	0.16	0.03	0.11	0.17	0.03	0.12	0.06	-0.01	
9	14	-0.12	-0.12	0.17	0.15	-0.04	0.13	-0.13	0.00	-0.01	
10	14	-0.36	-0.11	-0.07	-0.50	-0.14	-0.07	0.01	-0.07	0.04	
11	17	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	
12	17	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.01	
13	14	-0.11	0.07	0.19	-0.03	-0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.02	

M2

Harmonic frequencies (cm⁻¹), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A⁴/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

1				2				3			
A				A				A			
Frequencies	--	23.0413			47.4039			54.7831			
Red. masses	--	3.4601			6.7004			6.3410			
Frc consts	--	0.0011			0.0089			0.0112			
IR Inten	--	0.0497			1.9937			0.8938			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	-0.10	0.16	0.08	0.07	-0.10	-0.19	0.10	-0.16	0.20	
2	6	-0.05	-0.24	0.06	0.26	-0.01	0.08	-0.05	-0.10	0.01	
3	14	-0.01	0.03	0.01	-0.12	0.05	0.08	0.08	0.13	-0.04	
4	14	0.03	0.00	-0.04	-0.12	0.03	0.04	-0.08	0.07	-0.11	
5	14	0.02	0.04	-0.04	-0.07	-0.02	-0.14	-0.05	-0.03	-0.05	
6	14	-0.03	0.07	0.01	-0.11	0.05	-0.05	0.09	0.09	0.07	
7	14	-0.04	0.01	0.04	-0.04	0.03	0.09	0.07	0.07	0.06	
8	14	0.00	-0.03	0.01	-0.02	0.06	0.14	-0.01	0.11	-0.09	
9	14	0.03	-0.03	-0.02	0.07	-0.02	-0.01	-0.07	-0.06	-0.06	
10	14	-0.01	0.01	0.02	0.06	-0.05	-0.05	0.02	-0.09	0.09	
11	14	-0.01	-0.05	0.03	0.12	-0.01	0.08	0.01	-0.04	0.03	
12	6	0.19	0.02	-0.16	0.00	-0.06	-0.12	-0.17	-0.13	-0.07	
13	14	0.01	-0.01	0.00	0.04	-0.03	-0.04	0.00	-0.05	0.02	
14	1	-0.04	-0.26	0.05	0.36	-0.07	0.01	-0.11	-0.23	0.05	
15	1	0.01	-0.34	0.00	0.23	0.05	0.17	-0.11	-0.05	-0.10	
16	1	-0.15	-0.25	0.15	0.31	0.02	0.15	0.04	-0.06	0.08	
17	1	-0.20	0.16	0.20	0.10	-0.09	-0.19	0.20	-0.11	0.34	
18	1	-0.09	0.30	0.03	-0.02	-0.14	-0.25	0.09	-0.11	0.17	
19	1	0.19	0.13	-0.21	-0.12	-0.09	-0.20	-0.19	-0.13	-0.08	
20	1	0.26	-0.07	-0.16	-0.01	-0.03	-0.02	-0.23	-0.06	-0.13	
21	1	0.23	0.01	-0.18	0.12	-0.10	-0.20	-0.19	-0.23	-0.06	
22	1	-0.08	0.12	0.07	0.16	-0.11	-0.25	0.07	-0.34	0.22	

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	85.4693			139.1950			149.8491		
Red. masses	--	12.3281			2.4114			2.9468		
Frc consts	--	0.0531			0.0275			0.0390		
IR Inten	--	7.6599			1.1713			0.5546		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.08	0.03	0.11	-0.04	-0.03	-0.14	0.12	-0.01	0.14
2	6	-0.03	0.04	-0.04	-0.15	-0.04	-0.16	-0.09	0.09	-0.18
3	14	0.22	-0.20	-0.01	0.00	0.01	-0.02	-0.02	-0.02	0.00
4	14	-0.18	-0.10	0.17	0.00	0.03	0.02	-0.01	-0.02	0.04
5	14	-0.13	0.02	-0.20	0.01	0.01	0.02	0.00	-0.01	0.02
6	14	0.00	0.22	-0.01	0.01	0.03	0.04	-0.04	-0.02	0.01
7	14	-0.19	-0.08	-0.05	0.01	0.01	0.04	-0.05	-0.03	0.01
8	14	-0.04	0.12	-0.11	0.01	0.04	0.01	0.00	-0.02	0.06
9	14	0.09	0.04	-0.01	0.02	-0.01	0.02	0.02	0.01	0.03
10	14	-0.01	-0.06	0.00	0.02	-0.01	0.04	0.02	0.00	0.00
11	14	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.00	0.05	0.03	0.01	0.02
12	6	0.18	0.02	0.23	0.03	-0.02	0.01	0.00	0.02	-0.17
13	14	0.12	-0.03	0.09	-0.01	-0.05	-0.07	0.05	0.05	-0.07
14	1	-0.10	0.17	0.01	-0.26	0.02	-0.08	-0.24	0.08	-0.07
15	1	0.00	-0.01	-0.06	-0.14	-0.08	-0.25	-0.16	0.16	-0.31
16	1	-0.10	0.00	-0.16	-0.19	-0.07	-0.24	-0.01	0.11	-0.26
17	1	0.06	0.00	0.02	-0.06	-0.13	-0.58	0.21	0.08	0.44
18	1	0.16	0.00	0.18	0.12	-0.30	0.10	0.09	0.16	0.05
19	1	0.28	0.01	0.31	0.05	-0.04	0.03	0.00	0.09	-0.21
20	1	0.20	-0.01	0.19	0.06	-0.04	0.05	-0.01	0.02	-0.25
21	1	0.10	0.11	0.28	0.04	0.04	0.01	-0.01	-0.09	-0.17
22	1	0.02	0.11	0.15	-0.19	0.34	-0.04	0.11	-0.32	0.14
		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies	--	155.4112			158.7803			175.3627		
Red. masses	--	1.2110			3.3873			2.7542		
Frc consts	--	0.0172			0.0503			0.0499		
IR Inten	--	0.2642			3.5600			0.0388		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	-0.01	-0.08	-0.12	0.11	-0.09	-0.02	0.01	-0.02
2	6	-0.03	0.00	-0.03	0.03	0.03	0.05	-0.01	0.00	-0.01
3	14	0.01	0.00	-0.01	0.07	-0.06	-0.04	0.01	0.00	-0.01
4	14	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.03	0.06	-0.05	0.02	0.06
5	14	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01
6	14	0.01	0.01	0.01	0.05	0.04	0.05	0.02	-0.07	-0.04
7	14	0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.06	-0.01	0.06	0.01	0.05
8	14	0.01	0.02	-0.01	0.04	0.02	-0.03	-0.03	0.05	-0.07
9	14	0.01	0.00	0.01	0.03	0.02	0.03	0.09	-0.02	0.01
10	14	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.03	0.05	-0.05	0.09	-0.04
11	14	0.01	0.00	0.02	0.02	0.01	0.01	-0.05	-0.10	0.05
12	6	-0.01	-0.01	0.03	-0.19	-0.03	-0.19	0.02	0.00	0.03
13	14	-0.02	-0.02	-0.01	-0.06	0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00
14	1	0.03	0.25	-0.06	0.04	-0.15	0.04	-0.19	-0.48	0.09
15	1	0.11	-0.17	0.10	-0.06	0.16	0.01	-0.30	0.32	-0.32
16	1	-0.26	-0.09	-0.15	0.20	0.10	0.16	0.44	0.17	0.17
17	1	-0.08	0.07	0.38	-0.23	0.08	-0.11	-0.05	0.03	0.15
18	1	-0.30	0.26	-0.41	-0.14	0.15	-0.12	-0.11	0.12	-0.14
19	1	0.08	0.00	0.09	-0.41	-0.06	-0.33	-0.01	-0.02	0.02
20	1	0.00	-0.03	-0.04	-0.29	0.10	-0.11	0.04	0.00	0.09
21	1	-0.09	0.01	0.09	-0.04	-0.23	-0.29	0.06	0.05	0.00
22	1	0.25	-0.35	-0.27	-0.06	0.20	-0.13	0.09	-0.11	-0.09

			10			11			12		
			A			A			A		
Frequencies	--		177.2333			179.8304			197.0482		
Red. masses	--		1.7022			19.4630			1.0390		
Frc consts	--		0.0315			0.3708			0.0238		
IR Inten	--		0.0788			1.3705			0.2511		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6		0.02	0.00	0.04	-0.01	-0.02	-0.07	-0.01	0.01	-0.01
2	6		0.02	0.01	0.01	-0.09	0.02	-0.06	0.03	0.00	0.01
3	14		0.01	0.00	0.00	-0.09	0.09	0.10	0.00	0.00	0.00
4	14		-0.03	0.01	0.04	-0.04	0.01	0.12	0.00	0.00	0.01
5	14		0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.07	-0.26	0.00	0.00	0.00
6	14		0.01	-0.04	-0.02	0.03	0.06	0.06	0.00	0.00	0.01
7	14		0.03	0.00	0.03	0.29	0.14	-0.08	0.00	0.00	0.00
8	14		-0.02	0.01	-0.04	-0.05	-0.30	0.06	0.00	0.00	0.00
9	14		0.06	0.00	0.00	0.28	0.19	0.05	0.01	0.00	0.00
10	14		-0.03	0.04	-0.02	-0.04	-0.22	0.22	0.00	0.00	0.01
11	14		-0.04	-0.06	0.02	-0.30	0.10	-0.19	0.00	0.00	0.00
12	6		-0.04	-0.01	-0.07	0.02	0.00	-0.03	-0.02	0.00	-0.02
13	14		0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01
14	1		0.19	0.48	-0.09	-0.23	-0.07	0.04	0.03	-0.08	0.00
15	1		0.30	-0.30	0.32	-0.18	0.10	-0.21	-0.01	0.05	-0.01
16	1		-0.42	-0.15	-0.17	0.03	0.06	-0.07	0.09	0.03	0.06
17	1		0.05	-0.03	-0.14	-0.01	0.01	0.05	-0.02	-0.01	-0.07
18	1		0.14	-0.11	0.19	-0.14	0.03	-0.20	0.02	-0.02	0.03
19	1		-0.06	0.02	-0.10	-0.06	0.01	-0.09	0.44	0.21	0.22
20	1		-0.07	0.01	-0.11	0.03	0.00	0.04	-0.02	-0.12	-0.57
21	1		-0.04	-0.09	-0.08	0.10	0.00	-0.09	-0.48	-0.10	0.29
22	1		-0.11	0.13	0.13	0.13	-0.11	-0.16	-0.04	0.07	0.01
			13			14			15		
			A			A			A		
Frequencies	--		211.0070			213.4611			236.3778		
Red. masses	--		2.6561			2.6275			6.1035		
Frc consts	--		0.0697			0.0705			0.2009		
IR Inten	--		1.1758			5.9000			32.5379		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6		-0.12	-0.05	0.06	-0.08	0.17	0.09	-0.02	0.08	-0.10
2	6		0.03	0.20	-0.01	0.11	0.01	-0.10	-0.10	0.06	-0.04
3	14		-0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.12	0.06	0.10
4	14		0.03	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.11	-0.04	-0.06
5	14		0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.08	0.01	0.01
6	14		-0.01	0.03	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.13	0.00	-0.05
7	14		0.03	0.02	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.01	0.07	-0.01
8	14		0.00	0.03	-0.02	-0.02	0.00	0.01	0.02	-0.14	0.11
9	14		-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.05	-0.04	-0.03
10	14		0.00	-0.02	0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.05	0.11	-0.09
11	14		0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00
12	6		0.14	-0.06	-0.09	-0.08	-0.11	0.10	-0.02	-0.13	-0.07
13	14		-0.07	-0.10	0.05	0.08	-0.09	-0.08	0.10	-0.04	0.14
14	1		0.08	0.33	-0.04	0.14	0.07	-0.12	-0.30	0.19	0.11
15	1		-0.06	0.40	0.20	0.09	0.06	-0.01	-0.14	0.08	-0.16
16	1		0.21	0.22	-0.26	0.15	0.01	-0.18	-0.08	0.04	-0.25
17	1		-0.17	-0.07	0.06	-0.36	0.11	0.17	-0.23	0.01	-0.16
18	1		-0.07	0.00	0.08	0.12	0.43	0.13	-0.13	0.09	-0.19
19	1		0.17	0.17	-0.18	-0.12	-0.33	0.18	-0.04	-0.02	-0.13
20	1		0.29	-0.26	-0.12	-0.20	0.06	0.16	-0.10	-0.06	-0.24
21	1		0.22	-0.06	-0.14	-0.13	-0.08	0.13	-0.06	-0.38	-0.05
22	1		-0.15	-0.02	0.08	-0.19	0.26	0.16	0.16	0.27	-0.21

		16			17			18		
		A			A			A		
Frequencies	--	237.7133			255.0862			266.3876		
Red. masses	--	12.2231			22.3867			13.8055		
Frc consts	--	0.4069			0.8582			0.5772		
IR Inten	--	10.0158			6.0232			11.8355		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.08	0.07	-0.07	0.01	0.00	-0.06	0.05	0.05	-0.06
2	6	-0.09	-0.03	-0.02	-0.07	0.03	0.05	-0.09	0.04	0.01
3	14	-0.05	-0.17	0.15	-0.04	0.10	0.09	0.02	0.01	0.10
4	14	0.18	-0.19	0.06	-0.11	0.12	0.09	0.14	0.04	-0.08
5	14	0.01	0.11	-0.01	0.22	-0.12	0.34	0.25	-0.20	-0.03
6	14	-0.18	0.14	-0.13	-0.10	0.19	0.07	-0.02	-0.15	0.00
7	14	0.29	0.07	0.06	-0.17	0.17	-0.15	-0.20	0.01	0.07
8	14	-0.12	0.11	-0.08	-0.28	-0.02	-0.11	-0.08	0.22	0.01
9	14	-0.19	-0.02	-0.02	0.16	-0.17	0.07	0.09	0.14	-0.18
10	14	0.06	-0.04	-0.02	0.24	-0.09	-0.09	-0.15	-0.20	-0.05
11	14	-0.01	-0.06	0.01	0.09	-0.21	-0.36	-0.12	0.12	0.09
12	6	-0.09	-0.04	-0.07	0.00	-0.01	-0.04	-0.01	-0.09	-0.04
13	14	0.11	0.05	0.08	0.02	0.02	0.10	0.11	0.00	0.15
14	1	-0.28	-0.02	0.11	-0.14	0.05	0.10	-0.29	0.14	0.16
15	1	-0.09	-0.11	-0.24	-0.07	0.01	-0.01	-0.11	0.01	-0.15
16	1	-0.16	-0.05	-0.05	-0.08	0.02	0.01	-0.12	0.01	-0.15
17	1	0.02	0.05	-0.11	0.00	-0.01	-0.08	-0.07	0.01	-0.13
18	1	-0.01	0.04	-0.12	-0.12	-0.06	-0.13	-0.06	0.02	-0.13
19	1	-0.10	-0.02	-0.08	-0.06	0.08	-0.13	-0.08	-0.01	-0.14
20	1	-0.23	0.09	-0.25	-0.01	-0.01	-0.09	-0.09	-0.01	-0.15
21	1	-0.18	-0.30	-0.02	0.05	-0.15	-0.08	0.01	-0.33	-0.06
22	1	0.18	0.15	-0.13	0.15	0.04	-0.15	0.20	0.19	-0.16
		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies	--	267.6229			273.9368			282.2865		
Red. masses	--	27.2927			23.7626			26.4751		
Frc consts	--	1.1517			1.0506			1.2430		
IR Inten	--	1.5854			1.8254			0.3278		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.01	0.01	0.02	0.03	-0.04	-0.05	-0.02	-0.02
2	6	0.02	-0.02	-0.01	-0.05	0.02	-0.01	0.00	0.02	0.01
3	14	0.09	0.09	-0.08	-0.12	0.15	0.15	0.01	0.00	-0.01
4	14	0.30	0.13	-0.04	0.42	0.05	0.07	-0.03	-0.04	-0.07
5	14	-0.31	-0.41	0.14	-0.28	0.03	-0.35	-0.10	-0.13	0.04
6	14	0.00	0.32	-0.19	0.18	-0.27	0.17	0.01	-0.04	0.08
7	14	0.03	-0.01	0.08	-0.21	0.02	-0.10	-0.05	-0.14	0.38
8	14	0.08	-0.04	-0.01	-0.18	0.11	-0.13	-0.21	-0.24	-0.21
9	14	0.04	0.12	0.41	-0.05	-0.08	0.23	-0.07	0.51	-0.19
10	14	-0.14	-0.14	-0.40	0.11	0.12	0.06	0.50	0.14	-0.07
11	14	-0.11	-0.07	0.12	0.10	-0.13	-0.12	-0.03	-0.02	0.04
12	6	-0.01	0.02	0.00	0.00	-0.05	-0.01	0.03	-0.03	0.01
13	14	0.00	0.02	-0.03	0.06	-0.01	0.06	-0.02	-0.04	0.01
14	1	0.04	-0.05	-0.03	-0.17	0.07	0.08	0.02	0.04	0.00
15	1	0.03	-0.04	-0.02	-0.07	0.01	-0.10	-0.02	0.06	0.06
16	1	0.01	-0.02	0.03	-0.06	0.00	-0.10	0.04	0.03	-0.04
17	1	0.04	0.01	0.02	-0.06	0.00	-0.08	-0.10	-0.03	-0.02
18	1	0.05	0.01	0.04	-0.02	0.03	-0.07	-0.07	0.00	-0.04
19	1	0.01	-0.01	0.03	-0.02	-0.02	-0.04	0.05	0.01	0.00
20	1	-0.02	0.04	0.00	-0.04	-0.01	-0.07	0.08	-0.08	0.01
21	1	-0.04	0.05	0.02	-0.01	-0.15	-0.01	0.04	0.01	0.00
22	1	-0.02	-0.01	0.04	0.09	0.13	-0.08	-0.01	0.02	-0.04

		22			23			24		
		A			A			A		
Frequencies	--	293.7512			305.5998			323.1911		
Red. masses	--	27.6147			27.8983			15.1929		
Frc consts	--	1.4039			1.5351			0.9350		
IR Inten	--	5.7329			0.8976			17.4129		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00	-0.06	-0.06	0.04
2	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.03	-0.06
3	14	0.15	0.19	-0.09	0.02	0.05	-0.01	-0.04	0.06	0.06
4	14	-0.04	0.23	0.33	-0.01	-0.32	0.09	0.05	-0.20	0.24
5	14	0.22	0.31	-0.10	-0.10	-0.13	0.03	0.14	-0.11	-0.04
6	14	0.06	-0.15	-0.40	-0.29	-0.16	0.10	0.26	0.12	0.10
7	14	-0.15	0.00	0.24	-0.18	0.55	0.17	0.00	0.18	-0.06
8	14	0.01	-0.23	-0.14	0.48	-0.06	-0.35	-0.17	-0.09	0.00
9	14	-0.29	-0.03	0.18	0.04	-0.04	0.01	-0.13	0.10	-0.16
10	14	0.04	-0.36	-0.04	-0.02	0.03	0.01	-0.21	-0.01	-0.13
11	14	0.00	0.04	0.00	0.04	0.09	-0.06	0.20	-0.06	0.12
12	6	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.10	0.01
13	14	0.01	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.01	-0.11	0.00	-0.16
14	1	-0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.24	-0.12	-0.19
15	1	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.08	-0.01	0.08
16	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.01	0.08
17	1	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.06	-0.01	0.12
18	1	-0.04	0.02	-0.05	-0.01	0.01	-0.02	0.06	-0.02	0.12
19	1	0.03	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.07	0.02	0.11
20	1	0.02	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.07	0.02	0.13
21	1	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.03	0.36	0.03
22	1	0.05	0.01	-0.05	0.02	0.00	-0.02	-0.23	-0.21	0.15
		25			26			27		
		A			A			A		
Frequencies	--	340.9400			345.3573			360.1133		
Red. masses	--	27.6796			21.4688			20.0837		
Frc consts	--	1.8957			1.5087			1.5345		
IR Inten	--	0.1672			5.9873			1.0129		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	0.00	0.05	0.05	-0.02	-0.06	-0.05	0.01
2	6	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.02	0.05	0.04	-0.02	-0.03
3	14	-0.01	0.03	0.02	0.05	-0.08	-0.12	0.17	-0.12	-0.03
4	14	0.00	0.03	0.13	0.01	0.25	-0.06	0.07	-0.21	-0.23
5	14	0.02	-0.01	0.00	-0.12	0.09	0.07	-0.18	0.19	0.18
6	14	0.06	-0.02	-0.10	-0.25	-0.10	0.06	0.15	-0.13	-0.26
7	14	-0.13	0.17	-0.36	0.07	0.07	-0.24	-0.12	0.30	0.04
8	14	0.31	0.14	0.25	-0.04	-0.17	-0.11	-0.27	0.05	0.16
9	14	-0.20	0.20	-0.13	0.03	0.31	-0.04	0.22	0.05	0.07
10	14	0.32	-0.05	0.03	-0.23	-0.12	0.14	0.06	-0.17	0.14
11	14	-0.36	-0.49	0.17	0.39	-0.24	0.18	0.01	0.00	0.05
12	6	0.00	0.01	0.01	0.02	-0.08	0.01	-0.02	0.09	-0.02
13	14	-0.01	0.00	-0.02	0.09	-0.01	0.12	-0.09	0.02	-0.11
14	1	0.01	-0.01	-0.01	-0.16	0.08	0.14	0.22	-0.12	-0.16
15	1	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.01	-0.04	0.07	-0.02	0.10
16	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.01	-0.04	0.06	0.00	0.11
17	1	0.01	0.00	0.02	-0.04	0.01	-0.07	0.06	-0.01	0.06
18	1	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.03	-0.08	0.01	-0.06	0.07
19	1	0.01	-0.01	0.03	-0.06	-0.03	-0.07	0.02	0.07	0.03
20	1	0.02	0.00	0.05	-0.05	-0.01	-0.06	0.04	0.03	0.05
21	1	0.01	0.07	0.01	0.05	-0.26	-0.02	-0.03	0.25	-0.01
22	1	-0.01	-0.03	0.00	0.18	0.16	-0.10	-0.18	-0.18	0.09

			28			29			30		
			A			A			A		
Frequencies	--		377.6729			391.8752			397.3549		
Red. masses	--		24.9837			27.6420			27.4120		
Frc consts	--		2.0996			2.5010			2.5500		
IR Inten	--		0.0069			0.1837			4.2406		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6		-0.03	-0.03	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.02	0.00
2	6		0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01
3	14		0.35	-0.34	-0.22	-0.11	-0.16	0.06	0.09	-0.04	-0.02
4	14		0.05	0.27	0.02	-0.21	-0.10	-0.29	0.18	0.14	0.22
5	14		0.15	-0.20	-0.27	0.18	0.35	-0.09	-0.32	0.21	0.16
6	14		-0.18	-0.09	0.17	0.10	-0.07	0.41	0.01	-0.06	0.20
7	14		0.05	0.31	0.10	0.04	0.06	0.04	0.05	-0.05	0.29
8	14		-0.19	-0.06	0.27	0.07	0.05	-0.03	0.14	0.10	0.23
9	14		-0.16	-0.12	0.07	-0.02	0.19	0.37	0.05	0.03	-0.40
10	14		0.06	0.18	-0.06	-0.02	-0.23	-0.45	-0.16	-0.19	-0.19
11	14		-0.07	0.01	-0.05	-0.05	-0.11	-0.02	0.00	-0.14	-0.44
12	6		-0.02	0.05	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.03	-0.01
13	14		-0.05	0.02	-0.03	0.01	0.01	0.00	-0.03	0.01	-0.03
14	1		0.16	-0.10	-0.09	-0.02	-0.01	0.01	0.06	-0.03	-0.05
15	1		0.04	-0.01	0.10	0.00	-0.02	-0.04	0.02	0.00	0.03
16	1		0.04	0.01	0.14	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	0.04
17	1		0.03	-0.01	0.01	0.05	0.02	0.01	0.01	-0.01	0.01
18	1		-0.04	-0.06	0.01	0.04	0.00	0.03	-0.02	-0.02	0.01
19	1		-0.02	0.08	-0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.03	0.00
20	1		0.00	0.03	-0.02	-0.03	0.03	-0.03	0.01	0.01	-0.01
21	1		-0.01	0.06	-0.03	-0.02	-0.03	0.00	-0.02	0.06	-0.01
22	1		-0.05	-0.08	0.01	-0.02	-0.02	0.03	-0.04	-0.05	0.01
			31			32			33		
			A			A			A		
Frequencies	--		426.8781			452.7554			489.6566		
Red. masses	--		27.3044			24.0207			11.8332		
Frc consts	--		2.9315			2.9011			1.6716		
IR Inten	--		0.2190			0.0125			1.7355		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6		-0.02	-0.02	0.00	-0.04	-0.02	0.00	-0.15	-0.10	0.00
2	6		0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.06	-0.05	-0.14
3	14		0.01	0.02	0.08	0.35	0.51	-0.22	0.26	0.01	0.46
4	14		-0.10	-0.12	-0.15	0.02	-0.37	0.06	-0.01	0.11	-0.06
5	14		0.20	-0.18	-0.11	0.04	0.07	-0.03	-0.01	0.00	-0.01
6	14		0.02	0.04	-0.22	-0.34	-0.10	0.14	-0.13	-0.05	0.00
7	14		-0.04	-0.07	0.23	0.10	-0.17	-0.11	0.01	-0.08	-0.07
8	14		0.11	0.16	0.14	-0.15	0.09	0.16	0.05	-0.02	-0.10
9	14		-0.14	0.31	0.24	0.01	0.05	0.07	0.00	0.00	-0.02
10	14		-0.23	0.16	0.30	0.01	-0.01	-0.09	-0.01	-0.01	-0.02
11	14		0.19	-0.30	-0.45	-0.02	-0.03	0.01	0.00	0.01	0.02
12	6		-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.07	0.17	-0.05
13	14		-0.02	0.00	-0.04	-0.02	-0.03	0.01	-0.09	0.01	-0.13
14	1		0.02	-0.01	-0.04	0.05	0.04	-0.03	0.23	-0.13	-0.26
15	1		0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.05	0.10	0.09	-0.04	-0.03
16	1		0.01	-0.01	-0.04	0.03	0.01	-0.03	0.08	-0.03	-0.02
17	1		0.00	-0.01	0.02	-0.14	-0.06	-0.07	-0.04	-0.06	0.07
18	1		0.02	0.00	0.02	-0.12	-0.03	-0.07	-0.05	-0.08	0.07
19	1		0.03	-0.01	0.03	0.06	-0.02	0.04	0.01	0.13	0.03
20	1		0.01	0.00	0.01	0.10	-0.11	0.10	0.00	0.11	0.04
21	1		-0.03	0.09	0.01	0.04	0.13	0.00	-0.09	0.39	-0.03
22	1		-0.07	-0.04	0.03	0.08	0.10	-0.08	-0.31	-0.25	0.10

			34			35			36		
			A			A			A		
Frequencies	--		626.7486			673.6069			684.6560		
Red. masses	--		3.8608			1.1636			2.3298		
Frc consts	--		0.8935			0.3111			0.6435		
IR Inten	--		109.8956			0.0309			22.2092		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6		-0.19	-0.15	0.06	-0.03	0.06	0.02	-0.08	-0.10	-0.03
2	6		0.15	-0.09	-0.18	-0.02	-0.07	0.01	-0.06	0.06	0.21
3	14		-0.04	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
4	14		0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	14		0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6		-0.06	0.23	-0.02	0.05	0.01	-0.03	0.01	0.09	-0.07
13	14		0.09	0.00	0.14	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.04	-0.07
14	1		0.02	-0.03	-0.09	0.06	0.14	-0.04	-0.38	0.22	0.44
15	1		0.15	-0.11	-0.33	-0.16	0.23	0.27	-0.12	0.07	-0.01
16	1		0.14	-0.11	-0.32	0.25	-0.02	-0.32	-0.13	0.02	0.00
17	1		-0.32	-0.20	-0.01	0.36	0.13	-0.10	-0.22	-0.11	0.11
18	1		-0.29	-0.18	-0.01	-0.24	-0.31	0.01	0.13	0.11	0.05
19	1		-0.12	0.30	-0.10	0.01	-0.35	0.12	0.05	-0.21	0.11
20	1		-0.12	0.30	-0.10	-0.20	0.33	0.00	-0.14	0.29	0.03
21	1		-0.05	0.09	-0.04	-0.13	-0.03	0.08	-0.15	0.24	0.04
22	1		-0.09	-0.04	-0.01	0.09	-0.11	-0.06	-0.31	-0.15	0.11
			37			38			39		
			A			A			A		
Frequencies	--		687.0606			741.9769			746.4670		
Red. masses	--		2.1707			1.5149			1.5494		
Frc consts	--		0.6037			0.4914			0.5087		
IR Inten	--		18.8616			27.9490			26.5729		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6		0.17	0.05	0.02	0.03	0.06	-0.10	0.02	0.04	-0.06
2	6		-0.02	-0.05	0.02	0.11	-0.04	0.00	-0.06	0.02	0.00
3	14		0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
4	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6		-0.10	0.15	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.02	0.12	0.07
13	14		-0.03	-0.11	0.02	-0.07	-0.02	0.05	0.01	-0.09	0.00
14	1		0.01	0.11	0.01	-0.30	0.14	0.29	0.16	-0.12	-0.16
15	1		-0.13	0.16	0.20	0.05	-0.07	-0.38	-0.02	0.02	0.20
16	1		0.15	-0.02	-0.23	0.02	-0.11	-0.35	-0.02	0.06	0.22
17	1		-0.15	-0.04	-0.07	0.31	0.18	0.13	0.19	0.11	0.07
18	1		0.10	0.20	-0.10	0.34	0.14	0.12	0.19	0.07	0.06
19	1		0.05	0.21	0.02	0.01	-0.01	0.01	-0.24	0.32	-0.22
20	1		0.08	-0.05	0.10	0.00	0.00	0.01	-0.18	0.31	-0.26
21	1		-0.08	0.55	-0.07	-0.03	0.02	0.01	0.09	-0.48	0.00
22	1		0.36	0.36	-0.11	-0.32	-0.25	0.14	-0.16	-0.16	0.07

			40			41			42		
			A			A			A		
Frequencies	--		836.5716			838.1165			839.7574		
Red. masses	--		1.4972			1.5306			1.5055		
Frc consts	--		0.6173			0.6335			0.6255		
IR Inten	--		374.4102			622.2490			133.9198		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6		0.04	-0.07	-0.08	-0.07	0.06	-0.06	0.00	0.05	0.03
2	6		-0.06	-0.03	-0.06	-0.06	0.00	-0.02	0.02	0.12	-0.04
3	14		0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
4	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6		0.05	-0.02	-0.06	-0.10	-0.03	-0.03	0.04	0.02	-0.09
13	14		-0.02	0.04	0.07	0.08	-0.01	0.03	-0.02	-0.07	0.04
14	1		0.27	-0.09	-0.29	0.16	-0.07	-0.17	0.01	-0.23	-0.05
15	1		-0.05	0.07	0.26	-0.03	0.03	0.20	0.23	-0.28	-0.29
16	1		0.11	0.04	0.05	0.03	0.05	0.14	-0.30	0.07	0.45
17	1		-0.28	-0.09	0.17	0.37	0.19	0.05	0.18	0.07	-0.06
18	1		0.39	0.35	0.02	0.02	-0.16	0.11	-0.11	-0.12	0.01
19	1		0.09	-0.36	0.14	0.12	0.17	0.04	0.08	-0.35	0.14
20	1		-0.09	0.18	0.07	0.22	-0.38	0.15	-0.12	0.25	0.07
21	1		-0.12	0.10	0.06	0.01	0.42	-0.09	-0.17	0.23	0.05
22	1		-0.25	0.00	0.11	-0.26	-0.33	0.07	0.12	0.01	-0.05
			43			44			45		
			A			A			A		
Frequencies	--		1247.8301			1249.1503			1254.1761		
Red. masses	--		1.2567			1.2560			1.2319		
Frc consts	--		1.1529			1.1547			1.1416		
IR Inten	--		41.7130			46.3323			2.2554		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6		0.11	0.08	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.05	0.04	0.00
2	6		0.03	-0.02	-0.05	-0.05	0.03	0.08	-0.04	0.03	0.07
3	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6		-0.01	0.04	-0.01	-0.04	0.10	-0.02	0.03	-0.08	0.02
13	14		-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1		-0.17	0.07	0.11	0.30	-0.15	-0.19	0.28	-0.13	-0.18
15	1		-0.03	0.12	0.17	0.07	-0.23	-0.31	0.06	-0.21	-0.29
16	1		-0.09	-0.01	0.19	0.15	0.03	-0.35	0.14	0.02	-0.34
17	1		-0.49	-0.10	0.00	-0.02	0.00	-0.01	-0.26	-0.05	0.00
18	1		-0.31	-0.38	-0.12	-0.02	-0.02	0.00	-0.17	-0.20	-0.06
19	1		0.01	-0.14	0.09	0.04	-0.35	0.23	-0.03	0.29	-0.19
20	1		0.11	-0.11	0.03	0.28	-0.31	0.07	-0.23	0.25	-0.06
21	1		0.01	-0.16	-0.02	0.04	-0.41	-0.06	-0.03	0.34	0.05
22	1		-0.32	-0.31	0.24	-0.01	-0.02	0.01	-0.17	-0.16	0.12

			46			47			48		
			A			A			A		
Frequencies	--		1428.9673			1433.1239			1434.7668		
Red. masses	--		1.0550			1.0513			1.0519		
Frc consts	--		1.2693			1.2722			1.2758		
IR Inten	--		0.5316			1.8254			0.7017		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6		0.03	-0.04	-0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.05
2	6		0.01	0.03	-0.01	0.03	0.01	0.02	0.00	-0.02	0.01
3	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6		-0.03	-0.01	0.01	-0.04	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.03
13	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1		-0.11	-0.30	0.06	0.10	-0.22	-0.05	0.13	0.19	-0.07
15	1		0.08	-0.03	0.20	-0.16	0.26	-0.02	-0.12	0.10	-0.19
16	1		-0.08	-0.03	-0.19	-0.37	-0.14	-0.14	-0.05	-0.02	0.12
17	1		0.24	0.08	0.20	-0.18	-0.03	0.00	-0.08	0.10	0.56
18	1		-0.29	0.04	-0.28	0.21	-0.12	0.22	0.06	-0.40	0.19
19	1		0.18	-0.02	0.17	0.37	0.09	0.24	-0.19	-0.19	-0.03
20	1		-0.11	0.08	-0.14	-0.17	0.18	0.02	0.03	-0.10	-0.33
21	1		0.28	0.03	-0.19	0.32	-0.08	-0.23	0.08	0.17	-0.03
22	1		-0.31	0.42	0.21	0.21	-0.20	-0.15	0.06	0.31	-0.07
			49			50			51		
			A			A			A		
Frequencies	--		1438.0675			1438.7836			1446.6299		
Red. masses	--		1.0510			1.0511			1.0472		
Frc consts	--		1.2805			1.2820			1.2913		
IR Inten	--		8.9590			8.4680			0.3681		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6		-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.03
2	6		0.01	0.05	-0.01	-0.03	0.00	-0.02	-0.03	0.01	-0.02
3	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6		0.02	0.01	0.01	-0.02	0.00	0.04	-0.01	-0.01	-0.03
13	14		0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
14	1		-0.22	-0.53	0.13	-0.15	0.15	0.08	-0.17	0.06	0.10
15	1		0.17	-0.09	0.39	0.20	-0.29	0.08	0.21	-0.29	0.13
16	1		-0.08	-0.04	-0.34	0.38	0.14	0.10	0.35	0.13	0.04
17	1		-0.12	0.00	0.08	-0.08	-0.05	-0.18	-0.09	0.06	0.34
18	1		0.15	-0.13	0.17	0.10	0.06	0.07	0.08	-0.27	0.17
19	1		-0.28	-0.11	-0.15	0.04	-0.20	0.17	0.28	0.25	0.07
20	1		0.10	-0.13	-0.13	-0.11	0.01	-0.46	-0.06	0.15	0.40
21	1		-0.16	0.11	0.13	0.38	0.18	-0.23	-0.04	-0.23	0.00
22	1		0.15	-0.08	-0.11	0.10	-0.21	-0.06	0.10	0.15	-0.08

				52			53			54		
				A			A			A		
Frequencies	--		3031.3843				3031.9816				3033.0430	
Red. masses	--		1.0353				1.0359				1.0357	
Frc consts	--		5.6053				5.6109				5.6134	
IR Inten	--		21.5390				44.2418				50.1937	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z		
1	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.04	0.03	0.01		
2	6	0.01	-0.01	-0.04	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.01		
3	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
4	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
5	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
6	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
7	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
8	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
9	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
10	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
11	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
12	6	0.01	-0.02	0.01	0.02	-0.03	0.02	0.00	-0.01	0.00		
13	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
14	1	0.36	-0.03	0.48	-0.15	0.01	-0.20	-0.07	0.01	-0.09		
15	1	-0.39	-0.28	0.07	0.16	0.11	-0.03	0.08	0.05	-0.01		
16	1	-0.14	0.45	-0.07	0.06	-0.19	0.03	0.03	-0.09	0.01		
17	1	0.01	-0.05	0.01	-0.03	0.11	-0.02	0.14	-0.47	0.10		
18	1	-0.02	0.02	0.03	0.06	-0.04	-0.09	-0.26	0.17	0.36		
19	1	-0.11	0.07	0.15	-0.24	0.15	0.34	-0.05	0.03	0.07		
20	1	0.16	0.12	-0.02	0.35	0.26	-0.05	0.07	0.05	-0.01		
21	1	-0.16	0.00	-0.24	-0.35	0.00	-0.54	-0.07	0.00	-0.10		
22	1	-0.03	0.00	-0.05	0.08	0.00	0.14	-0.35	0.02	-0.58		
				55			56			57		
				A			A			A		
Frequencies	--		3112.4605				3113.7585				3114.2516	
Red. masses	--		1.1001				1.0988				1.0990	
Frc consts	--		6.2788				6.2770				6.2797	
IR Inten	--		11.0197				19.4922				82.3562	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z		
1	6	0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.03	0.02	-0.03	0.07		
2	6	-0.07	0.02	-0.04	-0.01	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.01		
3	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
4	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
5	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
6	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
7	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
8	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
9	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
10	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
11	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
12	6	0.01	0.01	0.01	-0.04	-0.04	-0.06	0.02	0.01	0.02		
13	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
14	1	0.40	-0.02	0.58	0.06	0.00	0.08	-0.10	0.01	-0.15		
15	1	0.36	0.26	-0.09	0.03	0.02	-0.01	-0.10	-0.07	0.02		
16	1	0.12	-0.43	0.05	0.03	-0.09	0.01	-0.03	0.10	-0.01		
17	1	-0.03	0.11	-0.02	-0.06	0.22	-0.04	-0.14	0.51	-0.09		
18	1	0.03	-0.02	-0.04	0.10	-0.06	-0.12	0.21	-0.12	-0.25		
19	1	0.06	-0.03	-0.07	-0.26	0.15	0.33	0.09	-0.06	-0.12		
20	1	-0.10	-0.08	0.02	0.38	0.29	-0.08	-0.15	-0.12	0.03		
21	1	-0.08	0.00	-0.13	0.34	-0.02	0.52	-0.13	0.01	-0.20		
22	1	-0.07	0.00	-0.10	-0.15	0.00	-0.23	-0.34	0.00	-0.53		

			58			59			60		
			A			A			A		
Frequencies	--		3123.5458			3129.9922			3130.7268		
Red. masses	--		1.1008			1.1008			1.1009		
Frc consts	--		6.3277			6.3539			6.3577		
IR Inten	--		22.6852			20.4793			15.8970		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6		0.00	0.00	0.00	0.04	-0.07	-0.04	0.01	-0.01	0.00
2	6		-0.03	-0.09	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	14		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	0.00	-0.01	-0.07	-0.01	0.05
13	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1		-0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01
15	1		0.58	0.38	-0.12	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
16	1		-0.22	0.66	-0.09	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00
17	1		-0.01	0.03	-0.01	-0.15	0.57	-0.13	-0.02	0.09	-0.02
18	1		0.00	0.00	0.01	-0.45	0.25	0.58	-0.05	0.03	0.07
19	1		0.00	0.00	0.00	-0.06	0.04	0.08	0.39	-0.27	-0.54
20	1		0.02	0.02	0.00	-0.06	-0.05	0.01	0.52	0.42	-0.08
21	1		0.01	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01	-0.03	0.00	-0.01
22	1		-0.01	0.00	-0.01	0.06	-0.01	0.07	0.00	0.00	0.00

M3

Harmonic frequencies (cm⁻¹), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A⁴/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	--		19.6142			55.9799			81.0895		
Red. masses	--		1.5229			5.7620			2.3181		
Frc consts	--		0.0003			0.0106			0.0090		
IR Inten	--		0.6507			1.2382			0.0896		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	1		0.24	-0.23	0.31	-0.11	-0.32	-0.22	-0.29	0.57	-0.31
2	14		-0.01	-0.04	0.01	0.10	0.01	0.04	0.01	-0.07	0.02
3	14		0.00	-0.03	-0.03	0.07	0.00	0.06	0.05	-0.05	-0.02
4	14		0.02	0.00	-0.03	-0.09	0.03	0.09	0.01	0.00	-0.01
5	14		-0.01	-0.02	0.02	0.02	0.07	0.09	-0.02	-0.03	0.05
6	14		-0.02	-0.02	0.03	0.09	0.01	0.05	-0.02	-0.04	0.05
7	14		0.00	-0.04	-0.01	0.12	0.01	-0.01	0.02	-0.04	0.00
8	14		0.01	0.01	-0.01	-0.03	-0.01	-0.07	0.01	0.02	-0.04
9	14		0.00	0.02	0.01	-0.04	-0.03	-0.02	-0.03	0.04	0.01
10	14		-0.01	0.01	0.01	0.03	-0.03	-0.09	-0.01	0.02	0.01
11	1		0.21	0.66	-0.04	-0.36	0.29	-0.01	-0.25	-0.26	0.01
12	1		-0.40	-0.03	-0.37	-0.55	-0.13	-0.37	0.50	0.26	0.02
13	14		0.02	0.09	-0.02	-0.24	-0.05	-0.13	-0.01	0.13	-0.07

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	93.4868			171.6160			185.4696		
Red. masses	--	17.0821			23.7905			27.5019		
Frc consts	--	0.0880			0.4128			0.5574		
IR Inten	--	13.4695			0.0813			0.3687		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	1	-0.26	0.02	-0.18	0.08	-0.12	0.08	-0.06	0.01	0.10
2	14	0.16	0.22	0.29	-0.02	-0.01	-0.02	-0.21	-0.11	-0.04
3	14	-0.20	0.11	-0.14	0.26	0.04	0.10	-0.09	0.02	0.02
4	14	0.16	-0.07	-0.22	0.00	0.04	-0.02	0.31	0.00	-0.19
5	14	-0.07	-0.27	0.11	-0.21	-0.17	0.01	-0.03	0.00	0.05
6	14	0.02	0.06	-0.22	0.10	-0.02	-0.28	0.19	-0.18	0.33
7	14	0.13	-0.18	-0.06	-0.17	0.23	0.18	-0.02	0.37	-0.08
8	14	0.03	-0.03	0.07	-0.11	-0.07	-0.33	0.01	-0.18	0.31
9	14	-0.03	0.12	0.02	-0.02	0.35	0.20	-0.19	0.25	-0.02
10	14	0.04	0.00	-0.02	0.17	-0.38	0.18	0.09	-0.18	-0.43
11	1	-0.41	-0.09	0.24	0.01	0.25	0.01	0.01	-0.01	0.00
12	1	-0.16	0.06	0.20	-0.17	-0.05	-0.19	-0.04	0.01	0.05
13	14	-0.22	0.04	0.15	0.00	0.00	-0.02	-0.06	0.01	0.05

		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies	--	205.8131			229.0102			249.8830		
Red. masses	--	15.4621			25.9053			26.2700		
Frc consts	--	0.3859			0.8005			0.9665		
IR Inten	--	3.1481			0.1372			4.0480		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	1	-0.23	0.16	0.38	0.03	-0.05	0.01	-0.04	-0.05	-0.09
2	14	-0.26	0.00	0.16	-0.11	0.26	-0.17	-0.11	-0.06	-0.04
3	14	0.18	0.05	-0.07	0.07	0.23	0.37	-0.16	-0.13	-0.15
4	14	-0.03	-0.03	-0.02	0.05	-0.11	0.04	-0.21	0.22	0.49
5	14	0.18	0.01	-0.05	-0.06	-0.24	-0.33	-0.14	-0.18	-0.16
6	14	0.00	-0.13	0.06	0.04	-0.01	0.40	0.06	-0.22	-0.14
7	14	-0.09	0.08	-0.07	0.12	-0.36	-0.17	-0.01	-0.05	-0.27
8	14	0.07	0.03	-0.25	-0.08	-0.03	-0.21	0.14	0.14	0.18
9	14	0.15	-0.15	-0.12	0.00	0.18	0.10	0.13	0.17	0.17
10	14	0.05	0.00	-0.02	-0.03	0.06	-0.02	0.35	0.09	-0.12
11	1	-0.13	0.10	0.28	0.11	-0.12	-0.10	-0.14	-0.03	0.09
12	1	-0.15	0.14	0.31	-0.04	0.01	0.19	-0.11	0.00	0.09
13	14	-0.23	0.13	0.35	0.00	0.01	-0.01	-0.05	0.01	0.04

		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies	--	261.7463			264.1278			268.1216		
Red. masses	--	26.6903			27.6333			27.6632		
Frc consts	--	1.0774			1.1358			1.1717		
IR Inten	--	4.0027			1.4857			2.2166		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	1	-0.10	0.07	0.14	-0.03	0.01	0.07	-0.03	0.04	0.05
2	14	-0.23	-0.09	-0.08	-0.01	-0.16	0.07	0.09	0.12	0.03
3	14	0.07	-0.01	0.29	0.16	-0.14	0.40	0.08	-0.03	-0.17
4	14	0.32	-0.09	0.04	-0.05	0.51	-0.20	0.14	0.17	0.42
5	14	-0.08	0.53	0.13	0.06	-0.17	0.02	0.05	0.02	-0.14
6	14	-0.09	-0.05	-0.38	-0.11	-0.02	-0.16	-0.14	0.12	0.03
7	14	0.03	-0.33	-0.21	0.03	-0.12	-0.03	-0.11	-0.14	0.16
8	14	0.14	-0.03	0.02	-0.28	-0.08	0.22	0.34	-0.31	-0.01
9	14	-0.14	0.07	0.11	0.32	0.12	-0.29	-0.06	0.26	-0.31
10	14	0.07	-0.02	-0.01	-0.10	0.06	-0.09	-0.37	-0.25	-0.09
11	1	-0.06	0.05	0.07	0.00	-0.04	0.03	-0.03	0.03	0.06
12	1	-0.05	0.03	0.03	-0.01	0.00	0.07	-0.01	0.03	0.03
13	14	-0.08	0.02	0.07	-0.03	0.00	0.04	-0.03	0.03	0.06

			13			14			15		
			A			A			A		
Frequencies	--		281.3544			291.6872			307.9497		
Red. masses	--		24.7631			27.7116			27.9090		
Frc consts	--		1.1550			1.3891			1.5594		
IR Inten	--		0.2704			2.7592			0.8989		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	1		0.08	-0.14	0.05	0.02	-0.02	0.02	-0.01	0.01	0.00
2	14		-0.02	0.03	-0.02	0.08	-0.18	0.11	-0.01	0.02	-0.01
3	14		0.00	-0.03	0.07	-0.37	-0.17	0.12	0.06	-0.30	0.05
4	14		0.05	-0.12	0.06	0.13	-0.32	0.21	0.05	-0.11	0.07
5	14		0.02	-0.04	0.02	0.43	0.04	-0.07	0.13	-0.15	0.25
6	14		0.37	-0.19	-0.05	-0.23	0.01	-0.05	0.30	0.53	0.04
7	14		-0.20	-0.21	0.26	0.15	0.17	-0.05	-0.51	-0.05	-0.35
8	14		-0.05	0.51	0.09	-0.29	0.10	-0.22	-0.02	-0.05	-0.03
9	14		-0.21	0.09	-0.44	0.10	0.36	-0.08	0.04	0.01	0.07
10	14		0.04	-0.03	0.03	-0.01	0.00	0.01	-0.03	0.10	-0.07
11	1		0.14	-0.08	-0.10	-0.02	0.05	0.04	0.00	0.03	0.00
12	1		-0.13	-0.03	0.19	0.00	-0.02	-0.06	0.00	0.00	-0.04
13	14		0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
			16			17			18		
			A			A			A		
Frequencies	--		319.2152			336.9688			346.3826		
Red. masses	--		21.5112			26.3051			24.9775		
Frc consts	--		1.2915			1.7598			1.7657		
IR Inten	--		0.4240			0.0661			0.0390		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	1		0.10	-0.06	-0.11	-0.01	0.01	0.08	0.06	-0.03	-0.12
2	14		-0.13	-0.04	0.01	0.00	0.01	-0.02	-0.13	-0.04	0.03
3	14		-0.24	0.34	0.08	0.10	-0.04	-0.04	0.01	0.31	-0.04
4	14		0.13	0.12	0.13	0.00	-0.02	-0.01	0.06	0.06	0.05
5	14		-0.05	-0.14	0.39	-0.13	0.00	-0.01	0.18	-0.12	0.21
6	14		0.04	-0.18	0.01	-0.25	0.27	0.19	-0.26	0.12	-0.01
7	14		-0.05	0.10	-0.20	0.18	0.06	-0.37	-0.10	-0.17	0.13
8	14		0.13	-0.13	-0.19	-0.02	0.23	0.19	0.00	0.35	-0.01
9	14		0.08	-0.06	-0.25	-0.07	-0.06	-0.29	0.17	-0.12	0.23
10	14		-0.02	0.08	0.23	0.23	-0.48	0.32	-0.01	-0.32	-0.43
11	1		0.21	-0.08	-0.26	0.09	-0.09	-0.07	0.11	-0.09	-0.17
12	1		0.14	-0.08	-0.26	-0.03	0.03	0.18	0.11	-0.06	-0.17
13	14		0.10	-0.08	-0.19	-0.03	0.03	0.02	0.08	-0.06	-0.15
			19			20			21		
			A			A			A		
Frequencies	--		359.3661			376.8739			388.5935		
Red. masses	--		22.6009			17.8323			20.9982		
Frc consts	--		1.7197			1.4923			1.8682		
IR Inten	--		5.4247			0.3078			0.1389		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	1		0.10	-0.16	-0.36	0.10	-0.23	-0.45	-0.09	0.14	-0.04
2	14		0.13	0.13	0.13	0.32	0.22	0.15	0.08	-0.16	0.11
3	14		0.27	0.20	-0.02	-0.03	-0.17	0.08	-0.23	-0.02	0.29
4	14		-0.30	-0.17	-0.10	0.28	0.12	0.03	-0.09	0.27	-0.17
5	14		0.33	0.05	0.04	-0.17	0.11	-0.08	0.24	-0.10	-0.21
6	14		-0.13	-0.30	-0.04	-0.16	-0.26	0.10	0.01	0.07	-0.02
7	14		-0.24	-0.01	-0.26	-0.28	0.07	-0.11	-0.06	0.04	-0.03
8	14		0.04	-0.06	0.26	-0.09	0.11	-0.12	0.38	0.09	-0.12
9	14		-0.12	0.22	0.05	0.06	-0.17	0.04	-0.37	-0.09	0.10
10	14		-0.06	0.00	0.09	0.03	-0.03	-0.07	0.05	-0.08	0.05
11	1		-0.06	-0.07	-0.04	-0.23	-0.03	0.14	-0.19	0.19	0.17
12	1		0.00	-0.07	-0.14	-0.17	-0.04	0.06	0.14	-0.01	-0.33
13	14		0.08	-0.04	-0.12	0.05	0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.02

			22			23			24		
			A			A			A		
Frequencies	--		394.7604			425.2355			434.8881		
Red. masses	--		27.0464			23.7713			3.2624		
Frc consts	--		2.4833			2.5326			0.3635		
IR Inten	--		4.2465			0.0711			2.3174		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	1		-0.02	0.06	0.13	0.03	-0.14	-0.17	0.16	-0.25	0.10
2	14		-0.06	-0.04	-0.03	0.04	0.00	-0.05	-0.05	0.14	-0.09
3	14		0.13	0.06	-0.20	-0.12	-0.10	0.14	0.00	-0.13	0.01
4	14		0.30	0.25	0.18	-0.17	-0.14	-0.12	-0.01	0.03	-0.02
5	14		0.22	-0.12	-0.10	-0.17	0.06	0.05	0.08	-0.04	0.10
6	14		0.24	-0.09	-0.13	0.20	-0.10	-0.03	-0.06	-0.04	-0.01
7	14		0.17	0.06	-0.23	0.12	0.12	-0.16	0.05	0.02	0.03
8	14		-0.34	0.12	0.07	0.29	0.25	0.01	0.04	0.00	-0.03
9	14		-0.25	-0.17	0.24	0.35	0.08	0.11	-0.05	0.00	0.02
10	14		-0.40	-0.07	0.18	-0.51	-0.21	0.00	0.01	0.00	0.00
11	1		0.09	0.00	-0.05	-0.16	-0.02	0.13	0.38	-0.35	-0.32
12	1		0.04	0.02	0.01	-0.19	0.00	0.17	-0.25	0.02	0.62
13	14		-0.02	0.00	0.01	-0.02	0.03	0.05	-0.02	0.05	-0.03
			25			26			27		
			A			A			A		
Frequencies	--		498.0697			517.2633			525.1438		
Red. masses	--		15.3833			1.2354			1.5795		
Frc consts	--		2.2484			0.1947			0.2566		
IR Inten	--		10.8300			62.6397			15.6004		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	1		0.15	-0.11	-0.27	-0.06	0.23	0.61	0.21	-0.40	-0.20
2	14		-0.35	0.17	0.46	0.04	-0.02	0.03	0.02	-0.09	0.05
3	14		0.04	-0.17	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.05	0.00
4	14		0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
5	14		-0.05	0.06	-0.13	-0.02	0.01	-0.02	-0.02	0.01	-0.03
6	14		0.07	0.05	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00
7	14		0.09	0.02	0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01
8	14		0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
9	14		0.02	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
10	14		-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
11	1		0.22	-0.14	-0.32	0.56	-0.09	-0.40	0.11	-0.36	-0.15
12	1		0.19	-0.11	-0.38	0.28	0.07	0.06	-0.39	-0.01	0.64
13	14		0.14	-0.11	-0.26	-0.06	-0.01	-0.03	0.00	0.06	-0.03
			28			29			30		
			A			A			A		
Frequencies	--		854.1234			926.8069			942.3888		
Red. masses	--		1.1029			1.0314			1.0332		
Frc consts	--		0.4740			0.5220			0.5406		
IR Inten	--		1619.1161			109.3272			83.5990		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	1		-0.10	0.31	0.46	0.11	-0.30	-0.28	-0.33	0.47	-0.46
2	14		0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	14		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1		-0.39	0.31	0.28	0.12	0.58	0.01	0.40	0.30	-0.19
12	1		-0.18	-0.02	0.56	0.56	0.14	0.37	-0.38	-0.09	0.14
13	14		0.02	-0.02	-0.05	-0.03	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.02

		31			32			33		
		A			A			A		
Frequencies	--	2140.5144			2160.5339			2161.8621		
Red. masses	--	1.0441			1.0470			1.0270		
Frc consts	--	2.8187			2.8796			2.8280		
IR Inten	--	370.9942			276.7733			546.6859		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	1	0.85	0.46	-0.14	-0.09	-0.03	0.00	0.19	0.12	-0.02
2	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	0.08	-0.04	0.16	0.46	-0.11	0.74	-0.24	0.07	-0.37
12	1	-0.05	0.14	-0.01	0.10	-0.46	0.01	0.19	-0.84	0.06
13	14	-0.03	-0.02	0.00	-0.02	0.02	-0.03	0.00	0.02	0.01

M4

Harmonic frequencies (cm⁻¹), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A⁴/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	--	16.5792			20.3734			33.2526		
Red. masses	--	28.8081			28.1149			28.3964		
Frc consts	--	0.0047			0.0069			0.0185		
IR Inten	--	1.5642			0.5403			0.9584		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.03	-0.23	0.05	-0.10	0.00	0.01	-0.12	0.06	0.05
2	14	-0.04	-0.08	-0.01	-0.07	0.00	0.01	-0.07	-0.05	0.03
3	14	-0.08	-0.04	-0.27	-0.21	-0.02	-0.08	0.17	-0.02	0.12
4	14	0.04	0.21	-0.18	0.06	0.14	-0.07	0.22	-0.15	0.05
5	14	0.04	0.12	0.07	0.16	0.13	0.03	-0.07	-0.20	-0.05
6	14	0.01	-0.04	0.19	0.11	-0.08	0.21	-0.20	0.06	0.03
7	14	-0.06	-0.18	-0.02	-0.14	-0.21	0.16	-0.03	0.15	0.14
8	14	0.01	0.10	-0.13	-0.04	-0.07	0.11	0.22	0.11	0.21
9	14	0.08	0.23	0.09	0.22	0.05	0.17	0.05	-0.01	0.09
10	14	0.02	0.02	0.14	0.08	-0.18	0.30	-0.03	0.24	0.20
11	14	-0.02	-0.10	0.02	-0.08	0.05	-0.04	-0.10	0.10	-0.05
12	14	-0.15	-0.01	0.23	0.13	0.03	-0.17	-0.21	0.01	-0.15
13	14	-0.04	-0.13	0.07	0.05	0.18	-0.29	-0.06	-0.22	-0.21
14	14	0.08	-0.20	-0.13	-0.20	0.19	-0.12	0.06	-0.09	-0.10
15	14	0.15	0.08	-0.18	-0.16	-0.04	0.06	0.20	0.09	0.03
16	14	-0.04	0.22	0.07	0.10	-0.12	0.02	-0.02	0.15	-0.01
17	14	-0.06	0.17	0.12	0.23	-0.01	-0.18	0.00	-0.13	-0.14
18	14	0.10	0.03	-0.13	0.00	0.08	-0.14	0.19	-0.19	-0.11
19	14	0.08	0.31	-0.10	0.11	-0.13	0.02	0.21	-0.01	-0.01
20	17	-0.12	-0.21	0.05	-0.09	0.01	-0.01	-0.18	0.02	-0.08
21	14	-0.03	-0.17	0.03	-0.11	0.00	0.00	-0.14	0.05	-0.02

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	50.1864			52.6970			65.4318		
Red. masses	--	28.7704			30.8220			28.8068		
Frc consts	--	0.0427			0.0504			0.0727		
IR Inten	--	2.3490			0.2974			0.5065		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.04	-0.14	-0.29	-0.29	0.31	-0.01	0.14	-0.02	0.18
2	14	0.22	0.16	0.08	0.01	-0.25	0.06	0.13	-0.21	0.09
3	14	0.07	0.11	0.14	0.18	-0.16	-0.15	0.15	-0.16	-0.07
4	14	-0.08	0.01	0.13	0.07	-0.03	-0.07	-0.13	0.09	0.07
5	14	0.08	0.07	0.07	-0.11	-0.15	0.14	-0.01	0.05	0.27
6	14	0.21	0.07	-0.12	-0.13	-0.08	0.12	0.10	-0.13	0.20
7	14	0.20	0.07	-0.07	0.07	-0.10	-0.06	0.18	-0.15	-0.07
8	14	-0.04	-0.05	-0.03	0.12	0.11	-0.14	-0.05	0.02	-0.24
9	14	-0.03	-0.07	-0.08	-0.09	0.14	0.05	-0.13	0.09	0.03
10	14	0.09	-0.07	-0.21	-0.05	0.15	0.00	0.01	-0.05	-0.14
11	14	-0.21	-0.05	0.16	-0.04	-0.15	0.08	0.00	0.27	-0.01
12	14	-0.22	-0.05	0.16	-0.02	-0.08	0.17	-0.18	0.12	-0.20
13	14	-0.15	-0.06	-0.25	-0.05	0.04	-0.10	-0.11	0.00	-0.13
14	14	-0.23	0.00	-0.11	-0.17	0.01	-0.08	0.02	0.21	0.11
15	14	-0.10	0.00	0.12	-0.17	-0.10	-0.01	0.02	0.16	0.17
16	14	-0.06	0.08	0.28	-0.01	-0.04	0.13	-0.10	0.16	-0.10
17	14	0.15	0.04	0.01	0.12	0.08	0.05	-0.08	-0.11	-0.12
18	14	0.09	-0.04	-0.15	-0.02	0.05	-0.10	0.02	-0.09	0.12
19	14	0.22	0.06	0.12	0.05	0.04	0.02	0.00	-0.10	0.08
20	17	-0.06	-0.04	0.05	0.45	0.15	-0.08	-0.05	-0.10	-0.23
21	14	-0.05	-0.02	0.05	0.04	-0.06	0.02	0.06	0.00	0.00

		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies	--	70.9910			79.5945			98.9269		
Red. masses	--	28.0910			29.8364			29.5318		
Frc consts	--	0.0834			0.1114			0.1703		
IR Inten	--	1.5025			5.4805			48.6588		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.08	0.02	-0.03	0.30	-0.06	0.29	-0.18	0.15	0.30
2	14	0.08	0.01	0.12	-0.09	0.06	-0.08	0.27	0.19	0.33
3	14	0.13	0.01	0.28	-0.08	0.05	-0.01	-0.12	0.14	-0.15
4	14	-0.14	0.08	0.33	0.05	-0.03	-0.06	0.16	-0.07	-0.24
5	14	0.03	0.17	0.26	0.00	-0.01	-0.15	-0.02	-0.28	0.12
6	14	0.10	0.03	0.22	-0.06	0.04	-0.09	0.11	0.05	-0.22
7	14	0.13	0.09	0.12	-0.10	0.06	0.02	0.21	-0.19	-0.12
8	14	-0.07	0.05	0.06	0.02	-0.02	0.07	0.07	-0.06	-0.01
9	14	-0.10	-0.01	0.10	0.06	-0.04	-0.03	0.00	0.10	-0.03
10	14	0.00	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.05	0.09	-0.04	-0.11
11	14	0.19	-0.17	-0.17	0.27	-0.10	-0.01	0.08	-0.03	-0.01
12	14	0.03	-0.12	-0.05	-0.28	-0.13	0.14	0.01	-0.04	-0.03
13	14	-0.01	-0.04	-0.08	-0.23	-0.04	-0.29	-0.01	0.00	-0.01
14	14	0.07	-0.04	-0.17	-0.08	0.26	0.01	0.03	0.01	-0.04
15	14	-0.04	-0.12	-0.33	-0.24	-0.11	-0.04	-0.01	-0.03	-0.07
16	14	-0.02	-0.03	-0.27	-0.16	0.20	-0.13	-0.01	-0.03	-0.08
17	14	-0.07	0.04	-0.10	0.05	0.02	-0.06	-0.05	0.00	-0.03
18	14	-0.07	-0.01	-0.17	0.02	-0.11	-0.01	-0.05	0.00	-0.02
19	14	-0.12	0.04	-0.27	0.02	-0.02	-0.02	-0.07	-0.02	-0.06
20	17	0.01	0.00	0.09	0.20	0.01	0.21	-0.23	0.02	0.16
21	14	-0.03	-0.02	0.04	0.21	-0.02	0.06	-0.18	0.07	0.23

			10			11			12		
			A			A			A		
Frequencies	--		103.3501			123.5272			130.9077		
Red. masses	--		32.5171			30.9325			30.4017		
Frc consts	--		0.2046			0.2781			0.3070		
IR Inten	--		2.1880			40.5899			5.7960		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17		0.05	0.16	0.55	0.15	-0.11	-0.30	0.38	-0.20	0.14
2	14		-0.04	0.07	-0.09	0.13	0.15	0.22	0.10	0.06	0.11
3	14		0.05	0.08	0.09	-0.27	0.13	0.01	-0.09	0.04	0.03
4	14		-0.05	0.07	0.09	0.01	-0.01	-0.06	0.01	-0.01	0.00
5	14		0.11	0.18	-0.09	-0.19	-0.17	0.16	-0.09	-0.10	0.10
6	14		0.08	0.07	-0.04	-0.10	0.11	-0.07	-0.03	0.06	-0.03
7	14		-0.01	0.15	-0.01	-0.03	-0.11	0.08	0.03	-0.09	0.02
8	14		-0.01	0.01	-0.01	-0.07	0.00	0.18	-0.02	0.01	0.08
9	14		0.05	-0.06	-0.07	-0.10	0.14	0.16	-0.05	0.07	0.09
10	14		0.04	0.00	-0.06	-0.08	0.03	0.14	-0.03	0.03	0.06
11	14		-0.10	-0.13	0.05	0.21	-0.07	0.00	-0.37	0.11	0.11
12	14		0.04	-0.10	0.12	0.01	-0.09	0.11	0.02	0.06	-0.23
13	14		0.01	-0.05	0.02	-0.01	-0.01	-0.03	0.00	-0.03	0.00
14	14		-0.10	-0.16	-0.06	0.07	0.10	0.07	-0.13	-0.24	-0.19
15	14		-0.08	-0.14	-0.06	-0.04	-0.10	-0.04	0.07	0.15	-0.07
16	14		0.04	-0.16	0.17	0.04	0.03	-0.04	-0.05	-0.23	0.12
17	14		0.03	0.03	0.06	0.05	0.02	0.04	-0.14	-0.03	-0.11
18	14		0.01	0.01	-0.08	0.05	-0.05	0.07	-0.09	0.05	-0.19
19	14		0.04	0.04	-0.01	0.02	0.00	0.00	-0.09	0.03	-0.13
20	17		-0.11	-0.09	-0.55	0.04	-0.04	-0.54	0.31	0.20	0.06
21	14		-0.02	0.04	-0.04	0.08	0.08	0.06	0.08	0.08	0.00
			13			14			15		
			A			A			A		
Frequencies	--		143.4170			169.1247			179.4182		
Red. masses	--		31.3372			28.0338			27.9955		
Frc consts	--		0.3798			0.4724			0.5310		
IR Inten	--		6.4713			0.2664			0.6988		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17		0.37	0.20	-0.14	0.05	0.04	0.01	0.02	0.02	0.00
2	14		-0.02	-0.14	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.05
3	14		0.08	-0.17	-0.06	-0.02	-0.01	0.00	0.33	0.01	0.15
4	14		0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.03	0.01
5	14		-0.01	-0.08	0.06	0.01	0.01	0.00	-0.24	-0.18	-0.03
6	14		-0.03	-0.16	0.14	-0.01	-0.01	0.03	0.07	0.02	-0.31
7	14		0.03	-0.12	-0.03	0.01	-0.03	-0.02	-0.14	0.15	0.18
8	14		0.04	0.04	-0.04	0.01	0.01	0.03	-0.17	0.01	-0.39
9	14		-0.02	0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.06	0.32	0.25
10	14		-0.01	0.02	-0.02	-0.01	0.04	0.00	0.16	-0.40	0.22
11	14		0.02	-0.10	0.00	-0.03	-0.01	0.03	0.00	-0.01	-0.01
12	14		0.00	-0.11	0.11	-0.17	0.00	0.29	-0.01	0.00	0.02
13	14		-0.02	-0.03	0.00	0.01	0.03	-0.08	0.01	0.00	0.01
14	14		-0.06	-0.06	0.00	0.09	-0.21	-0.16	0.01	-0.04	-0.02
15	14		-0.13	-0.16	-0.06	0.32	0.13	0.14	0.01	-0.02	0.01
16	14		0.03	-0.09	0.10	-0.17	0.03	-0.23	-0.01	0.02	-0.02
17	14		0.01	0.05	0.04	0.44	0.12	0.03	0.03	0.00	0.00
18	14		0.04	0.00	-0.02	-0.25	0.21	-0.07	-0.02	0.04	-0.03
19	14		0.04	0.06	-0.01	-0.24	-0.41	0.07	0.00	-0.03	0.01
20	17		-0.45	0.25	0.11	-0.04	0.02	-0.04	-0.04	0.01	0.02
21	14		0.12	0.48	-0.15	0.02	0.05	-0.01	0.01	0.02	-0.02

			16			17			18		
			A			A			A		
Frequencies	--		181.3354			185.9496			200.3361		
Red. masses	--		28.0535			28.1356			31.2275		
Frc consts	--		0.5435			0.5732			0.7384		
IR Inten	--		6.6475			5.2586			21.0989		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17		0.04	-0.06	0.04	0.01	-0.10	0.01	0.04	0.45	-0.09
2	14		0.07	0.03	0.01	-0.21	-0.07	-0.03	0.11	-0.01	-0.12
3	14		-0.01	0.00	0.00	-0.06	0.03	0.05	-0.15	-0.01	0.04
4	14		-0.05	-0.01	0.04	0.28	0.00	-0.18	0.06	0.03	0.00
5	14		0.01	0.01	0.01	-0.08	-0.06	0.04	-0.13	0.02	0.02
6	14		-0.03	0.06	-0.04	0.19	-0.22	0.27	0.01	0.07	-0.04
7	14		0.04	-0.11	0.00	-0.03	0.39	-0.03	0.02	0.02	0.01
8	14		0.00	0.04	-0.02	0.00	-0.21	0.26	-0.01	-0.07	0.22
9	14		0.01	-0.06	-0.01	-0.14	0.33	0.05	-0.08	0.13	0.11
10	14		-0.02	0.07	0.07	0.04	-0.19	-0.40	-0.01	-0.03	-0.04
11	14		0.08	-0.08	-0.15	0.02	-0.02	-0.03	-0.05	0.05	0.15
12	14		-0.02	0.03	-0.07	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.09
13	14		0.07	0.07	0.34	0.01	0.01	0.05	0.03	0.01	0.07
14	14		0.01	-0.16	-0.14	0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.06	-0.08
15	14		-0.21	-0.21	0.16	-0.02	-0.04	0.02	-0.06	0.08	0.01
16	14		-0.07	0.37	-0.09	-0.01	0.06	-0.02	-0.12	-0.01	0.04
17	14		-0.15	-0.24	-0.06	-0.02	-0.04	-0.01	-0.06	-0.08	-0.07
18	14		-0.10	0.32	-0.26	-0.03	0.07	-0.05	0.00	0.07	-0.13
19	14		0.33	-0.15	0.25	0.06	-0.03	0.05	0.05	-0.04	-0.04
20	17		0.03	0.06	-0.01	0.04	0.09	-0.05	-0.08	-0.48	0.12
21	14		-0.06	0.01	-0.07	-0.09	0.03	0.04	0.46	-0.13	-0.09
			19			20			21		
			A			A			A		
Frequencies	--		224.9208			227.2321			233.5822		
Red. masses	--		28.1264			28.0405			28.0007		
Frc consts	--		0.8383			0.8531			0.9001		
IR Inten	--		122.3944			39.8199			1.7436		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17		-0.03	-0.03	0.10	-0.01	0.00	-0.07	-0.01	0.02	-0.01
2	14		0.21	-0.02	-0.19	-0.11	-0.02	0.14	-0.10	0.29	-0.11
3	14		-0.06	-0.07	0.09	0.02	0.03	-0.11	0.07	0.24	0.37
4	14		0.07	0.01	-0.02	-0.05	0.01	0.01	0.04	-0.17	-0.02
5	14		-0.11	0.05	0.03	0.08	-0.01	0.03	-0.05	-0.18	-0.36
6	14		0.04	0.14	-0.06	-0.04	-0.07	-0.01	0.07	-0.05	0.45
7	14		0.14	-0.14	0.07	-0.09	0.14	-0.02	0.08	-0.35	-0.21
8	14		-0.04	-0.04	0.15	0.03	0.03	-0.07	-0.10	0.00	-0.23
9	14		-0.11	0.12	0.05	0.06	-0.10	-0.04	0.01	0.11	0.09
10	14		-0.05	0.00	-0.02	0.04	0.00	0.02	-0.06	0.12	-0.01
11	14		-0.13	0.15	-0.31	0.17	0.30	0.07	0.04	0.04	0.02
12	14		-0.22	0.25	0.06	-0.34	0.05	-0.10	-0.05	0.00	-0.02
13	14		0.07	-0.08	0.00	-0.06	-0.09	0.00	-0.01	0.00	0.00
14	14		0.11	-0.14	0.18	0.45	-0.12	-0.01	0.05	0.00	-0.01
15	14		-0.26	-0.17	-0.05	-0.31	-0.04	-0.06	-0.03	0.01	0.00
16	14		0.13	-0.04	0.00	0.17	-0.27	0.20	0.03	-0.04	0.04
17	14		0.28	0.10	0.08	0.10	-0.02	-0.06	0.00	-0.01	-0.01
18	14		0.04	-0.07	0.13	-0.20	0.17	-0.12	-0.02	0.01	0.00
19	14		-0.02	0.05	-0.04	0.02	0.05	-0.01	0.00	0.01	0.00
20	17		0.03	0.04	0.08	0.01	-0.06	-0.02	0.01	-0.05	-0.01
21	14		-0.10	-0.09	-0.37	0.06	0.02	0.23	0.03	-0.02	0.03

			22			23			24		
			A			A			A		
Frequencies	--		247.6205			253.7827			258.8126		
Red. masses	--		27.9886			28.0011			28.0413		
Frc consts	--		1.0111			1.0626			1.1067		
IR Inten	--		10.2608			2.6335			7.2280		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17		0.01	-0.01	-0.03	-0.03	-0.04	0.02	0.05	0.05	-0.02
2	14		-0.04	0.03	0.11	-0.11	0.01	-0.04	0.01	0.04	0.09
3	14		0.04	0.07	-0.04	-0.22	-0.03	-0.17	0.00	0.10	-0.10
4	14		-0.04	-0.04	-0.09	-0.17	0.09	0.53	-0.07	-0.10	-0.11
5	14		0.08	-0.07	0.02	-0.18	-0.16	-0.15	0.06	-0.09	0.02
6	14		0.02	-0.03	0.10	0.06	-0.20	-0.12	0.05	0.00	0.16
7	14		-0.04	0.11	0.05	-0.01	-0.04	-0.30	-0.04	0.17	0.05
8	14		-0.04	0.03	-0.09	0.19	0.13	0.11	-0.04	0.03	-0.10
9	14		0.02	-0.09	-0.06	0.13	0.12	0.23	-0.01	-0.12	0.01
10	14		-0.02	-0.01	0.03	0.38	0.09	-0.10	-0.01	0.00	0.04
11	14		-0.13	0.08	0.11	-0.04	0.02	0.01	-0.16	0.02	0.08
12	14		-0.12	0.10	0.11	-0.04	0.05	0.01	0.41	0.13	-0.05
13	14		0.34	-0.04	0.33	0.07	-0.01	0.00	0.04	-0.06	-0.33
14	14		-0.15	0.09	0.11	0.00	-0.04	0.04	0.16	-0.40	0.12
15	14		-0.24	0.11	-0.16	-0.09	-0.02	-0.03	-0.26	-0.13	0.03
16	14		-0.31	-0.01	-0.13	-0.06	0.06	-0.05	-0.18	0.32	-0.08
17	14		0.24	-0.14	0.01	0.05	0.00	0.00	0.05	0.13	-0.05
18	14		0.28	-0.06	-0.04	0.03	-0.06	0.03	-0.05	-0.12	0.11
19	14		0.11	-0.16	-0.39	-0.01	-0.01	-0.04	-0.08	0.07	0.09
20	17		0.00	0.01	-0.03	0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.06	0.00
21	14		-0.02	0.03	0.09	-0.04	0.00	0.03	0.04	0.01	0.04
			25			26			27		
			A			A			A		
Frequencies	--		262.3372			264.5769			265.6510		
Red. masses	--		27.9842			28.0015			28.0156		
Frc consts	--		1.1347			1.1549			1.1649		
IR Inten	--		0.5644			1.3545			0.8197		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17		-0.02	-0.02	0.00	-0.03	-0.04	-0.02	-0.01	-0.03	-0.02
2	14		-0.03	-0.01	0.00	-0.14	-0.15	0.06	-0.15	0.06	-0.03
3	14		0.02	-0.01	0.04	0.12	-0.17	0.44	0.03	0.08	-0.01
4	14		0.06	0.00	0.01	0.10	0.38	-0.11	0.32	-0.28	0.17
5	14		0.00	0.08	0.03	0.04	0.03	0.06	0.00	0.49	0.11
6	14		-0.03	0.01	-0.06	-0.17	-0.06	-0.26	-0.13	0.05	-0.17
7	14		-0.01	-0.05	-0.04	0.01	-0.23	-0.20	-0.05	-0.21	-0.11
8	14		0.03	-0.03	0.00	-0.19	-0.04	0.18	0.33	-0.19	-0.17
9	14		-0.02	0.02	0.01	0.25	0.13	-0.18	-0.25	0.07	0.15
10	14		-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.10	-0.07	-0.08	-0.13	0.01
11	14		-0.05	-0.15	0.07	-0.03	0.07	0.13	-0.01	0.06	0.10
12	14		-0.27	-0.22	0.04	0.19	0.03	0.01	0.14	0.03	0.01
13	14		0.20	0.52	-0.13	-0.05	-0.04	-0.08	-0.03	-0.08	-0.03
14	14		0.07	-0.28	0.13	0.12	-0.06	0.04	0.07	0.00	0.02
15	14		0.04	0.01	-0.06	-0.14	0.03	-0.05	-0.10	0.03	-0.03
16	14		-0.06	0.01	0.04	-0.12	0.07	-0.04	-0.10	0.03	-0.03
17	14		-0.06	-0.11	-0.41	0.02	-0.05	0.07	0.02	-0.02	0.07
18	14		0.08	0.13	0.39	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.05
19	14		0.07	0.11	-0.07	0.03	-0.05	-0.07	0.02	-0.05	-0.06
20	17		0.00	0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.02	-0.03	0.05	-0.02
21	14		-0.01	0.01	0.02	0.00	0.03	0.11	-0.01	0.04	0.10

			28			29			30		
			A			A			A		
Frequencies	--		269.3687			271.0179			280.3660		
Red. masses	--		27.9911			27.9773			27.9865		
Frc consts	--		1.1966			1.2107			1.2961		
IR Inten	--		9.2633			7.1092			0.7960		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17		0.03	0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.02	-0.01
2	14		-0.09	-0.03	0.06	0.14	0.10	0.05	0.01	-0.01	0.01
3	14		0.03	0.01	0.10	0.10	-0.03	-0.18	0.01	0.00	-0.02
4	14		0.07	0.03	-0.03	0.03	0.26	0.40	-0.02	0.07	0.01
5	14		0.03	0.07	0.07	0.03	-0.18	-0.21	0.00	-0.02	0.00
6	14		-0.07	-0.03	-0.08	-0.07	0.09	0.12	-0.10	0.08	0.04
7	14		-0.02	-0.04	-0.09	-0.11	-0.10	0.24	0.05	0.06	-0.09
8	14		0.00	-0.03	-0.01	0.20	-0.24	0.00	0.00	-0.17	-0.04
9	14		0.03	0.00	0.00	0.05	0.27	-0.38	0.09	-0.03	0.10
10	14		0.01	0.02	-0.01	-0.38	-0.17	-0.08	-0.02	0.01	-0.01
11	14		0.10	-0.05	-0.05	0.01	0.00	0.04	0.00	0.04	-0.01
12	14		-0.16	0.01	-0.11	0.03	-0.01	-0.02	-0.03	-0.03	0.02
13	14		0.51	-0.15	0.17	0.06	-0.02	-0.01	-0.08	-0.07	0.00
14	14		-0.16	0.03	-0.12	0.02	-0.03	0.01	0.04	-0.08	0.03
15	14		-0.04	-0.06	0.20	-0.04	0.01	0.00	-0.06	-0.14	0.39
16	14		0.03	0.11	0.08	-0.03	0.04	0.01	-0.12	-0.30	-0.28
17	14		0.05	0.30	-0.31	0.01	0.02	-0.04	-0.23	0.41	-0.09
18	14		-0.12	-0.34	-0.11	-0.02	-0.03	-0.01	0.49	0.23	-0.06
19	14		-0.26	0.16	0.21	-0.02	0.01	0.01	0.01	-0.04	-0.01
20	17		0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
21	14		0.03	0.02	0.08	0.00	0.01	0.06	-0.02	-0.01	0.00
			31			32			33		
			A			A			A		
Frequencies	--		281.4949			291.8010			292.3930		
Red. masses	--		27.9975			27.9888			27.9809		
Frc consts	--		1.3071			1.4041			1.4094		
IR Inten	--		2.0968			6.1337			3.2237		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17		-0.02	-0.01	0.00	0.03	0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00
2	14		-0.06	0.01	-0.01	-0.04	0.05	0.01	0.10	-0.18	0.10
3	14		-0.03	0.00	0.09	0.09	0.06	-0.02	-0.37	-0.15	0.09
4	14		0.08	-0.17	0.03	-0.01	0.08	-0.03	0.12	-0.35	0.20
5	14		0.02	0.03	0.01	-0.08	-0.01	0.05	0.43	-0.01	-0.07
6	14		0.32	-0.25	-0.14	0.05	-0.03	0.01	-0.21	0.07	-0.01
7	14		-0.18	-0.21	0.27	-0.06	-0.03	0.01	0.11	0.19	-0.05
8	14		0.01	0.53	0.11	0.08	-0.03	0.03	-0.27	0.11	-0.20
9	14		-0.24	0.13	-0.37	-0.03	-0.08	-0.02	0.12	0.35	-0.05
10	14		0.06	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.03	-0.02	0.01
11	14		0.01	0.02	0.03	0.05	0.18	-0.07	0.00	0.03	-0.03
12	14		0.01	-0.02	-0.01	-0.02	0.21	0.37	-0.02	0.05	0.08
13	14		-0.01	-0.04	-0.01	0.13	0.36	-0.13	0.02	0.09	-0.03
14	14		0.04	-0.04	0.01	0.05	-0.10	-0.39	0.00	-0.02	-0.09
15	14		-0.04	-0.02	0.13	-0.10	0.01	0.18	-0.01	-0.01	0.03
16	14		-0.05	-0.08	-0.07	0.09	-0.13	-0.16	0.03	-0.03	-0.03
17	14		-0.07	0.14	-0.05	-0.25	-0.21	0.23	-0.05	-0.05	0.06
18	14		0.14	0.07	-0.03	0.03	-0.37	-0.05	0.01	-0.08	-0.01
19	14		-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.03	-0.01	0.00	0.01	-0.01
20	17		0.02	-0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01
21	14		0.01	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01

34				35				36			
A				A				A			
Frequencies	--	301.3387			306.8395			308.8514			
Red. masses	--	28.6424			27.9803			27.9789			
Frc consts	--	1.5324			1.5521			1.5725			
IR Inten	--	9.0657			2.0972			1.5712			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	17	-0.14	-0.15	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	
2	14	0.19	-0.03	-0.19	0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.06	0.02	
3	14	0.03	-0.28	-0.09	0.01	-0.09	0.00	-0.05	0.34	-0.03	
4	14	-0.11	-0.08	-0.10	0.01	-0.03	0.01	-0.05	0.10	-0.04	
5	14	-0.08	0.09	-0.27	0.02	-0.03	0.04	-0.09	0.15	-0.20	
6	14	0.05	0.18	0.04	0.08	0.11	0.02	-0.37	-0.45	-0.06	
7	14	0.17	-0.03	0.15	-0.12	0.00	-0.07	0.53	0.02	0.30	
8	14	-0.11	0.07	0.14	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.04	0.00	
9	14	-0.08	0.02	0.17	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.02	
10	14	0.03	-0.01	-0.05	-0.01	0.03	-0.01	0.03	-0.12	0.03	
11	14	0.11	0.06	0.25	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	
12	14	0.12	-0.19	0.14	0.04	-0.32	0.06	0.01	-0.07	0.02	
13	14	0.20	-0.04	-0.05	-0.05	-0.15	0.05	-0.01	-0.03	0.00	
14	14	0.27	0.12	-0.04	-0.20	-0.19	0.10	-0.05	-0.07	0.03	
15	14	-0.13	0.18	0.04	-0.28	0.50	0.19	-0.06	0.11	0.05	
16	14	-0.23	-0.06	0.08	0.45	0.06	-0.34	0.09	0.01	-0.08	
17	14	-0.11	0.02	-0.13	0.08	-0.06	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	
18	14	-0.09	-0.08	-0.15	-0.09	0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00	
19	14	0.02	-0.01	0.02	0.05	0.13	-0.06	0.02	0.04	-0.01	
20	17	-0.08	0.20	-0.04	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00	
21	14	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	
37				38				39			
A				A				A			
Frequencies	--	328.1544			335.3118			336.6439			
Red. masses	--	28.0080			27.9828			28.0631			
Frc consts	--	1.7770			1.8537			1.8738			
IR Inten	--	24.1995			0.3794			7.3181			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	17	0.03	0.02	-0.03	-0.01	-0.01	0.01	-0.06	-0.05	0.01	
2	14	0.02	0.07	0.14	0.01	0.00	-0.02	0.06	-0.01	-0.07	
3	14	0.23	-0.15	-0.09	-0.02	-0.01	0.01	-0.03	-0.07	0.01	
4	14	-0.13	-0.07	-0.09	0.01	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	
5	14	0.17	0.11	-0.26	-0.02	0.00	0.00	-0.17	0.03	-0.01	
6	14	-0.13	0.08	-0.04	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.07	0.12	
7	14	-0.09	-0.16	0.17	0.02	0.01	-0.01	0.14	0.11	-0.24	
8	14	-0.05	0.17	0.18	0.00	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.07	
9	14	0.03	0.02	0.34	-0.01	0.00	-0.03	-0.11	0.01	-0.28	
10	14	-0.03	-0.07	-0.38	0.01	0.01	0.04	0.11	-0.17	0.34	
11	14	0.03	-0.01	0.01	0.03	-0.02	0.02	0.09	-0.01	0.09	
12	14	-0.07	0.09	-0.17	0.02	-0.05	-0.15	-0.01	-0.09	-0.17	
13	14	-0.10	0.06	0.05	-0.03	0.01	0.02	-0.06	0.05	0.04	
14	14	-0.13	-0.12	-0.12	0.01	0.03	0.04	0.03	-0.04	-0.22	
15	14	0.02	-0.16	0.06	0.15	-0.20	0.39	-0.09	-0.04	0.13	
16	14	0.12	0.12	-0.02	-0.32	-0.16	-0.19	0.08	0.21	0.16	
17	14	0.12	-0.09	0.11	0.28	-0.20	0.12	0.12	-0.18	0.10	
18	14	0.17	0.04	0.07	-0.26	0.00	-0.03	0.31	0.09	0.03	
19	14	-0.20	0.04	-0.10	0.13	0.58	-0.20	-0.43	0.01	-0.12	
20	17	0.01	-0.04	-0.02	-0.01	0.02	-0.01	-0.03	0.07	-0.02	
21	14	0.00	0.04	0.21	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01	0.02	

			40			41			42		
			A			A			A		
Frequencies	--		338.8649			348.2983			356.1180		
Red. masses	--		28.0010			28.0072			28.0294		
Frc consts	--		1.8944			2.0018			2.0944		
IR Inten	--		1.3431			25.2488			17.9031		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17		0.03	0.02	-0.01	0.03	0.03	-0.02	-0.04	-0.04	0.01
2	14		-0.02	0.04	0.06	0.19	0.11	0.13	-0.03	-0.03	-0.04
3	14		0.14	0.03	-0.04	0.17	-0.23	-0.02	-0.06	-0.01	0.00
4	14		0.00	-0.01	-0.01	-0.22	-0.11	-0.10	0.06	0.02	0.02
5	14		-0.01	0.00	0.00	0.02	0.20	-0.27	-0.05	-0.02	0.02
6	14		-0.30	0.27	0.21	0.07	-0.24	-0.04	0.03	0.05	0.00
7	14		0.03	-0.04	-0.30	-0.02	0.11	-0.20	0.04	0.00	0.07
8	14		0.02	0.34	0.24	-0.02	-0.25	0.17	-0.01	0.02	-0.05
9	14		-0.04	-0.06	-0.14	-0.22	0.23	-0.09	0.03	-0.04	0.00
10	14		0.15	-0.55	0.02	0.05	0.16	0.36	-0.01	0.01	-0.03
11	14		-0.04	0.00	-0.05	-0.01	0.00	-0.02	0.27	-0.12	-0.09
12	14		-0.01	0.07	0.05	-0.04	0.13	-0.02	0.03	0.04	-0.31
13	14		0.01	-0.02	-0.01	-0.04	0.02	0.04	-0.27	0.19	0.22
14	14		-0.04	0.00	0.10	-0.12	-0.07	0.04	-0.03	-0.22	-0.26
15	14		0.04	0.01	-0.07	0.04	-0.05	-0.10	-0.13	0.28	-0.04
16	14		-0.03	-0.09	-0.09	0.04	-0.06	-0.12	-0.25	-0.11	0.09
17	14		-0.04	0.10	-0.04	-0.01	0.13	-0.01	0.18	0.28	0.09
18	14		-0.15	-0.05	0.01	-0.09	-0.07	0.06	0.03	-0.27	0.22
19	14		0.22	-0.01	0.06	0.19	-0.04	0.04	0.22	-0.08	0.09
20	17		0.03	-0.04	0.00	0.02	-0.04	-0.01	-0.03	0.06	-0.02
21	14		-0.01	0.01	0.01	-0.03	0.04	0.19	0.04	0.00	0.01
			43			44			45		
			A			A			A		
Frequencies	--		366.9735			378.9006			382.4864		
Red. masses	--		27.9896			27.9810			28.0175		
Frc consts	--		2.2208			2.3668			2.4150		
IR Inten	--		18.9044			4.7137			20.8128		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17		-0.02	-0.01	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.03	0.02
2	14		-0.04	-0.02	-0.04	0.03	0.04	0.03	0.45	0.22	0.15
3	14		0.24	0.34	-0.06	0.00	-0.06	0.00	0.02	-0.09	0.05
4	14		-0.37	-0.14	-0.04	0.04	0.01	0.01	0.29	0.14	0.04
5	14		0.40	-0.13	0.17	-0.04	0.03	-0.02	-0.03	0.09	-0.06
6	14		-0.07	-0.10	-0.10	-0.02	-0.02	0.01	-0.20	-0.38	0.05
7	14		-0.10	-0.06	-0.16	-0.01	0.01	0.00	-0.35	0.12	-0.15
8	14		0.07	-0.08	0.24	-0.03	0.00	-0.01	-0.09	0.14	-0.06
9	14		-0.05	0.25	0.08	0.00	-0.02	0.00	-0.03	-0.17	0.13
10	14		-0.09	-0.02	0.05	0.02	0.01	0.00	-0.05	-0.03	-0.06
11	14		0.05	-0.05	-0.12	0.39	-0.23	-0.24	-0.06	-0.02	-0.12
12	14		0.06	-0.14	0.00	-0.02	0.35	0.02	0.05	-0.17	0.01
13	14		0.00	0.00	0.00	0.20	-0.17	-0.30	-0.01	0.02	0.03
14	14		0.14	0.06	-0.05	-0.22	-0.19	0.21	0.15	0.09	-0.05
15	14		-0.07	0.17	0.08	-0.01	0.27	0.13	-0.06	0.11	0.03
16	14		-0.14	-0.02	0.15	-0.14	-0.10	0.25	-0.10	-0.01	0.07
17	14		0.03	-0.05	0.01	-0.14	-0.15	0.08	0.04	-0.02	0.01
18	14		0.06	0.01	-0.01	0.00	0.22	-0.05	0.05	-0.01	-0.01
19	14		-0.07	0.03	0.02	-0.05	-0.02	-0.12	-0.05	0.03	0.06
20	17		0.00	0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.03	-0.04	0.02
21	14		-0.02	-0.04	-0.28	0.00	0.00	0.03	-0.11	-0.04	-0.17

		46			47			48		
		A			A			A		
Frequencies	--	388.1607			390.6686			394.7527		
Red. masses	--	27.9875			27.9801			28.0105		
Frc consts	--	2.4845			2.5160			2.5717		
IR Inten	--	1.4904			0.2908			2.2684		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.04	0.03	0.00
2	14	0.07	-0.19	0.07	0.00	0.00	0.00	0.08	0.07	0.05
3	14	-0.26	-0.05	0.36	0.00	0.00	0.01	-0.09	-0.09	0.16
4	14	-0.16	0.32	-0.18	-0.02	-0.02	-0.01	-0.26	-0.20	-0.14
5	14	0.26	-0.14	-0.21	-0.01	0.00	0.01	-0.20	0.14	0.10
6	14	-0.01	0.08	-0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.20	0.06	0.14
7	14	-0.06	0.06	0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.15	-0.04	0.20
8	14	0.49	0.06	-0.18	0.02	-0.01	0.00	0.23	-0.13	-0.08
9	14	-0.38	-0.04	0.13	0.01	0.01	-0.01	0.23	0.14	-0.22
10	14	0.05	-0.11	0.02	0.02	0.00	-0.01	0.35	0.05	-0.16
11	14	0.02	-0.01	0.00	-0.07	-0.17	0.06	-0.05	0.00	-0.05
12	14	0.00	0.01	0.00	-0.18	-0.14	-0.29	-0.04	-0.12	-0.08
13	14	0.00	0.00	-0.01	0.10	0.37	-0.09	0.16	-0.08	-0.08
14	14	-0.01	-0.01	0.00	0.12	-0.05	0.42	0.03	0.06	-0.13
15	14	0.00	0.00	0.00	0.03	0.05	0.03	-0.05	0.07	-0.13
16	14	0.00	0.00	0.01	0.05	0.07	-0.02	-0.10	-0.08	-0.09
17	14	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.15	0.40	0.01	-0.05	0.17
18	14	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.18	-0.48	0.07	0.11	0.11
19	14	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.11	-0.02	-0.02	0.08	0.25
20	17	-0.02	0.03	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.04	0.01
21	14	0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.07	0.00	-0.02
		49			50			51		
		A			A			A		
Frequencies	--	395.1372			406.8123			426.4523		
Red. masses	--	27.9856			29.4230			28.0911		
Frc consts	--	2.5744			2.8690			3.0100		
IR Inten	--	9.8389			205.4645			24.4180		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.03	-0.02	0.01	0.30	0.23	-0.09	0.09	0.07	-0.02
2	14	0.11	0.06	0.01	-0.28	-0.01	0.17	0.02	0.00	-0.01
3	14	-0.04	-0.02	0.10	0.01	-0.15	-0.06	-0.07	-0.08	0.09
4	14	-0.14	-0.11	-0.08	0.04	0.05	0.03	-0.13	-0.09	-0.07
5	14	-0.10	0.08	0.09	-0.02	0.02	-0.15	-0.13	0.07	0.03
6	14	-0.15	-0.01	0.09	0.11	0.18	-0.02	0.14	-0.08	-0.03
7	14	-0.14	-0.01	0.09	0.19	-0.04	0.07	0.09	0.08	-0.10
8	14	0.13	-0.06	-0.04	-0.05	-0.06	0.00	0.20	0.16	0.01
9	14	0.14	0.08	-0.12	-0.12	-0.01	-0.02	0.27	0.03	0.06
10	14	0.19	0.03	-0.10	0.09	0.03	0.04	-0.37	-0.11	0.02
11	14	0.06	-0.01	-0.04	-0.09	-0.05	-0.29	-0.05	0.00	-0.01
12	14	0.13	0.12	0.19	0.10	-0.15	0.09	-0.04	-0.14	-0.10
13	14	-0.30	0.11	0.18	-0.07	0.04	0.06	0.17	-0.09	-0.08
14	14	0.04	-0.04	0.15	0.18	0.08	0.02	0.05	0.08	-0.16
15	14	0.05	-0.05	0.24	-0.05	0.15	0.08	-0.02	-0.05	0.18
16	14	0.10	0.11	0.21	-0.12	-0.02	0.15	0.05	0.13	0.12
17	14	0.02	0.06	-0.36	0.05	-0.05	-0.09	-0.13	0.19	0.19
18	14	-0.09	-0.19	-0.16	0.06	-0.04	-0.07	-0.17	0.06	0.23
19	14	0.00	-0.11	-0.39	-0.07	0.03	0.01	0.16	-0.17	-0.35
20	17	0.00	0.01	0.00	0.13	-0.21	0.03	0.02	-0.03	0.00
21	14	0.02	0.00	-0.05	-0.48	-0.03	0.07	-0.16	-0.06	0.03

			52			53			54		
			A			A			A		
Frequencies	--		426.9338			439.9475			462.8468		
Red. masses	--		27.9791			30.0389			27.9864		
Frc consts	--		3.0047			3.4256			3.5324		
IR Inten	--		7.4969			181.7849			0.1912		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17		0.01	0.01	-0.01	-0.26	-0.22	0.08	0.02	0.02	0.01
2	14		0.02	0.01	-0.01	-0.11	0.12	0.08	-0.15	0.46	-0.20
3	14		-0.08	-0.09	0.10	-0.02	-0.14	0.00	-0.03	-0.30	-0.01
4	14		-0.15	-0.10	-0.09	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.06	-0.03
5	14		-0.15	0.08	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.17	-0.13	0.21
6	14		0.16	-0.09	-0.04	0.03	0.01	-0.01	-0.13	-0.10	-0.02
7	14		0.11	0.09	-0.13	0.09	0.02	0.00	0.15	0.04	0.06
8	14		0.23	0.18	0.01	0.05	0.01	-0.03	0.05	0.02	-0.03
9	14		0.30	0.04	0.07	0.00	0.00	0.02	-0.07	0.01	0.01
10	14		-0.43	-0.13	0.02	-0.05	-0.02	0.01	0.01	-0.01	0.01
11	14		0.04	-0.03	-0.03	-0.02	0.06	-0.12	-0.15	-0.44	0.20
12	14		0.05	0.12	0.10	0.02	-0.10	0.02	-0.07	0.29	-0.05
13	14		-0.16	0.08	0.08	0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.05	0.02
14	14		-0.02	-0.06	0.15	-0.01	0.00	0.00	0.22	0.14	-0.09
15	14		0.01	0.07	-0.15	0.00	0.02	0.02	-0.08	0.08	0.07
16	14		-0.06	-0.12	-0.09	-0.03	0.01	0.04	0.12	-0.03	-0.11
17	14		0.12	-0.18	-0.18	0.00	0.01	0.05	0.00	-0.03	-0.05
18	14		0.17	-0.05	-0.21	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.06
19	14		-0.15	0.15	0.31	0.00	-0.02	-0.02	0.01	0.02	0.00
20	17		0.00	0.01	-0.01	0.20	-0.36	0.06	0.00	-0.01	-0.02
21	14		-0.02	-0.01	0.08	0.13	0.74	-0.18	-0.02	-0.02	-0.03
			55			56			57		
			A			A			A		
Frequencies	--		466.2268			495.3255			533.9518		
Red. masses	--		28.0043			28.4798			27.9898		
Frc consts	--		3.5865			4.1169			4.7017		
IR Inten	--		11.6090			201.4578			149.6436		
Atom	AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17		0.02	0.03	-0.02	0.11	0.07	-0.03	0.02	0.02	0.02
2	14		-0.13	0.43	-0.20	0.25	-0.14	-0.45	-0.19	0.09	0.45
3	14		-0.03	-0.27	-0.01	-0.01	0.13	0.02	0.02	-0.07	-0.01
4	14		-0.02	0.05	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00
5	14		0.16	-0.12	0.20	0.04	-0.06	0.10	-0.05	0.06	-0.09
6	14		-0.13	-0.10	-0.02	-0.07	-0.02	0.01	0.06	0.02	-0.01
7	14		0.13	0.04	0.05	-0.08	-0.02	0.00	0.03	0.01	-0.01
8	14		0.04	0.03	-0.02	-0.02	0.00	0.02	0.02	-0.01	-0.01
9	14		-0.06	0.01	0.01	-0.03	0.00	0.03	0.03	0.01	-0.01
10	14		0.01	-0.01	0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01
11	14		0.18	0.48	-0.11	0.26	0.06	0.37	0.28	0.07	0.45
12	14		0.07	-0.28	0.04	-0.02	0.08	-0.04	-0.03	0.07	-0.05
13	14		0.02	0.05	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01
14	14		-0.25	-0.16	0.09	-0.10	-0.08	0.01	-0.09	-0.06	0.00
15	14		0.09	-0.11	-0.08	0.02	-0.04	-0.06	0.02	-0.05	-0.05
16	14		-0.11	0.04	0.10	0.02	-0.01	-0.06	0.03	-0.01	-0.05
17	14		0.00	0.04	0.05	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.01	-0.02
18	14		0.01	0.01	-0.05	0.00	-0.01	-0.03	-0.02	-0.01	-0.02
19	14		0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
20	17		-0.01	0.05	-0.01	0.13	-0.19	0.03	0.01	-0.01	0.02
21	14		-0.01	-0.18	0.04	-0.54	0.25	0.07	-0.16	-0.13	-0.61

M5

Harmonic frequencies (cm⁻¹), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A⁴/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	23.7392			32.3702			40.5210		
Red. masses	--	28.0710			28.0179			28.1302		
Frc consts	--	0.0093			0.0173			0.0272		
IR Inten	--	0.7495			0.3608			0.7381		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.08	0.06	-0.06	-0.01	-0.02	0.07	0.01	-0.13	-0.08
2	14	0.02	0.06	-0.06	-0.03	-0.10	-0.01	0.04	-0.08	0.02
3	14	0.16	0.11	0.07	-0.15	-0.12	-0.27	0.22	0.01	0.02
4	14	-0.01	-0.09	0.12	0.01	0.18	-0.30	0.14	-0.04	0.04
5	14	-0.09	-0.08	-0.03	0.05	0.11	-0.01	-0.02	-0.12	0.06
6	14	-0.12	0.04	-0.18	0.07	-0.01	0.19	-0.08	0.01	0.06
7	14	0.01	0.23	-0.12	-0.04	-0.23	0.03	0.05	0.12	0.00
8	14	0.00	0.06	-0.05	-0.01	0.05	-0.11	0.13	0.13	-0.01
9	14	-0.14	-0.12	-0.10	0.09	0.29	0.04	-0.03	0.03	0.03
10	14	-0.12	0.09	-0.22	0.08	0.03	0.17	-0.04	0.17	0.00
11	14	0.08	0.00	-0.04	-0.03	-0.01	0.03	-0.10	0.02	0.02
12	14	0.00	-0.03	0.08	-0.13	-0.03	0.16	-0.01	0.03	-0.07
13	14	0.12	-0.21	0.36	-0.01	-0.17	0.09	-0.02	0.03	-0.02
14	14	0.29	-0.21	0.03	0.13	-0.15	-0.10	-0.07	0.01	0.02
15	14	0.13	0.08	-0.13	0.13	0.16	-0.10	-0.03	-0.02	0.06
16	14	-0.10	0.06	-0.07	-0.07	0.19	0.10	0.00	-0.08	-0.01
17	14	-0.25	-0.09	0.20	-0.11	0.04	0.14	0.00	-0.04	-0.05
18	14	-0.03	-0.07	0.15	0.09	0.01	-0.06	-0.05	-0.02	0.01
19	14	-0.22	0.08	-0.01	0.02	0.25	0.00	-0.02	-0.09	0.01
20	14	0.07	-0.06	0.07	0.04	-0.05	0.13	-0.12	0.30	0.23
21	14	0.09	0.03	0.02	0.13	0.00	-0.01	0.06	0.10	-0.01
22	14	0.06	0.04	0.00	0.01	-0.03	-0.05	-0.08	-0.09	-0.04
23	14	0.03	-0.04	0.05	-0.07	-0.08	0.06	-0.30	-0.06	0.22
24	14	-0.05	-0.08	0.04	-0.10	-0.09	0.07	-0.04	0.08	0.07
25	14	0.00	-0.02	0.02	0.06	-0.02	0.03	0.28	0.22	0.00
26	14	0.01	0.07	-0.05	0.04	-0.01	-0.15	0.13	-0.10	-0.19
27	14	-0.04	0.01	-0.01	-0.13	-0.07	-0.09	-0.20	-0.23	-0.16
28	14	-0.09	-0.01	-0.03	-0.07	-0.06	-0.07	0.18	-0.05	-0.20
29	14	0.08	0.06	-0.04	0.00	-0.05	-0.01	-0.05	-0.08	-0.02
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	44.6087			51.9397			62.1173		
Red. masses	--	28.0885			28.2654			28.4197		
Frc consts	--	0.0329			0.0449			0.0646		
IR Inten	--	0.4679			1.1826			1.5091		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.05	-0.11	0.03	0.00	-0.12	-0.17	0.01	0.04	-0.25
2	14	-0.03	-0.07	-0.04	0.05	-0.05	-0.05	0.16	0.06	-0.03
3	14	-0.10	-0.08	-0.17	0.14	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.09
4	14	-0.11	0.05	-0.15	0.04	-0.08	0.04	-0.18	0.08	0.18
5	14	-0.05	0.03	-0.02	-0.01	-0.07	-0.03	0.14	0.26	0.06
6	14	0.00	-0.04	0.02	-0.04	-0.02	-0.07	0.32	0.00	0.04
7	14	-0.03	-0.13	-0.07	0.04	0.06	-0.06	0.16	-0.10	-0.03
8	14	-0.10	-0.03	-0.15	0.04	0.01	-0.06	-0.12	-0.20	-0.04
9	14	-0.07	0.08	-0.04	-0.03	-0.08	-0.05	0.06	-0.11	-0.01
10	14	-0.03	-0.05	-0.04	-0.03	0.03	-0.10	0.16	-0.28	-0.10
11	14	0.03	-0.09	-0.03	-0.19	0.06	0.09	-0.11	0.09	0.00
12	14	0.34	0.10	0.04	-0.20	0.06	0.11	0.01	0.11	-0.11
13	14	0.21	0.24	0.33	-0.12	-0.04	-0.04	0.00	0.10	0.03
14	14	-0.03	-0.03	-0.01	-0.08	-0.03	-0.09	-0.06	0.04	0.01
15	14	-0.11	-0.06	-0.08	0.03	0.16	0.03	-0.03	0.05	0.04
16	14	0.12	-0.18	-0.06	-0.09	0.18	0.17	-0.03	-0.05	-0.07
17	14	0.02	0.15	0.16	-0.07	0.09	0.05	-0.06	0.00	-0.06
18	14	-0.26	0.26	0.12	0.03	0.08	-0.10	-0.11	0.04	0.04
19	14	-0.24	0.03	0.00	0.06	0.21	0.04	-0.10	-0.07	-0.01
20	14	-0.06	0.11	-0.04	-0.01	-0.01	-0.08	0.07	-0.07	0.20
21	14	-0.07	-0.08	-0.02	0.00	-0.30	-0.05	0.18	-0.04	0.00
22	14	0.02	-0.06	0.01	-0.06	-0.13	-0.12	0.01	0.03	-0.10
23	14	-0.01	0.05	0.01	-0.05	0.15	-0.17	-0.11	0.01	0.05
24	14	0.11	0.11	-0.02	0.10	0.19	0.11	-0.17	-0.03	0.20
25	14	0.09	0.03	0.03	0.12	-0.14	0.19	0.07	-0.05	0.16
26	14	0.04	-0.08	0.09	0.11	-0.24	0.11	0.03	0.02	-0.11
27	14	0.07	-0.01	0.04	0.08	0.09	0.08	-0.17	0.04	-0.07
28	14	0.17	0.01	0.07	0.18	0.02	0.31	-0.15	0.00	0.05

29	14	0.01	-0.10	-0.02	-0.03	-0.08	-0.08	0.03	0.06	-0.11
		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies	--	66.5065			66.6010			69.9955		
Red. masses	--	28.7382			28.2407			28.6713		
Frc consts	--	0.0749			0.0738			0.0828		
IR Inten	--	3.8017			0.3504			1.3510		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.05	0.11	0.31	-0.10	-0.05	-0.16	0.27	-0.15	-0.05
2	14	-0.05	-0.20	0.06	0.13	0.01	0.11	0.04	0.18	0.02
3	14	0.14	-0.10	0.03	0.18	0.03	0.12	-0.13	0.12	-0.05
4	14	-0.12	0.05	0.15	-0.12	0.11	0.25	-0.24	0.14	0.01
5	14	-0.09	0.07	0.16	0.02	0.17	0.23	-0.07	0.15	0.06
6	14	-0.05	-0.02	0.26	0.13	0.07	0.19	0.07	0.09	-0.09
7	14	-0.02	0.03	0.03	0.15	0.05	-0.02	0.00	0.04	-0.09
8	14	-0.09	0.08	-0.09	-0.08	0.05	-0.06	-0.21	-0.01	-0.13
9	14	-0.16	0.06	0.10	-0.11	0.04	0.09	-0.17	0.09	-0.05
10	14	-0.13	0.08	0.02	-0.01	0.03	-0.07	-0.05	-0.06	-0.17
11	14	0.06	0.12	0.01	-0.01	-0.27	0.01	-0.06	0.10	0.19
12	14	0.05	0.07	-0.09	0.09	-0.18	0.13	-0.11	0.04	0.08
13	14	0.08	0.02	0.04	0.07	-0.13	0.00	-0.08	-0.01	0.00
14	14	0.11	0.06	0.13	-0.01	-0.24	-0.21	-0.03	0.07	0.17
15	14	0.07	0.01	0.09	0.01	-0.10	-0.17	0.01	0.05	0.24
16	14	0.06	-0.03	-0.06	0.11	-0.08	0.14	-0.02	0.04	0.18
17	14	0.02	-0.09	-0.04	0.09	0.05	0.09	0.04	-0.04	0.05
18	14	0.06	-0.07	0.13	0.05	0.05	-0.20	0.09	-0.06	0.12
19	14	0.03	-0.13	0.04	0.13	0.16	-0.05	0.11	-0.04	0.17
20	14	0.02	-0.06	-0.16	-0.16	0.08	-0.11	0.03	-0.02	-0.10
21	14	0.10	-0.19	-0.26	-0.17	0.01	-0.06	-0.02	0.06	0.01
22	14	0.04	0.01	-0.32	-0.01	0.02	-0.01	-0.05	-0.12	0.06
23	14	-0.05	0.08	-0.24	-0.03	0.01	0.00	0.04	-0.13	-0.04
24	14	-0.03	0.07	-0.05	0.00	0.03	-0.13	0.11	-0.10	-0.16
25	14	0.05	-0.12	0.00	-0.11	0.05	-0.09	0.02	0.00	-0.19
26	14	0.04	-0.08	-0.16	-0.12	0.03	0.04	0.06	-0.11	-0.09
27	14	-0.10	0.12	-0.20	-0.04	0.01	-0.03	0.11	-0.16	-0.04
28	14	-0.03	0.04	0.03	-0.03	0.03	-0.06	0.13	-0.11	-0.18
29	14	0.04	-0.01	0.01	-0.03	-0.05	0.05	0.05	0.01	0.07
		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies	--	73.5169			77.8647			90.1828		
Red. masses	--	28.4804			28.0824			28.2006		
Frc consts	--	0.0907			0.1003			0.1351		
IR Inten	--	1.0696			12.2466			8.8088		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.23	-0.07	0.13	0.09	0.04	0.07	-0.07	-0.16	0.01
2	14	-0.03	0.12	0.01	0.15	-0.20	0.04	-0.07	-0.07	0.06
3	14	-0.12	0.07	0.10	0.23	-0.15	-0.13	0.08	0.00	0.10
4	14	-0.03	0.05	0.06	-0.04	0.00	0.00	-0.06	0.08	0.16
5	14	0.07	0.12	-0.03	0.00	-0.03	0.17	-0.02	0.10	0.09
6	14	0.12	0.03	0.01	0.07	-0.09	0.13	0.03	0.01	0.24
7	14	-0.02	0.00	0.06	0.16	-0.10	-0.11	-0.03	0.08	0.06
8	14	-0.02	-0.08	0.14	-0.01	0.01	-0.26	-0.05	0.07	0.03
9	14	0.11	-0.04	0.03	-0.13	0.05	0.00	-0.05	0.05	0.10
10	14	0.10	-0.10	0.07	-0.03	0.00	-0.14	-0.04	0.07	0.07
11	14	0.24	0.10	-0.19	0.18	0.04	-0.10	-0.04	0.06	-0.14
12	14	-0.01	0.00	-0.08	-0.17	-0.07	0.03	-0.03	0.07	-0.15
13	14	0.06	-0.09	-0.01	-0.22	0.02	-0.14	0.00	0.03	-0.04
14	14	0.26	0.06	0.01	-0.05	0.22	0.05	0.02	0.01	-0.13
15	14	0.10	0.05	-0.14	-0.13	-0.01	-0.04	0.02	0.09	-0.15
16	14	-0.04	0.16	-0.22	-0.22	0.19	-0.14	-0.08	0.04	-0.21
17	14	-0.09	-0.05	-0.05	-0.09	0.05	-0.05	-0.13	0.01	-0.11
18	14	0.10	-0.09	0.02	-0.05	-0.05	0.02	-0.11	0.04	-0.08
19	14	-0.04	0.03	-0.11	-0.14	0.01	-0.05	-0.15	0.02	-0.15
20	14	-0.29	0.16	-0.06	-0.08	0.07	0.03	0.28	-0.17	0.00
21	14	-0.25	-0.15	-0.02	-0.08	-0.04	0.01	0.10	0.18	0.21
22	14	-0.19	-0.15	0.01	0.21	0.07	0.10	-0.17	-0.15	0.18
23	14	-0.22	0.01	0.01	0.12	-0.06	0.22	0.12	-0.02	-0.14
24	14	0.00	0.12	-0.04	0.08	-0.05	-0.05	0.09	-0.07	0.04
25	14	-0.01	0.03	0.03	0.01	0.03	0.03	-0.01	-0.03	-0.10
26	14	-0.09	-0.20	0.09	-0.08	0.10	0.20	0.18	-0.09	-0.11
27	14	-0.08	-0.10	0.03	0.03	-0.03	0.07	0.25	-0.06	0.15
28	14	0.11	-0.03	0.07	0.02	0.00	0.01	0.11	-0.06	-0.01
29	14	-0.01	0.05	0.04	0.14	-0.02	0.00	-0.15	-0.10	0.03
		13			14			15		
		A			A			A		
Frequencies	--	94.2146			106.9025			111.7451		
Red. masses	--	28.0102			28.1489			30.7715		
Frc consts	--	0.1465			0.1895			0.2264		

IR Inten		14.0789			28.7857			11.5752		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.05	0.05	-0.02	0.15	-0.04	0.04	0.17	0.04	0.61
2	14	0.20	-0.07	0.12	0.26	0.23	0.26	-0.02	-0.07	-0.14
3	14	0.08	-0.12	-0.14	-0.14	0.07	-0.06	0.21	0.00	-0.03
4	14	0.09	-0.08	-0.13	0.07	-0.08	-0.13	0.01	0.03	0.04
5	14	0.05	-0.17	0.16	0.01	-0.23	0.27	0.12	0.16	-0.19
6	14	0.03	-0.09	0.01	-0.07	0.03	-0.15	0.15	-0.01	-0.07
7	14	0.19	-0.17	-0.09	0.20	-0.16	-0.03	0.04	0.11	-0.12
8	14	0.07	-0.03	-0.13	0.04	-0.01	0.03	0.04	-0.02	-0.16
9	14	-0.06	0.05	0.00	-0.13	0.09	0.06	0.12	-0.12	-0.17
10	14	0.02	-0.02	-0.08	-0.03	0.01	-0.04	0.10	-0.04	-0.18
11	14	-0.24	0.22	0.11	0.20	-0.14	-0.07	-0.12	-0.10	0.05
12	14	0.01	0.23	-0.23	0.02	-0.17	0.10	-0.04	-0.07	0.06
13	14	0.16	-0.02	0.11	-0.09	0.01	-0.05	-0.07	-0.04	-0.02
14	14	0.13	-0.12	0.00	-0.05	0.07	0.00	-0.15	-0.11	-0.07
15	14	0.17	0.18	0.11	-0.09	-0.13	-0.08	-0.08	-0.07	0.00
16	14	0.10	-0.06	0.02	-0.05	0.01	-0.05	-0.01	-0.11	0.11
17	14	-0.08	-0.16	-0.08	0.02	0.07	0.04	0.00	0.01	0.03
18	14	0.07	-0.03	0.05	-0.06	-0.01	-0.01	-0.05	0.03	-0.08
19	14	0.07	-0.06	0.02	-0.07	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.01
20	14	-0.09	0.02	-0.06	0.13	-0.07	0.02	0.03	0.00	0.05
21	14	-0.17	0.13	0.12	0.10	0.08	0.01	-0.01	0.14	0.10
22	14	-0.20	-0.01	0.12	-0.19	-0.06	-0.08	-0.18	-0.07	0.06
23	14	-0.05	0.05	-0.05	-0.11	0.13	-0.22	-0.08	0.08	-0.08
24	14	-0.05	0.05	-0.04	-0.11	0.10	0.13	-0.09	0.06	0.09
25	14	-0.20	0.05	-0.07	-0.02	0.00	0.03	-0.06	0.06	0.00
26	14	-0.12	0.03	0.07	0.07	-0.04	-0.20	0.00	-0.01	-0.08
27	14	0.04	0.02	0.12	-0.02	0.10	-0.01	0.02	0.02	0.07
28	14	-0.06	0.04	0.02	-0.06	0.07	0.05	-0.05	0.04	0.00
29	14	-0.10	0.08	0.00	-0.02	0.07	0.16	-0.03	0.02	-0.03

		16			17			18		
		A			A			A		
Frequencies	--	115.0125			122.8971			158.0193		
Red. masses	--	30.8247			29.7330			30.3679		
Frc consts	--	0.2402			0.2646			0.4468		
IR Inten	--	1.8244			1.3083			11.4747		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.46	-0.35	-0.28	0.42	-0.19	0.20	0.28	0.49	-0.14
2	14	-0.15	-0.26	-0.11	0.07	0.13	0.08	-0.03	-0.09	-0.07
3	14	0.11	-0.17	-0.02	-0.14	0.06	0.07	0.02	-0.11	0.03
4	14	-0.01	-0.03	0.04	0.01	-0.01	0.03	-0.04	0.00	0.06
5	14	-0.05	0.02	-0.10	-0.03	-0.06	0.11	-0.09	-0.06	0.01
6	14	-0.06	-0.11	0.18	-0.08	0.07	-0.02	-0.07	-0.05	0.10
7	14	-0.13	-0.01	0.06	0.03	-0.05	0.05	-0.06	-0.09	0.07
8	14	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.02	0.15	-0.03	0.05	0.03
9	14	0.04	-0.06	0.02	-0.03	0.03	0.09	-0.02	0.05	0.09
10	14	-0.04	0.01	0.10	-0.04	0.04	0.10	-0.04	0.05	0.13
11	14	0.07	-0.01	-0.02	-0.29	0.04	0.11	-0.07	-0.06	0.07
12	14	0.02	-0.03	0.07	-0.07	0.09	-0.18	0.01	-0.06	0.01
13	14	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.04	-0.04	-0.02	-0.01	-0.04
14	14	0.03	0.05	0.09	-0.10	-0.19	-0.21	-0.08	-0.10	-0.05
15	14	0.00	-0.04	0.03	0.01	0.12	-0.06	-0.04	-0.02	-0.06
16	14	0.03	0.02	0.02	-0.02	-0.18	-0.01	0.00	-0.15	0.03
17	14	0.07	0.01	0.04	-0.14	-0.06	-0.12	0.01	0.05	-0.01
18	14	0.07	-0.04	0.06	-0.10	0.04	-0.16	-0.02	0.02	-0.06
19	14	0.04	-0.01	0.04	-0.09	0.01	-0.13	-0.06	0.03	-0.06
20	14	0.03	0.02	-0.01	-0.02	0.03	-0.02	0.03	-0.05	-0.01
21	14	0.01	0.21	0.02	0.06	-0.10	-0.13	-0.05	-0.03	0.10
22	14	-0.06	0.03	0.00	0.26	0.16	-0.09	-0.16	-0.07	0.06
23	14	-0.02	0.18	-0.10	0.13	-0.02	0.11	-0.07	-0.08	-0.04
24	14	-0.14	0.12	0.05	0.05	-0.04	-0.06	0.09	-0.02	-0.02
25	14	-0.17	0.09	-0.01	0.05	-0.03	0.05	0.06	-0.03	-0.03
26	14	-0.07	0.14	-0.06	-0.02	0.14	0.11	0.04	-0.14	-0.04
27	14	-0.04	0.18	0.05	-0.03	0.07	-0.09	0.02	-0.10	0.06
28	14	-0.18	0.15	0.03	-0.02	0.02	0.00	0.09	-0.04	0.01
29	14	0.05	-0.03	-0.08	0.03	-0.03	0.00	0.25	0.49	-0.19

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies	--	171.6635			173.9188			176.5765		
Red. masses	--	28.0259			27.9831			27.9980		
Frc consts	--	0.4866			0.4987			0.5143		
IR Inten	--	13.4543			7.5439			0.3123		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.08	0.02	-0.02	-0.01	0.00	-0.03	0.05	0.03	-0.01
2	14	-0.09	-0.05	0.02	-0.14	-0.08	0.02	-0.04	-0.03	-0.01
3	14	-0.04	0.00	0.02	-0.03	0.03	0.03	-0.03	0.00	0.03
4	14	0.10	0.00	-0.09	0.18	0.02	-0.17	0.06	0.01	-0.04

5	14	-0.01	-0.04	0.02	-0.05	-0.08	0.05	-0.04	-0.03	0.02
6	14	0.12	-0.06	0.14	0.22	-0.10	0.15	0.06	-0.03	0.07
7	14	-0.05	0.13	-0.05	-0.11	0.29	-0.05	-0.03	0.07	-0.02
8	14	0.06	-0.06	0.13	0.08	-0.14	0.19	0.02	-0.03	0.09
9	14	-0.10	0.11	0.01	-0.18	0.24	0.03	-0.07	0.09	0.04
10	14	-0.01	-0.08	-0.17	0.04	-0.21	-0.28	0.00	-0.05	-0.07
11	14	0.05	-0.02	-0.10	-0.05	0.00	0.10	0.05	-0.02	-0.07
12	14	-0.04	0.01	-0.02	0.06	-0.01	-0.04	-0.05	0.01	-0.02
13	14	0.04	0.01	0.16	-0.05	-0.03	-0.16	0.06	0.02	0.18
14	14	-0.02	-0.05	-0.09	-0.02	0.07	0.12	-0.01	-0.06	-0.12
15	14	-0.07	-0.16	0.07	0.00	0.10	-0.11	-0.06	-0.13	0.10
16	14	-0.08	0.19	0.01	0.14	-0.25	0.05	-0.12	0.22	0.00
17	14	-0.07	-0.13	-0.05	-0.03	0.12	0.06	-0.03	-0.17	-0.08
18	14	-0.10	0.19	-0.09	0.14	-0.22	0.07	-0.13	0.23	-0.10
19	14	0.20	-0.07	0.08	-0.20	0.20	-0.08	0.25	-0.16	0.08
20	14	0.11	-0.22	0.03	0.00	0.01	0.00	-0.06	0.17	-0.01
21	14	0.00	0.04	0.02	-0.03	-0.11	-0.02	-0.03	-0.19	-0.02
22	14	0.04	0.16	-0.06	-0.01	0.00	0.01	-0.07	-0.09	0.04
23	14	-0.02	0.05	-0.06	0.02	0.07	-0.07	0.04	0.05	-0.07
24	14	-0.07	0.12	0.25	-0.08	0.00	0.07	-0.07	-0.12	-0.09
25	14	-0.13	0.00	-0.19	0.13	0.02	0.06	0.33	0.03	0.20
26	14	-0.06	0.01	0.31	-0.07	0.06	0.02	-0.08	0.08	-0.15
27	14	-0.15	-0.13	-0.23	0.11	-0.02	0.03	0.28	0.05	0.20
28	14	0.33	-0.07	-0.06	-0.06	-0.03	-0.11	-0.31	-0.01	-0.19
29	14	-0.07	0.11	0.01	0.00	0.02	0.07	0.02	0.03	-0.02
22										
A										
Frequencies	--	178.1659			181.5134			183.7363		
Red. masses	--	27.9819			27.9788			27.9813		
Frc consts	--	0.5233			0.5431			0.5566		
IR Inten	--	1.4232			0.0792			0.0892		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.01	0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02
2	14	-0.06	-0.06	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.05	0.03	-0.04
3	14	-0.10	-0.01	0.01	0.08	0.03	0.02	0.30	0.08	0.08
4	14	0.13	0.00	-0.11	-0.01	0.01	0.02	0.02	0.02	0.01
5	14	0.02	0.02	0.01	-0.04	-0.05	0.01	-0.18	-0.21	0.06
6	14	0.12	-0.03	0.15	0.00	0.00	-0.08	0.01	-0.03	-0.31
7	14	-0.01	0.13	-0.08	-0.04	0.02	0.04	-0.15	0.17	0.14
8	14	0.11	-0.08	0.22	-0.05	0.00	-0.09	-0.17	-0.11	-0.27
9	14	-0.10	0.05	-0.03	0.01	0.07	0.04	0.00	0.38	0.21
10	14	-0.04	-0.06	-0.23	0.07	-0.05	0.07	0.30	-0.33	0.20
11	14	0.00	0.01	0.04	-0.06	0.07	0.08	0.01	-0.02	-0.03
12	14	-0.07	-0.03	0.11	-0.12	-0.05	0.28	0.01	0.01	-0.05
13	14	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.13	0.02	0.00	0.04
14	14	0.05	-0.08	-0.11	0.17	-0.16	-0.15	-0.03	0.00	-0.01
15	14	0.10	0.07	0.06	0.25	0.20	0.06	-0.04	-0.05	-0.01
16	14	-0.11	0.03	-0.06	-0.14	-0.01	-0.16	0.00	0.03	0.00
17	14	0.18	0.05	-0.02	0.45	0.22	0.01	-0.07	-0.06	-0.03
18	14	-0.14	0.09	-0.01	-0.18	0.04	0.06	-0.01	0.04	-0.05
19	14	-0.04	-0.20	0.01	-0.19	-0.35	-0.03	0.06	0.02	0.00
20	14	-0.07	0.08	-0.03	-0.01	-0.04	-0.01	-0.01	0.01	0.00
21	14	0.08	0.18	-0.01	-0.04	-0.08	0.00	0.04	0.08	-0.01
22	14	0.00	-0.03	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.02	0.00	-0.03
23	14	-0.04	-0.17	0.17	0.00	0.10	-0.09	-0.03	-0.05	0.07
24	14	0.23	-0.03	-0.27	-0.13	0.04	0.13	0.07	0.01	-0.07
25	14	-0.23	-0.07	0.04	0.06	0.03	-0.04	-0.11	-0.03	0.01
26	14	0.18	-0.11	-0.21	-0.12	0.06	0.13	0.06	-0.03	-0.06
27	14	-0.16	0.11	-0.01	0.06	-0.06	-0.01	-0.05	0.04	-0.02
28	14	-0.07	0.10	0.36	0.04	-0.05	-0.18	-0.02	0.04	0.14
29	14	0.04	0.00	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.00
25										
A										
Frequencies	--	215.9573			223.1313			234.0561		
Red. masses	--	28.0722			28.0629			27.9807		
Frc consts	--	0.7714			0.8232			0.9031		
IR Inten	--	129.0971			121.6761			4.9252		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.06	-0.01	-0.10	-0.06	0.07	-0.06	-0.02	0.00	0.00
2	14	-0.19	0.01	0.32	-0.03	-0.03	0.05	0.04	-0.01	-0.04
3	14	0.08	0.08	-0.15	-0.04	-0.01	-0.05	-0.02	-0.03	0.01
4	14	-0.07	-0.07	-0.03	-0.03	0.02	0.01	0.00	0.02	0.02
5	14	0.18	-0.02	0.00	0.00	0.05	-0.01	-0.03	0.02	0.01
6	14	0.02	-0.17	0.08	-0.03	-0.04	-0.04	-0.02	0.02	-0.04
7	14	-0.19	0.12	-0.04	-0.07	0.07	-0.03	0.02	-0.02	-0.02
8	14	-0.04	0.05	-0.27	0.03	0.00	0.01	0.02	0.00	0.04
9	14	0.17	-0.19	-0.11	0.06	-0.05	0.01	-0.01	0.02	0.03
10	14	0.07	0.03	0.03	0.04	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
26										
A										
27										
A										

11	14	0.10	0.02	0.08	0.20	0.00	0.30	0.09	0.32	-0.10
12	14	-0.04	-0.07	-0.06	0.00	-0.11	-0.12	-0.40	0.02	-0.01
13	14	-0.05	-0.01	-0.02	-0.03	0.01	0.05	-0.17	-0.09	-0.04
14	14	0.07	0.01	-0.08	0.03	0.11	-0.14	0.44	-0.05	-0.04
15	14	0.03	0.03	0.01	0.02	0.21	0.05	-0.27	-0.24	-0.02
16	14	0.07	-0.10	0.03	-0.04	-0.13	0.07	0.37	-0.26	0.09
17	14	-0.07	0.01	-0.04	-0.15	-0.13	-0.10	0.06	0.07	-0.02
18	14	-0.11	0.07	-0.03	-0.12	0.12	-0.13	-0.21	0.17	0.03
19	14	-0.02	0.01	0.03	0.02	-0.03	-0.06	0.03	0.11	0.09
20	14	0.03	0.05	-0.02	-0.09	-0.07	0.00	0.03	-0.02	0.05
21	14	0.02	-0.08	0.04	-0.12	0.04	-0.11	0.02	0.02	-0.04
22	14	-0.14	0.17	-0.01	0.22	-0.19	0.06	0.02	-0.03	-0.05
23	14	0.02	-0.10	-0.06	0.06	0.15	0.02	-0.04	-0.01	0.04
24	14	0.10	-0.08	-0.09	-0.15	0.11	0.21	0.02	-0.01	0.01
25	14	0.12	-0.03	0.13	-0.13	0.06	-0.11	-0.03	0.01	-0.02
26	14	0.04	0.06	0.05	0.01	-0.13	-0.19	-0.02	-0.02	0.00
27	14	-0.05	0.01	-0.16	0.00	-0.03	0.12	0.06	0.01	0.05
28	14	-0.03	-0.04	0.05	0.05	0.04	-0.04	0.00	0.01	0.00
29	14	-0.18	0.24	0.42	0.39	-0.14	0.27	0.01	-0.04	-0.06
		28			29			30		
		A			A			A		
Frequencies	--	235.1464			237.0449			249.8044		
Red. masses	--	27.9794			27.9790			27.9805		
Frc consts	--	0.9115			0.9263			1.0287		
IR Inten	--	3.7922			10.7796			1.1589		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.01
2	14	-0.03	0.09	-0.06	-0.18	0.27	-0.14	-0.03	-0.08	-0.06
3	14	0.04	0.08	0.09	0.05	0.29	0.22	-0.04	-0.11	0.04
4	14	0.06	-0.07	-0.01	0.10	-0.19	0.03	0.03	0.13	0.18
5	14	-0.01	-0.07	-0.09	-0.08	-0.24	-0.31	-0.10	0.06	-0.02
6	14	0.03	0.06	0.12	0.18	0.07	0.39	-0.07	-0.07	-0.17
7	14	0.06	-0.11	-0.02	0.12	-0.33	-0.11	0.03	-0.13	-0.11
8	14	-0.04	-0.05	-0.08	-0.08	-0.03	-0.23	0.11	0.03	0.10
9	14	-0.04	0.06	0.01	-0.03	0.08	0.04	0.01	0.13	0.06
10	14	-0.04	-0.03	0.00	-0.07	0.07	-0.01	0.09	0.03	-0.08
11	14	-0.02	0.05	-0.04	0.06	-0.01	0.04	0.06	-0.13	-0.03
12	14	-0.06	0.03	0.03	0.02	-0.05	-0.03	0.21	-0.09	-0.14
13	14	0.01	-0.01	0.01	-0.06	0.04	-0.02	-0.29	0.16	-0.25
14	14	0.05	-0.03	0.03	0.01	0.03	-0.05	0.09	-0.13	-0.15
15	14	-0.09	-0.03	-0.02	0.07	0.05	0.04	0.29	-0.01	0.08
16	14	0.04	-0.01	0.00	0.04	-0.03	0.03	0.15	0.12	0.06
17	14	0.07	0.00	0.00	-0.07	-0.01	-0.01	-0.27	0.07	-0.01
18	14	0.00	0.00	0.02	-0.04	0.01	0.02	-0.17	-0.01	0.15
19	14	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.06	-0.04	0.00	0.36
20	14	-0.03	-0.02	-0.20	-0.02	0.03	0.06	-0.05	0.05	-0.08
21	14	-0.37	-0.06	0.15	0.12	0.03	-0.08	0.02	0.03	0.07
22	14	0.08	0.11	0.34	0.01	-0.04	-0.10	-0.01	0.04	0.05
23	14	0.39	0.07	-0.09	-0.10	0.00	0.02	0.05	0.04	-0.04
24	14	-0.16	0.01	0.08	0.03	0.01	-0.01	-0.09	0.01	-0.06
25	14	0.20	0.02	0.07	-0.10	0.00	0.00	0.02	-0.04	0.03
26	14	0.26	-0.05	-0.23	-0.06	0.01	0.05	0.06	0.00	0.05
27	14	-0.37	-0.03	-0.15	0.12	-0.02	0.05	-0.04	-0.02	-0.06
28	14	-0.01	0.01	0.08	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	-0.09	0.00
29	14	-0.04	0.00	-0.04	0.04	-0.02	0.04	-0.01	0.03	-0.01
		31			32			33		
		A			A			A		
Frequencies	--	252.5425			257.5912			259.1742		
Red. masses	--	28.0120			28.0105			27.9782		
Frc consts	--	1.0526			1.0950			1.1073		
IR Inten	--	1.3464			4.4032			5.1982		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.04	-0.06	0.01	-0.04	-0.05	0.00	-0.01	0.00	-0.01
2	14	0.02	0.00	-0.04	-0.09	-0.03	-0.06	0.07	-0.03	-0.02
3	14	0.08	0.01	0.07	-0.17	-0.09	-0.03	0.23	-0.03	0.18
4	14	0.08	0.03	-0.06	0.01	0.11	0.41	0.08	0.14	-0.21
5	14	0.00	0.09	-0.03	-0.16	-0.05	-0.10	0.06	0.13	-0.01
6	14	-0.10	0.09	-0.01	0.02	-0.17	-0.15	-0.14	0.11	-0.05
7	14	0.03	-0.04	0.02	0.05	-0.21	-0.18	0.06	-0.09	0.16
8	14	0.02	-0.13	0.00	0.18	0.15	0.05	-0.06	-0.16	0.08
9	14	-0.02	0.04	-0.03	0.02	0.17	0.12	-0.07	0.05	-0.23
10	14	-0.09	-0.09	0.03	0.21	0.10	-0.17	-0.27	-0.12	0.08
11	14	0.06	-0.02	0.06	0.06	0.08	0.03	0.08	0.00	0.01
12	14	0.03	-0.06	-0.02	-0.13	-0.03	0.08	-0.11	-0.16	0.05
13	14	-0.09	0.03	-0.01	0.09	-0.11	0.20	-0.13	0.02	0.14
14	14	0.03	0.04	-0.04	-0.12	0.23	0.03	-0.06	0.20	-0.01
15	14	0.07	0.10	0.01	-0.04	0.11	-0.01	0.17	0.15	-0.02
16	14	0.03	-0.04	0.02	-0.01	-0.15	-0.03	0.09	-0.20	-0.04

17	14	-0.06	-0.07	0.00	0.10	-0.09	0.07	-0.06	-0.13	0.04
18	14	-0.04	0.05	0.01	0.06	0.03	-0.13	0.03	0.17	-0.02
19	14	0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.03	-0.18	0.06	-0.03	-0.11
20	14	0.38	-0.12	-0.06	0.15	0.05	-0.05	-0.03	0.15	-0.03
21	14	-0.03	-0.15	0.12	0.02	0.03	0.08	0.11	0.10	0.07
22	14	-0.11	-0.12	0.05	-0.05	0.03	0.00	-0.03	0.04	-0.01
23	14	-0.09	-0.19	0.01	-0.03	-0.02	-0.09	0.02	0.06	-0.13
24	14	0.24	0.10	-0.09	0.02	0.02	-0.11	-0.14	-0.05	-0.13
25	14	0.24	0.08	-0.09	0.02	0.06	0.15	-0.05	0.01	0.12
26	14	-0.35	0.05	0.06	-0.05	0.02	0.10	0.08	-0.02	0.18
27	14	-0.34	0.05	0.07	-0.07	-0.07	-0.12	0.03	-0.06	-0.10
28	14	-0.02	0.40	-0.08	-0.05	-0.07	0.04	-0.02	-0.27	0.04
29	14	0.07	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.06	-0.01	0.02	-0.03
		34			35			36		
		A			A			A		
Frequencies	--	263.5382			265.2592			267.1092		
Red. masses	--	27.9875			27.9913			27.9813		
Frc consts	--	1.1453			1.1604			1.1762		
IR Inten	--	1.7378			23.7993			8.3388		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.03	-0.03	0.01	-0.03	0.03	0.02	0.00	0.00	-0.02
2	14	-0.01	0.01	-0.01	0.09	0.00	-0.06	-0.06	-0.01	0.06
3	14	-0.06	0.00	-0.04	-0.08	0.02	-0.06	0.13	-0.02	0.14
4	14	-0.03	-0.04	0.04	-0.13	-0.16	-0.17	0.10	0.21	0.07
5	14	-0.01	-0.04	0.01	0.01	-0.10	0.06	0.02	0.09	-0.08
6	14	0.07	-0.02	0.00	0.11	0.09	0.09	-0.15	-0.04	-0.08
7	14	-0.02	0.02	-0.01	0.00	0.21	0.01	0.00	-0.20	0.00
8	14	0.00	0.08	-0.01	-0.16	0.06	0.01	0.08	-0.12	0.02
9	14	0.00	-0.02	0.04	0.04	-0.14	0.14	0.00	0.14	-0.19
10	14	0.07	0.03	-0.03	0.08	0.08	0.05	-0.15	-0.07	-0.03
11	14	-0.12	-0.09	0.13	0.02	0.01	0.04	0.00	0.00	0.14
12	14	0.04	-0.10	0.08	0.08	0.05	-0.05	0.04	0.07	-0.05
13	14	-0.29	0.36	-0.08	0.03	-0.05	-0.08	0.27	0.06	-0.11
14	14	0.23	-0.23	0.14	0.05	-0.04	-0.04	0.14	-0.21	0.02
15	14	-0.07	0.00	-0.15	-0.04	-0.05	0.06	-0.26	-0.10	0.03
16	14	-0.18	-0.07	-0.08	-0.04	0.05	0.03	-0.20	0.13	0.08
17	14	-0.01	-0.21	-0.07	-0.04	0.08	0.00	0.03	0.13	-0.20
18	14	0.26	0.32	0.35	-0.05	-0.05	-0.06	-0.01	-0.15	0.03
19	14	0.17	0.04	-0.31	-0.04	0.01	0.08	-0.06	0.08	0.01
20	14	0.07	0.00	0.02	0.37	0.12	-0.13	0.13	0.08	0.16
21	14	-0.04	0.01	-0.02	0.01	0.13	0.07	-0.11	0.02	-0.12
22	14	0.00	0.01	-0.02	0.08	-0.09	-0.01	0.01	-0.02	-0.09
23	14	-0.02	-0.01	-0.02	-0.02	0.05	-0.11	0.05	-0.04	-0.16
24	14	0.03	0.00	-0.01	-0.15	0.09	-0.26	0.07	-0.15	0.03
25	14	-0.03	0.05	0.06	-0.04	0.23	0.27	-0.10	0.25	0.13
26	14	-0.01	0.01	0.00	-0.10	-0.13	0.18	-0.04	-0.07	0.03
27	14	0.02	-0.03	-0.03	-0.12	-0.18	-0.06	0.02	-0.02	-0.06
28	14	-0.01	-0.03	0.03	-0.12	-0.23	0.07	0.00	-0.08	0.07
29	14	-0.01	-0.02	-0.01	0.18	-0.12	-0.09	0.07	0.01	0.19
		37			38			39		
		A			A			A		
Frequencies	--	269.2857			270.8501			273.2216		
Red. masses	--	27.9804			27.9825			27.9804		
Frc consts	--	1.1954			1.2095			1.2306		
IR Inten	--	2.9485			8.8555			9.8732		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.00	0.02	0.00	0.01	0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.02
2	14	0.00	0.14	-0.03	0.00	0.05	0.01	0.08	0.00	-0.06
3	14	-0.09	0.07	-0.38	-0.01	0.01	-0.10	-0.10	-0.04	-0.11
4	14	0.20	-0.17	0.25	0.07	-0.03	0.10	-0.04	-0.13	0.03
5	14	-0.05	0.24	0.01	0.00	0.07	-0.01	0.01	-0.04	0.00
6	14	-0.05	0.14	0.07	-0.05	0.05	0.03	0.04	0.08	0.04
7	14	-0.10	0.04	0.11	-0.04	0.00	0.02	0.01	0.14	0.01
8	14	0.41	-0.17	-0.24	0.13	-0.09	-0.08	-0.02	0.04	-0.01
9	14	-0.23	-0.07	0.14	-0.06	0.01	0.02	-0.03	-0.02	0.13
10	14	-0.12	-0.21	0.12	-0.07	-0.08	0.04	0.06	-0.01	0.01
11	14	0.02	-0.04	-0.01	-0.07	0.14	0.08	0.03	-0.05	-0.09
12	14	-0.11	-0.06	-0.01	0.42	0.25	-0.01	-0.13	-0.10	0.02
13	14	0.12	0.08	0.02	-0.35	-0.33	-0.14	-0.01	0.09	0.07
14	14	-0.01	-0.05	0.01	0.11	0.08	0.00	-0.10	0.06	-0.03
15	14	0.01	-0.03	0.02	-0.09	-0.07	0.00	0.16	0.08	-0.04
16	14	-0.02	-0.02	0.02	-0.07	0.02	-0.12	0.14	-0.01	0.03
17	14	-0.04	0.08	-0.14	0.03	-0.11	0.43	-0.01	-0.05	-0.05
18	14	0.04	0.00	0.04	-0.03	0.12	-0.20	-0.05	-0.03	0.06
19	14	-0.02	0.04	0.01	0.06	-0.11	-0.05	-0.01	0.00	0.05
20	14	0.00	0.03	-0.06	0.00	0.04	0.12	-0.11	0.21	0.35
21	14	0.09	0.05	0.07	-0.06	0.00	-0.06	-0.05	-0.03	-0.09
22	14	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.04	-0.08	-0.10	-0.06

23	14	-0.03	0.04	0.03	0.05	-0.02	-0.09	0.28	-0.08	-0.39
24	14	-0.13	0.03	-0.11	0.03	-0.12	0.04	0.16	-0.36	0.15
25	14	0.05	-0.06	-0.04	-0.04	0.10	0.00	-0.09	0.23	-0.07
26	14	0.04	-0.05	0.10	0.02	-0.03	0.02	-0.07	-0.01	0.07
27	14	-0.01	0.03	0.02	0.01	0.03	-0.01	-0.13	0.06	-0.03
28	14	-0.01	-0.08	-0.01	0.01	-0.02	0.03	0.06	0.09	0.09
29	14	0.03	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.02	-0.02	-0.11
		40			41			42		
		A			A			A		
Frequencies	--	277.0982			277.9278			280.9653		
Red. masses	--	27.9891			27.9829			27.9783		
Frc consts	--	1.2662			1.2735			1.3013		
IR Inten	--	6.6251			0.9587			2.3909		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.04	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.00
2	14	0.08	0.01	0.02	-0.19	-0.13	-0.02	-0.02	-0.02	-0.04
3	14	-0.02	-0.04	-0.02	0.01	0.08	0.26	-0.01	0.00	0.04
4	14	-0.14	0.13	0.08	0.23	-0.27	-0.27	0.10	-0.13	-0.05
5	14	0.05	-0.23	-0.08	-0.06	0.43	0.13	0.00	0.16	0.03
6	14	-0.06	0.03	0.09	-0.03	-0.08	-0.18	0.04	0.01	-0.07
7	14	0.00	0.08	-0.06	0.09	-0.13	-0.16	0.00	-0.04	0.06
8	14	-0.03	-0.10	0.04	-0.12	0.11	-0.05	-0.02	0.09	-0.02
9	14	0.15	0.09	-0.05	-0.10	-0.11	0.29	-0.13	-0.03	0.03
10	14	-0.02	0.01	-0.04	0.16	0.10	-0.03	0.00	-0.01	0.04
11	14	0.00	0.02	0.08	0.01	0.02	0.05	0.01	0.02	0.06
12	14	0.01	0.02	-0.05	0.00	0.00	-0.01	0.06	0.08	-0.01
13	14	0.05	-0.09	-0.03	0.04	-0.06	0.01	0.00	0.03	-0.06
14	14	0.09	-0.06	0.05	0.03	-0.01	0.02	0.07	0.00	-0.01
15	14	-0.07	-0.17	0.17	-0.04	-0.07	0.11	-0.12	0.03	-0.13
16	14	-0.19	-0.12	-0.11	-0.11	-0.08	-0.07	-0.01	0.10	0.13
17	14	-0.14	0.27	-0.04	-0.07	0.15	-0.01	0.12	-0.19	0.00
18	14	0.22	0.17	-0.07	0.15	0.09	-0.04	-0.19	-0.12	0.01
19	14	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	0.06	-0.04
20	14	-0.25	0.16	-0.07	-0.04	0.04	0.08	-0.25	0.09	-0.22
21	14	0.35	0.10	0.13	0.04	-0.01	0.04	0.28	0.15	0.12
22	14	-0.05	-0.14	0.06	-0.04	-0.01	0.00	-0.07	-0.11	0.07
23	14	0.16	-0.01	-0.14	0.03	0.01	-0.04	0.13	-0.06	-0.11
24	14	-0.05	-0.02	0.02	-0.07	-0.10	-0.06	0.26	0.13	0.23
25	14	0.11	-0.21	-0.13	0.07	-0.02	-0.14	-0.07	-0.20	0.28
26	14	-0.10	0.02	0.13	0.03	-0.07	0.08	-0.23	0.14	-0.07
27	14	-0.18	0.03	0.03	-0.03	0.13	0.00	-0.02	-0.18	-0.18
28	14	0.02	0.09	-0.02	0.02	0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.10
29	14	0.08	-0.04	0.03	0.01	0.03	0.05	0.08	-0.01	0.01
		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies	--	282.6953			285.9802			292.8262		
Red. masses	--	27.9817			27.9773			27.9903		
Frc consts	--	1.3175			1.3481			1.4141		
IR Inten	--	3.8177			2.5367			9.2874		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.04	-0.02
2	14	0.03	0.01	-0.03	-0.07	0.02	-0.04	-0.02	0.01	0.03
3	14	-0.03	-0.04	-0.03	0.12	0.08	-0.06	0.00	0.01	0.00
4	14	0.07	-0.08	0.06	-0.14	0.17	-0.16	0.02	0.00	0.01
5	14	0.04	0.02	0.00	-0.18	0.04	0.08	0.02	0.00	0.02
6	14	0.15	-0.01	-0.05	-0.21	0.12	0.06	0.01	-0.02	0.00
7	14	-0.05	-0.04	0.18	0.08	0.04	-0.26	-0.04	0.01	0.01
8	14	-0.01	0.21	0.00	0.17	-0.44	0.00	0.00	0.03	0.00
9	14	-0.19	0.01	-0.17	0.26	-0.14	0.39	-0.02	0.00	-0.05
10	14	-0.01	-0.06	0.06	-0.04	0.10	-0.04	0.00	-0.02	0.01
11	14	0.00	-0.03	-0.05	-0.01	-0.01	-0.04	0.03	0.21	-0.05
12	14	-0.04	-0.09	-0.07	-0.05	-0.02	0.01	-0.02	0.08	0.40
13	14	0.00	-0.15	0.03	-0.02	0.00	0.05	0.04	0.41	-0.03
14	14	-0.04	-0.02	0.05	-0.06	0.00	0.00	-0.02	-0.05	-0.41
15	14	0.14	-0.06	0.22	0.05	-0.01	0.05	-0.06	-0.11	0.24
16	14	0.00	-0.13	-0.18	0.02	-0.04	-0.06	0.05	-0.13	-0.24
17	14	-0.23	0.35	-0.03	-0.03	0.07	0.02	-0.20	-0.17	0.20
18	14	0.23	0.23	-0.06	0.11	0.04	0.02	0.18	-0.30	-0.12
19	14	0.01	-0.09	0.12	0.00	-0.03	0.01	0.01	0.04	0.01
20	14	0.04	-0.08	-0.06	-0.03	-0.06	-0.08	-0.02	-0.01	-0.07
21	14	-0.16	-0.01	-0.07	-0.09	0.04	-0.04	0.00	0.06	-0.02
22	14	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.04	-0.02	0.01	-0.02	-0.04
23	14	0.02	-0.05	0.04	-0.01	-0.06	0.00	0.03	-0.06	0.02
24	14	0.23	0.08	0.19	0.18	0.03	0.16	-0.01	-0.01	0.06
25	14	-0.14	0.11	0.25	-0.10	0.05	0.23	0.03	0.04	0.03
26	14	-0.10	0.05	-0.19	-0.03	0.07	-0.11	-0.04	-0.07	0.00
27	14	0.08	-0.12	-0.10	0.10	-0.09	-0.08	0.00	0.04	0.01
28	14	-0.02	0.02	-0.05	0.00	-0.05	-0.06	-0.01	0.01	-0.02

29	14	-0.03	-0.01	-0.05	-0.04	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.02
		46			47			48		
		A			A			A		
Frequencies	--	294.0644			295.8455			304.5060		
Red. masses	--	27.9805			27.9795			27.9894		
Frc consts	--	1.4256			1.4428			1.5291		
IR Inten	--	4.1992			9.2824			2.4791		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.04	0.01
2	14	-0.10	0.11	-0.08	0.10	-0.09	0.07	0.03	-0.02	-0.03
3	14	0.24	0.11	-0.12	-0.20	-0.08	0.10	-0.01	0.02	-0.04
4	14	-0.16	0.19	-0.16	0.14	-0.15	0.12	-0.03	-0.01	-0.02
5	14	-0.27	-0.07	0.12	0.23	0.08	-0.09	-0.07	0.02	-0.08
6	14	0.23	-0.02	-0.04	-0.23	0.02	0.03	-0.03	-0.06	0.02
7	14	-0.05	-0.17	0.14	0.06	0.17	-0.13	0.15	0.05	0.07
8	14	0.19	0.10	0.14	-0.15	-0.14	-0.14	-0.01	0.03	0.02
9	14	-0.09	-0.25	-0.01	0.08	0.20	0.03	-0.03	-0.01	0.01
10	14	0.02	0.00	0.01	-0.05	0.01	0.02	0.02	-0.04	0.03
11	14	0.02	0.04	0.03	0.00	0.02	-0.02	0.02	-0.02	0.04
12	14	0.03	0.00	0.04	-0.01	0.00	0.05	-0.07	0.24	0.04
13	14	0.03	0.02	-0.03	0.00	0.05	0.00	0.06	0.15	-0.02
14	14	0.04	-0.02	-0.04	-0.01	-0.02	-0.05	0.19	0.29	-0.13
15	14	-0.06	0.00	0.06	-0.02	-0.02	0.04	0.29	-0.31	-0.29
16	14	-0.01	-0.02	-0.03	0.01	-0.02	-0.04	-0.35	-0.21	0.39
17	14	-0.05	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.03	-0.11	0.06	0.02
18	14	-0.01	-0.04	-0.04	0.05	-0.03	-0.01	0.06	-0.03	-0.07
19	14	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	-0.02	-0.16	0.05
20	14	0.04	0.10	0.30	0.09	0.08	0.28	-0.01	-0.05	-0.01
21	14	0.05	-0.25	0.13	0.02	-0.28	0.09	-0.07	-0.04	-0.05
22	14	0.01	0.01	0.16	0.05	0.03	0.16	-0.02	0.05	0.02
23	14	0.02	0.27	-0.09	-0.02	0.31	-0.01	-0.08	-0.02	-0.05
24	14	0.09	0.04	-0.19	0.13	0.14	-0.19	0.05	-0.01	0.01
25	14	-0.12	-0.16	-0.13	-0.24	-0.16	-0.01	0.00	0.01	0.00
26	14	-0.04	0.09	-0.10	-0.04	0.12	-0.18	0.13	0.14	0.00
27	14	-0.04	-0.12	-0.12	0.02	-0.20	-0.09	-0.02	-0.07	0.05
28	14	-0.01	0.03	0.03	0.00	-0.05	-0.04	-0.01	0.01	0.01
29	14	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.02	-0.02
		49			50			51		
		A			A			A		
Frequencies	--	306.1909			307.9463			309.5441		
Red. masses	--	28.0698			28.0046			27.9770		
Frc consts	--	1.5505			1.5647			1.5794		
IR Inten	--	2.5685			2.0633			1.5363		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.05	-0.10	0.03	-0.03	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00
2	14	0.11	0.03	-0.13	0.10	-0.06	-0.05	0.04	-0.05	0.02
3	14	0.06	-0.35	-0.02	-0.07	0.10	-0.09	-0.06	0.17	-0.06
4	14	-0.03	-0.15	0.01	-0.09	-0.02	-0.05	-0.07	0.04	-0.02
5	14	0.04	-0.08	-0.07	-0.15	0.07	-0.24	-0.11	0.00	-0.15
6	14	0.12	0.43	-0.03	-0.14	-0.20	0.07	-0.12	-0.26	0.08
7	14	-0.15	-0.02	-0.03	0.42	0.18	0.18	0.32	0.13	0.12
8	14	-0.08	-0.01	0.08	-0.03	0.05	0.05	0.00	0.00	0.01
9	14	0.01	0.05	0.13	-0.06	-0.01	0.05	-0.01	0.00	-0.02
10	14	-0.04	0.06	-0.06	0.04	-0.10	0.05	0.02	-0.07	0.06
11	14	0.09	0.02	0.15	0.05	0.03	0.11	-0.01	-0.02	0.00
12	14	0.11	-0.12	0.05	0.13	-0.20	0.06	0.00	0.00	-0.01
13	14	0.11	0.01	-0.06	0.07	-0.04	-0.07	-0.01	0.00	-0.01
14	14	0.15	0.09	-0.02	0.08	-0.04	0.02	0.02	0.03	0.00
15	14	-0.10	0.11	0.07	-0.21	0.19	0.18	0.05	-0.02	-0.04
16	14	-0.13	-0.08	0.06	0.03	0.01	-0.13	-0.02	0.00	0.04
17	14	-0.09	0.00	-0.07	-0.06	0.00	-0.06	0.01	-0.01	0.00
18	14	-0.09	-0.04	-0.09	-0.10	-0.03	-0.07	-0.02	0.01	0.00
19	14	0.03	0.01	-0.01	0.06	0.07	0.00	-0.01	0.00	0.00
20	14	-0.07	-0.10	0.08	-0.07	-0.07	-0.03	0.01	0.01	0.10
21	14	-0.16	0.03	0.19	-0.05	0.02	-0.06	-0.06	0.05	0.25
22	14	-0.11	0.15	-0.05	-0.06	0.11	0.01	-0.01	0.00	-0.08
23	14	-0.12	0.00	0.05	-0.20	-0.07	-0.14	0.16	0.08	0.21
24	14	0.09	-0.06	0.02	0.07	-0.06	0.02	0.01	0.01	0.01
25	14	0.10	-0.08	-0.03	0.07	-0.03	-0.01	0.02	-0.02	0.01
26	14	0.06	-0.02	0.03	0.23	0.28	0.07	-0.27	-0.40	-0.05
27	14	0.18	0.19	-0.28	-0.03	-0.11	0.09	0.18	0.31	-0.37
28	14	-0.06	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.05	-0.04	-0.01	-0.08
29	14	0.00	0.04	0.00	0.00	0.02	-0.03	-0.01	0.01	-0.02
		52			53			54		
		A			A			A		
Frequencies	--	326.3571			329.5751			338.3468		
Red. masses	--	27.9802			27.9819			28.0100		
Frc consts	--	1.7558			1.7908			1.8892		

IR Inten		18.5633			18.6830			1.5256		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.02	-0.03	-0.06	0.01
2	14	-0.03	-0.07	-0.05	0.06	0.05	0.05	0.05	-0.02	-0.07
3	14	-0.19	0.18	0.13	0.13	-0.10	-0.07	-0.06	-0.06	0.04
4	14	0.10	0.12	0.05	-0.07	-0.09	-0.04	0.00	0.01	0.00
5	14	0.02	-0.07	0.26	-0.02	0.06	-0.22	-0.11	-0.02	0.02
6	14	0.13	-0.15	-0.03	-0.08	0.08	0.03	0.13	-0.02	-0.02
7	14	-0.08	0.07	-0.13	0.03	-0.03	0.08	0.05	0.10	-0.11
8	14	0.05	-0.19	-0.15	-0.05	0.14	0.13	0.03	-0.16	-0.02
9	14	-0.04	-0.04	-0.22	-0.01	0.03	0.10	-0.12	-0.01	-0.14
10	14	-0.02	0.19	0.24	0.01	-0.14	-0.10	0.05	0.16	0.25
11	14	0.03	-0.01	0.00	0.06	-0.01	0.03	0.07	0.01	0.06
12	14	-0.01	0.01	-0.05	-0.12	0.13	-0.19	0.03	-0.08	-0.06
13	14	-0.03	0.01	0.02	-0.13	0.00	0.08	0.00	0.01	0.00
14	14	-0.01	-0.01	-0.03	-0.15	-0.13	-0.16	0.05	0.02	-0.16
15	14	0.00	0.01	0.05	0.03	-0.20	0.07	-0.16	0.03	0.07
16	14	0.00	0.01	0.04	0.16	0.22	0.03	0.11	0.15	0.21
17	14	0.02	-0.01	0.00	0.19	-0.13	0.05	0.02	-0.10	-0.01
18	14	0.04	0.01	0.01	0.29	0.12	0.04	0.27	0.11	-0.04
19	14	-0.05	0.01	0.01	-0.39	0.00	-0.06	-0.34	-0.18	-0.01
20	14	-0.10	-0.09	0.05	-0.05	-0.06	0.03	0.02	0.02	-0.02
21	14	-0.15	0.17	0.13	-0.06	0.06	0.04	0.02	-0.08	0.02
22	14	0.07	0.01	-0.03	0.06	0.01	0.01	-0.11	0.05	0.01
23	14	-0.18	0.09	-0.14	-0.14	0.07	-0.08	0.03	-0.15	0.03
24	14	0.21	-0.02	0.07	0.15	0.02	0.03	-0.26	-0.08	-0.09
25	14	0.20	-0.03	-0.15	0.08	-0.03	-0.06	-0.04	-0.01	0.11
26	14	0.11	0.02	0.14	0.10	-0.01	0.09	-0.12	0.17	-0.15
27	14	0.07	-0.11	-0.17	0.00	-0.04	-0.06	0.08	0.07	-0.02
28	14	-0.31	0.03	0.12	-0.19	-0.01	-0.02	0.35	0.05	0.11
29	14	0.16	-0.12	-0.15	0.11	-0.05	0.22	-0.01	0.06	-0.03

		55			56			57		
		A			A			A		
Frequencies	--	340.8396			343.7880			346.6754		
Red. masses	--	27.9898			27.9775			27.9773		
Frc consts	--	1.9158			1.9482			1.9811		
IR Inten	--	0.8646			3.7723			5.5344		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.02	-0.04	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
2	14	-0.01	-0.03	-0.05	-0.10	-0.07	-0.01	0.02	0.03	-0.01
3	14	-0.04	0.00	0.03	-0.06	0.15	0.00	-0.02	-0.01	0.01
4	14	0.04	0.05	0.01	0.10	0.10	0.03	-0.04	-0.04	0.00
5	14	-0.09	-0.07	0.10	0.05	-0.09	0.18	0.05	0.02	-0.04
6	14	-0.03	0.10	0.09	-0.19	0.15	0.11	0.21	-0.20	-0.15
7	14	0.03	0.03	-0.20	-0.01	-0.06	-0.07	-0.04	0.01	0.25
8	14	0.02	0.05	0.01	-0.02	0.22	-0.03	0.02	-0.20	-0.08
9	14	-0.07	-0.08	-0.20	0.12	-0.10	-0.04	0.03	0.09	0.12
10	14	0.18	-0.10	0.18	0.08	-0.29	-0.11	-0.18	0.30	-0.11
11	14	0.06	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.12	0.04	0.10
12	14	0.02	-0.05	-0.13	0.05	-0.05	0.14	0.04	-0.14	0.16
13	14	-0.02	-0.01	0.03	0.05	0.01	-0.05	0.16	-0.02	-0.15
14	14	0.03	0.03	-0.04	0.06	0.02	-0.01	0.08	0.12	0.08
15	14	0.10	-0.09	0.22	-0.24	0.18	-0.17	0.02	-0.10	-0.02
16	14	-0.19	-0.08	-0.03	0.20	0.12	0.19	0.14	0.13	0.02
17	14	0.20	-0.11	0.00	-0.21	0.07	-0.03	-0.10	-0.16	-0.07
18	14	-0.06	0.01	0.02	0.16	0.04	-0.05	0.02	0.16	-0.11
19	14	-0.07	0.31	-0.02	-0.07	-0.40	0.00	-0.21	-0.04	0.00
20	14	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.04	0.05	0.07	-0.02
21	14	0.00	-0.12	0.05	-0.01	0.04	0.06	0.05	-0.10	-0.06
22	14	-0.04	0.04	0.00	0.02	0.02	-0.04	-0.04	-0.04	0.02
23	14	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.06	-0.04	0.08	0.01	0.06
24	14	0.12	0.00	-0.02	0.13	0.00	-0.02	0.13	0.08	0.07
25	14	-0.22	0.01	0.18	-0.04	-0.05	0.07	-0.14	0.02	0.00
26	14	0.23	-0.08	0.07	0.09	-0.07	0.06	0.20	-0.12	0.13
27	14	-0.17	0.25	0.15	-0.09	0.10	0.08	-0.15	0.11	0.09
28	14	0.04	-0.06	-0.42	-0.02	-0.07	-0.19	-0.16	-0.04	-0.25
29	14	0.00	0.03	-0.05	0.01	-0.01	-0.13	-0.06	0.03	-0.04

		58			59			60		
		A			A			A		
Frequencies	--	347.7981			350.9965			355.3748		
Red. masses	--	27.9839			27.9773			28.0020		
Frc consts	--	1.9944			2.0308			2.0836		
IR Inten	--	11.8135			13.4277			2.8293		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.01	0.03	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.04	-0.04	0.01
2	14	0.13	0.12	0.05	0.03	0.02	0.01	-0.05	-0.07	-0.05
3	14	0.12	-0.19	0.01	0.00	0.05	0.01	-0.06	0.09	-0.03
4	14	-0.12	-0.13	-0.04	-0.03	-0.03	0.00	0.02	0.03	0.03

5	14	-0.13	0.10	-0.20	0.06	0.01	-0.03	0.10	-0.05	0.06
6	14	0.09	-0.07	0.02	0.11	-0.16	-0.08	0.08	-0.06	-0.10
7	14	-0.01	0.07	-0.21	-0.07	-0.02	0.18	0.02	-0.01	0.26
8	14	0.05	-0.15	0.13	0.00	-0.07	-0.03	-0.03	-0.01	-0.07
9	14	-0.22	0.07	-0.13	0.05	0.06	0.09	0.11	0.02	0.13
10	14	0.15	0.16	0.28	-0.13	0.14	-0.11	-0.20	0.05	-0.15
11	14	0.04	-0.01	-0.06	0.04	-0.02	-0.03	0.24	-0.05	-0.14
12	14	-0.04	0.13	0.02	-0.05	0.12	-0.03	0.01	0.11	-0.23
13	14	-0.09	0.02	0.09	-0.06	0.01	0.04	-0.21	0.05	0.19
14	14	-0.08	-0.11	0.00	-0.06	-0.08	0.00	-0.01	-0.15	-0.20
15	14	-0.15	0.15	-0.20	0.01	0.01	-0.06	-0.18	0.22	0.10
16	14	0.08	0.00	0.01	0.02	-0.02	-0.04	-0.13	-0.11	0.16
17	14	-0.11	0.22	0.04	-0.01	0.08	0.02	0.12	0.14	0.07
18	14	0.03	-0.14	0.07	-0.02	-0.06	0.03	0.11	-0.16	0.06
19	14	0.23	-0.25	-0.04	0.10	-0.03	-0.01	0.08	-0.06	-0.03
20	14	0.02	0.04	0.00	-0.17	-0.22	0.11	0.09	0.13	-0.05
21	14	0.05	-0.01	-0.04	-0.09	0.14	0.26	0.02	-0.15	-0.02
22	14	0.00	-0.04	0.02	0.17	0.15	-0.09	-0.15	-0.09	0.04
23	14	0.02	0.04	0.02	-0.20	0.06	-0.23	0.04	-0.13	0.09
24	14	0.11	0.05	0.04	0.00	-0.16	-0.24	-0.04	0.06	0.09
25	14	-0.05	-0.02	-0.02	0.03	-0.06	0.31	-0.13	0.01	-0.05
26	14	0.11	-0.10	0.11	-0.05	-0.01	-0.08	0.17	0.09	0.09
27	14	-0.11	0.07	0.05	-0.12	0.16	0.16	0.02	0.12	-0.10
28	14	-0.12	-0.06	-0.16	0.32	0.05	-0.20	-0.05	-0.02	-0.07
29	14	-0.01	0.00	0.18	0.13	-0.12	0.03	0.07	0.03	-0.09

		61	62	63
		A	A	A
Frequencies	--	361.9362	364.9872	372.3737
Red. masses	--	27.9990	27.9961	27.9818
Frc consts	--	2.1610	2.1974	2.2860
IR Inten	--	10.4250	12.4758	1.3875

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.01	-0.04	0.04	-0.01	0.05	0.00	-0.01	-0.02	0.01
2	14	0.03	0.11	0.03	0.07	0.03	0.03	-0.04	-0.04	-0.02
3	14	0.22	0.20	-0.11	0.10	0.21	-0.01	0.01	0.07	-0.02
4	14	-0.28	-0.22	0.00	-0.15	-0.09	-0.01	-0.05	-0.04	0.01
5	14	0.32	0.09	0.00	0.18	0.03	0.00	0.07	-0.01	0.02
6	14	-0.11	-0.22	0.01	-0.12	-0.14	0.06	0.01	0.01	-0.02
7	14	-0.19	-0.11	-0.16	-0.18	-0.08	-0.17	-0.02	-0.02	0.00
8	14	0.09	0.00	0.23	0.06	0.06	0.13	0.03	0.01	0.02
9	14	-0.10	0.19	0.06	-0.05	0.09	0.01	0.00	0.03	0.00
10	14	0.01	-0.01	0.04	0.03	-0.07	0.03	-0.02	-0.01	0.01
11	14	0.05	-0.02	-0.13	-0.05	0.01	0.07	-0.31	0.11	0.33
12	14	0.10	-0.13	-0.06	-0.06	0.08	0.10	0.09	-0.33	-0.14
13	14	0.01	0.00	0.00	0.06	-0.01	-0.08	-0.19	0.05	0.40
14	14	0.12	0.08	-0.09	-0.06	-0.02	0.12	0.14	0.25	-0.23
15	14	-0.08	0.15	0.16	0.08	-0.10	-0.08	-0.03	-0.21	-0.16
16	14	-0.14	-0.09	0.18	0.09	0.04	-0.11	0.06	0.18	-0.19
17	14	0.07	-0.07	0.00	-0.08	-0.02	-0.02	0.11	0.21	-0.09
18	14	0.06	0.03	-0.01	-0.07	0.05	-0.02	0.05	-0.25	0.03
19	14	-0.09	0.03	0.03	0.02	0.00	0.01	0.08	-0.01	0.06
20	14	-0.03	-0.06	0.03	0.07	0.14	-0.05	0.00	-0.01	0.02
21	14	0.00	0.10	-0.05	-0.09	-0.18	0.20	-0.01	0.01	-0.01
22	14	0.05	0.06	-0.05	-0.09	-0.14	0.03	-0.02	-0.02	-0.01
23	14	0.06	0.10	0.01	-0.12	-0.25	-0.02	0.02	0.00	0.01
24	14	0.06	0.01	-0.02	-0.15	0.01	0.06	0.00	0.01	-0.01
25	14	0.06	0.00	0.00	-0.15	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.01
26	14	-0.08	-0.10	-0.03	0.19	0.27	0.05	0.01	0.02	0.01
27	14	-0.04	-0.10	0.11	0.14	0.19	-0.25	0.00	0.01	0.00
28	14	-0.03	-0.02	0.02	0.07	0.05	-0.02	0.01	0.00	-0.01
29	14	-0.13	0.04	-0.26	0.26	-0.21	-0.06	0.03	0.03	-0.03

		64	65	66
		A	A	A
Frequencies	--	375.4952	377.3703	388.9204
Red. masses	--	28.0052	27.9843	30.1090
Frc consts	--	2.3265	2.3480	2.6833
IR Inten	--	5.5788	1.9779	171.0273

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.03	0.05	0.01	0.03	0.01	-0.01	0.27	0.47	-0.11
2	14	0.34	0.32	0.10	-0.18	-0.15	-0.04	-0.11	-0.06	0.01
3	14	0.00	-0.18	0.10	0.00	0.05	-0.05	0.01	-0.01	-0.06
4	14	0.27	0.22	-0.06	-0.11	-0.10	0.03	0.00	-0.03	0.04
5	14	-0.19	0.08	-0.11	0.06	-0.02	0.04	-0.02	0.00	0.01
6	14	-0.06	-0.29	0.15	0.04	0.17	-0.08	0.04	0.08	-0.06
7	14	-0.29	0.03	-0.05	0.16	-0.01	0.04	0.10	-0.01	0.03
8	14	-0.11	0.10	-0.10	0.04	-0.05	0.05	-0.05	-0.03	0.06
9	14	0.05	-0.17	0.13	-0.02	0.08	-0.06	0.01	0.03	-0.03
10	14	-0.01	-0.04	-0.08	0.01	0.03	0.03	0.01	0.03	0.01

11	14	-0.04	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.02	-0.10
12	14	0.06	-0.11	-0.05	0.00	0.01	0.00	0.07	-0.11	-0.03
13	14	-0.02	0.01	0.06	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.05	-0.01
14	14	0.08	0.08	-0.07	0.00	-0.01	0.00	0.06	0.09	-0.10
15	14	-0.05	0.05	0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.07	0.08	0.01
16	14	-0.05	-0.02	0.06	0.00	0.01	0.01	-0.10	-0.06	0.08
17	14	0.04	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.03	-0.02	-0.04
18	14	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.04	0.09
19	14	-0.02	0.00	0.03	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	0.02	0.09
20	14	0.07	0.19	-0.05	0.14	0.40	-0.11	0.00	-0.05	0.02
21	14	-0.04	-0.04	0.16	-0.05	-0.09	0.29	-0.01	0.01	0.01
22	14	0.11	0.12	-0.08	0.28	0.32	-0.15	-0.03	-0.11	0.03
23	14	-0.05	-0.12	-0.08	-0.15	-0.22	-0.18	-0.01	0.00	-0.01
24	14	-0.01	0.00	0.10	-0.02	0.00	0.22	0.00	-0.02	-0.04
25	14	-0.05	-0.07	-0.07	-0.09	-0.14	-0.16	0.01	-0.01	0.04
26	14	-0.02	-0.05	-0.05	-0.06	-0.18	-0.14	0.04	0.08	0.06
27	14	0.02	-0.03	0.06	0.04	-0.10	0.21	0.00	0.05	-0.08
28	14	-0.03	0.01	0.00	-0.06	0.02	0.01	0.02	0.04	-0.02
29	14	-0.09	-0.13	-0.11	-0.07	0.00	0.08	-0.35	-0.59	0.14
		67			68			69		
		A			A			A		
Frequencies	--	392.2259			392.9655			396.4984		
Red. masses	--	28.0249			28.0097			27.9811		
Frc consts	--	2.5402			2.5484			2.5918		
IR Inten	--	5.2711			1.3768			1.2948		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.05	0.07	-0.01	0.04	0.05	-0.02	-0.02	-0.02	0.00
2	14	-0.02	0.02	-0.01	0.09	-0.16	0.08	-0.04	0.02	-0.02
3	14	0.03	0.00	-0.05	-0.17	-0.04	0.42	0.04	0.01	-0.12
4	14	0.02	-0.04	0.02	-0.29	0.17	-0.19	0.10	0.01	0.05
5	14	-0.04	0.02	0.04	0.20	-0.10	-0.21	-0.03	0.01	0.02
6	14	-0.02	0.00	0.02	-0.04	0.12	-0.02	0.04	-0.02	-0.03
7	14	0.01	-0.02	-0.01	-0.07	0.03	0.08	0.04	0.00	-0.05
8	14	-0.05	-0.02	0.04	0.44	0.09	-0.27	-0.13	-0.01	0.08
9	14	0.04	0.02	-0.05	-0.27	-0.08	0.15	0.02	-0.01	0.01
10	14	0.02	0.02	-0.01	0.12	-0.04	-0.03	-0.06	0.00	0.05
11	14	-0.05	-0.20	0.02	0.00	-0.03	-0.02	-0.01	-0.04	0.04
12	14	-0.18	-0.09	-0.23	-0.03	-0.03	-0.06	-0.11	-0.03	-0.12
13	14	-0.05	0.39	0.07	0.00	0.06	0.00	0.10	0.06	-0.09
14	14	0.25	-0.09	0.38	0.04	-0.01	0.04	-0.01	-0.01	0.02
15	14	0.05	0.03	0.10	0.00	0.03	0.02	-0.01	0.04	-0.07
16	14	0.06	0.09	0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.04	-0.01	-0.10
17	14	0.03	0.07	0.29	0.02	0.00	0.06	0.04	-0.04	0.19
18	14	-0.06	-0.12	-0.52	0.00	-0.01	-0.07	0.03	0.04	-0.02
19	14	-0.05	-0.08	-0.10	-0.01	-0.01	0.01	0.02	0.00	0.15
20	14	-0.02	-0.02	-0.05	0.00	-0.01	0.09	0.08	0.06	0.34
21	14	0.05	-0.04	0.01	-0.06	0.05	-0.02	-0.28	0.23	-0.13
22	14	0.01	0.00	0.04	-0.02	0.00	-0.06	-0.06	-0.05	-0.19
23	14	-0.03	0.04	0.01	0.07	-0.07	-0.01	0.24	-0.27	-0.07
24	14	0.01	-0.06	0.01	-0.02	0.11	-0.04	-0.08	0.39	-0.09
25	14	-0.01	0.07	0.00	0.02	-0.07	0.02	0.09	-0.38	0.06
26	14	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.02	0.07	0.05
27	14	0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.03	0.02	0.00	-0.02	0.07
28	14	0.00	0.02	0.01	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	-0.04	-0.07
29	14	-0.06	-0.08	0.00	-0.06	-0.04	0.02	0.04	0.03	0.03
		70			71			72		
		A			A			A		
Frequencies	--	398.7961			400.8733			403.6458		
Red. masses	--	27.9816			27.9843			27.9869		
Frc consts	--	2.6219			2.6496			2.6866		
IR Inten	--	2.4520			6.9946			10.1342		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.03	-0.01	-0.02	-0.03	0.01
2	14	0.03	0.02	0.01	0.02	0.07	0.00	0.00	0.10	0.03
3	14	-0.03	0.00	0.08	-0.02	-0.03	0.08	-0.02	-0.07	0.10
4	14	-0.07	-0.09	-0.03	-0.09	-0.20	-0.03	-0.11	-0.24	-0.04
5	14	-0.07	0.02	0.05	-0.18	0.09	0.14	-0.23	0.13	0.16
6	14	-0.04	0.00	0.05	-0.12	0.01	0.12	-0.16	0.04	0.14
7	14	-0.05	-0.01	0.11	-0.06	-0.02	0.18	-0.04	-0.02	0.22
8	14	0.09	-0.02	-0.05	0.10	-0.08	-0.05	0.12	-0.08	-0.07
9	14	0.07	0.05	-0.10	0.14	0.10	-0.21	0.18	0.12	-0.26
10	14	0.08	0.04	-0.09	0.19	0.08	-0.18	0.22	0.08	-0.20
11	14	-0.04	-0.03	0.05	0.05	0.02	-0.04	-0.03	0.00	-0.02
12	14	-0.15	-0.09	-0.20	0.13	0.10	0.16	-0.03	-0.05	-0.07
13	14	0.19	0.04	-0.15	-0.18	-0.03	0.14	0.06	0.00	-0.05
14	14	-0.03	0.04	-0.10	0.02	-0.05	0.07	0.00	0.03	-0.08
15	14	-0.10	0.08	-0.18	0.12	-0.08	0.16	-0.08	0.06	-0.07
16	14	-0.10	-0.05	-0.17	0.07	0.02	0.11	-0.05	-0.02	-0.03

17	14	0.07	-0.08	0.29	-0.03	0.05	-0.27	0.03	-0.03	0.09
18	14	0.09	0.10	0.09	-0.06	-0.07	-0.10	0.05	0.03	0.06
19	14	0.05	0.00	0.33	-0.06	0.03	-0.22	0.02	-0.01	0.12
20	14	0.13	0.13	-0.16	0.14	0.11	0.06	-0.16	-0.13	0.08
21	14	-0.04	0.04	-0.05	-0.20	0.15	-0.11	0.12	-0.10	0.10
22	14	-0.04	-0.04	0.06	-0.07	-0.06	-0.05	0.08	0.01	-0.01
23	14	-0.14	0.21	0.09	0.03	0.02	0.03	0.07	-0.18	-0.10
24	14	0.14	-0.25	0.13	0.06	0.02	0.05	-0.12	0.17	-0.10
25	14	0.05	-0.09	-0.08	0.09	-0.25	-0.03	-0.07	0.18	0.06
26	14	-0.11	0.11	-0.07	-0.10	0.14	-0.04	0.12	-0.11	0.07
27	14	-0.11	0.18	0.02	-0.07	0.10	0.04	0.14	-0.16	-0.08
28	14	0.09	-0.28	0.06	0.06	-0.23	0.03	-0.09	0.27	-0.03
29	14	0.08	0.00	-0.01	0.00	-0.07	-0.04	0.01	0.04	-0.04
		73			74			75		
		A			A			A		
Frequencies	--	425.8695			426.4676			428.5348		
Red. masses	--	27.9818			27.9816			27.9779		
Frc consts	--	2.9901			2.9984			3.0272		
IR Inten	--	1.8846			3.4349			4.1707		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	0.02	0.02	0.00	0.02	0.02	0.00	0.01	0.01	0.00
2	14	0.05	0.01	-0.06	0.03	-0.04	-0.01	0.05	0.02	-0.06
3	14	-0.03	-0.02	0.08	0.00	0.06	-0.03	-0.06	-0.08	0.16
4	14	-0.08	-0.10	-0.03	0.03	0.03	0.02	-0.16	-0.18	-0.06
5	14	-0.09	0.04	0.07	0.02	-0.02	-0.02	-0.18	0.06	0.10
6	14	0.07	-0.05	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.20	-0.09	-0.07
7	14	0.00	0.04	-0.08	-0.04	-0.03	0.05	0.05	0.10	-0.23
8	14	0.11	0.12	-0.03	-0.05	-0.05	0.02	0.22	0.26	-0.06
9	14	0.17	0.08	-0.01	-0.05	-0.02	0.00	0.34	0.15	-0.01
10	14	-0.19	-0.12	0.06	0.07	0.05	-0.03	-0.43	-0.25	0.16
11	14	0.00	0.01	0.06	0.01	0.00	0.05	0.00	-0.02	-0.01
12	14	-0.08	-0.12	-0.15	-0.04	-0.03	-0.07	0.03	0.06	0.08
13	14	0.19	-0.03	-0.16	0.08	-0.02	-0.06	-0.07	0.01	0.06
14	14	-0.04	0.08	-0.15	-0.02	0.03	-0.07	0.02	-0.03	0.08
15	14	0.06	-0.13	0.19	0.02	-0.06	0.07	-0.02	0.05	-0.08
16	14	0.08	0.14	0.14	0.04	0.06	0.04	-0.02	-0.05	-0.06
17	14	-0.13	0.14	0.31	-0.05	0.06	0.13	0.05	-0.06	-0.13
18	14	-0.16	-0.02	0.29	-0.06	-0.01	0.12	0.06	0.01	-0.12
19	14	0.12	-0.07	-0.48	0.05	-0.03	-0.19	-0.05	0.03	0.19
20	14	0.06	0.06	-0.02	-0.18	-0.18	0.07	-0.05	-0.05	0.03
21	14	-0.05	0.05	-0.06	0.12	-0.15	0.16	0.05	-0.04	0.02
22	14	-0.03	0.00	-0.01	-0.02	0.09	-0.04	-0.01	0.05	0.01
23	14	0.01	0.06	0.04	0.08	-0.18	-0.07	0.02	-0.07	-0.04
24	14	-0.03	-0.10	0.01	0.12	0.33	-0.03	0.03	0.11	-0.01
25	14	-0.01	-0.11	0.05	0.08	0.33	-0.18	0.03	0.09	-0.05
26	14	0.02	-0.03	0.03	-0.12	0.13	-0.17	-0.04	0.01	-0.04
27	14	0.01	-0.07	-0.02	-0.07	0.20	0.12	-0.03	0.07	0.04
28	14	0.02	0.14	-0.04	-0.04	-0.50	0.13	-0.02	-0.15	0.03
29	14	-0.06	-0.02	-0.01	0.00	-0.08	-0.01	-0.02	-0.03	0.07
		76			77			78		
		A			A			A		
Frequencies	--	446.5155			449.4693			452.3121		
Red. masses	--	27.9786			27.9828			27.9926		
Frc consts	--	3.2866			3.3307			3.3742		
IR Inten	--	6.1537			14.8852			4.9813		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	-0.02	-0.01	-0.03	-0.04	0.00
2	14	-0.39	0.44	-0.15	-0.19	0.21	-0.05	0.06	-0.12	0.14
3	14	0.03	-0.39	0.04	0.01	-0.19	0.02	0.00	0.09	-0.02
4	14	-0.04	0.07	-0.04	-0.02	0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.01
5	14	0.27	-0.06	0.16	0.10	-0.01	0.06	-0.08	0.00	-0.08
6	14	-0.12	-0.16	0.02	-0.04	-0.06	0.00	0.05	0.06	-0.02
7	14	0.23	0.12	0.02	0.12	0.06	0.00	-0.04	-0.03	-0.02
8	14	0.05	0.04	-0.07	0.02	0.02	-0.03	-0.01	-0.01	0.01
9	14	-0.09	-0.01	0.04	-0.03	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.01
10	14	0.02	-0.02	0.02	-0.01	-0.02	0.02	-0.02	0.00	0.00
11	14	-0.08	-0.14	-0.01	0.10	0.52	-0.05	-0.06	0.39	-0.21
12	14	-0.03	0.06	0.01	0.12	-0.28	-0.06	0.13	-0.28	-0.04
13	14	0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.08	0.00	0.01	0.06	-0.01
14	14	0.07	0.09	-0.05	-0.22	-0.24	0.13	-0.11	-0.12	0.08
15	14	-0.02	0.01	0.06	0.10	-0.07	-0.14	0.08	-0.03	-0.05
16	14	0.04	0.01	-0.02	-0.11	0.00	0.13	-0.10	-0.01	0.16
17	14	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.02	0.07	0.00	0.02	0.06
18	14	-0.01	-0.01	0.04	0.00	0.02	-0.08	0.00	0.01	-0.04
19	14	0.01	0.00	-0.03	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.02	-0.02
20	14	0.00	0.00	0.04	-0.02	-0.02	-0.05	0.02	0.02	0.07
21	14	0.02	0.03	-0.10	-0.06	-0.04	0.23	0.04	0.06	-0.23
22	14	0.15	-0.05	0.24	-0.04	-0.13	-0.33	0.22	-0.02	0.47

23	14	-0.15	-0.11	-0.12	0.12	0.11	0.11	-0.22	-0.18	-0.20
24	14	0.00	0.05	0.00	0.01	-0.05	-0.01	-0.01	0.08	0.01
25	14	0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.06	-0.03	0.02	-0.06	0.03
26	14	-0.04	-0.02	0.00	0.06	0.13	-0.01	-0.08	-0.09	0.01
27	14	0.04	0.15	-0.08	-0.05	-0.08	0.05	0.06	0.20	-0.11
28	14	0.01	-0.05	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.04	-0.02
29	14	0.03	0.01	-0.05	0.03	-0.02	0.00	0.03	0.07	0.00
		79			80			81		
		A			A			A		
Frequencies	--	461.4440			505.9207			514.6606		
Red. masses	--	28.0051			27.9818			27.9799		
Frc consts	--	3.5134			4.2198			4.3665		
IR Inten	--	14.9194			43.0274			39.3504		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	17	-0.03	-0.05	0.01	0.02	0.02	0.01	0.02	0.01	0.00
2	14	-0.16	-0.02	0.45	-0.23	0.05	0.56	0.11	-0.05	-0.13
3	14	0.03	-0.06	-0.02	0.04	-0.08	-0.01	-0.01	0.05	0.00
4	14	0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
5	14	-0.13	0.02	-0.16	-0.09	0.03	-0.13	0.00	0.00	0.02
6	14	0.12	0.12	-0.07	0.09	0.08	-0.06	-0.01	-0.01	0.01
7	14	0.08	0.01	-0.04	0.07	0.01	-0.04	-0.04	-0.01	0.00
8	14	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
9	14	0.03	0.01	-0.02	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01
10	14	-0.05	-0.01	0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
11	14	-0.29	-0.15	-0.32	0.29	0.02	0.34	0.26	-0.01	0.32
12	14	0.03	-0.04	0.04	-0.05	0.07	-0.02	-0.04	0.08	-0.01
13	14	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00
14	14	0.15	0.15	-0.04	-0.08	-0.07	0.00	-0.05	-0.05	-0.01
15	14	-0.05	0.06	0.14	0.02	-0.04	-0.06	0.00	-0.02	-0.05
16	14	0.01	-0.01	0.06	0.02	0.01	-0.06	0.02	0.01	-0.06
17	14	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01
18	14	0.00	0.00	0.04	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01
19	14	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00
20	14	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
21	14	-0.09	0.00	0.20	0.02	0.00	-0.06	-0.05	0.02	0.10
22	14	0.22	-0.38	-0.19	-0.08	0.13	0.08	0.42	-0.45	-0.02
23	14	-0.02	0.05	0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.08	-0.01	-0.06
24	14	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.01
25	14	-0.02	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.02	0.01
26	14	0.05	0.19	0.00	-0.02	-0.05	0.00	0.01	0.11	0.01
27	14	-0.04	0.04	-0.02	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.09	-0.05
28	14	0.01	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
29	14	0.13	0.17	-0.05	-0.04	-0.17	-0.53	-0.52	0.26	-0.07

M6

For this molecule, the frequency calculations could not be performed.

References

- [1] *CRYSTAL09 User's Manual*. R. Dovesi, V. R. Saunders, R. Roetti, R. Orlando, C. M. Zicovich-Wilson, F. Pascale, B. Civalleri, K. Doll, N. M. Harrison, I. J. Bush, P. D'Arco, M. Llunell, **2009**.