

Supporting Material for the manuscript

“Transition State of *N. meningitidis* 5'-Methylthioadenosine Nucleosidase”

Vipender Singh, Minkui Luo, Rosemary L. Brown, Gillina E. Norris, and Vern L. Schramm
Department of Biochemistry, Albert Einstein College of Medicine, 1300 Morris Park Avenue,
Bronx, New York 10461 and Institute of Molecular Biosciences, Massey University, Private Bag
11222, Palmerston North, New Zealand.

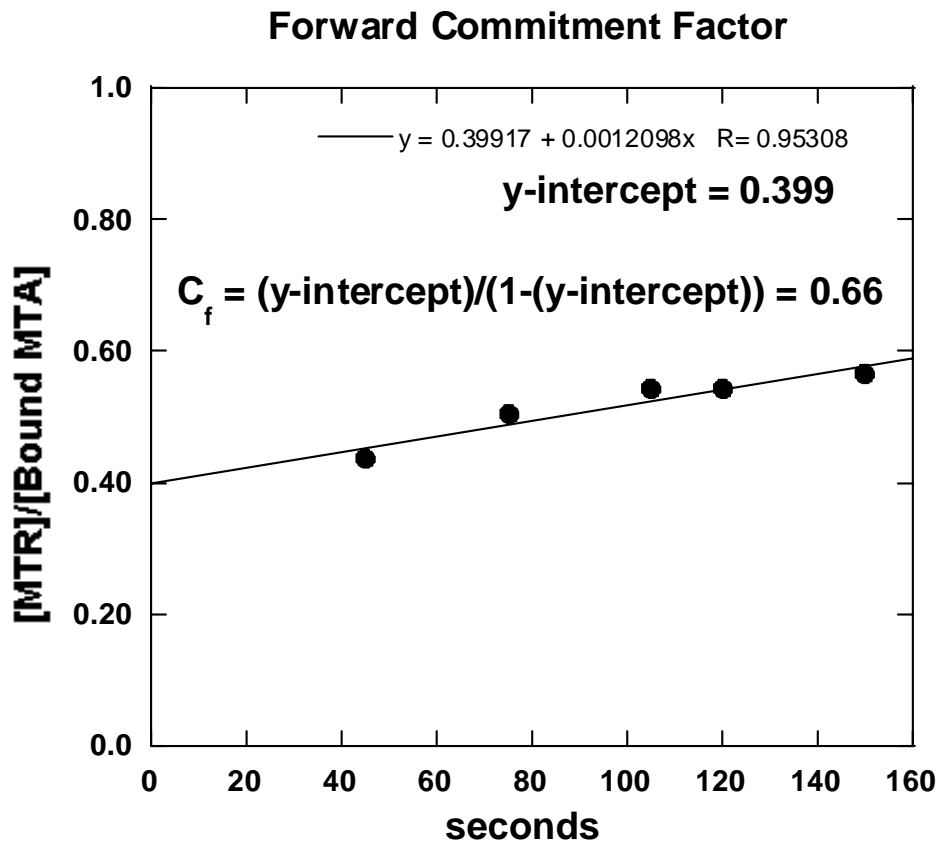
Complete list of authors for Ref. 19

19. M. J. Frisch, G. W.; Trucks, H. B.; Schlegel, G. E.; Scuseria, M. A.; Robb, J. R.;
Cheeseman, V. G.; Zakrzewski, J. A.; Montgomery, Jr. R. E.; Stratmann, J. C.; Burant, S.;
Dapprich, J. M.; Millam, A. D.; Daniels, K. N.; Kudin, M. C.; Strain, O.; Farkas, J.; Tomasi, V.;
Barone, M.; Cossi, R.; Cammi, B.; Mennucci, C.; Pomelli, C.; Adamo, S.; Clifford, J.;
Ochterski, G. A.; Petersson, P. Y.; Ayala, Q.; Cui, K.; Morokuma, N.; Rega, P.; Salvador, J. J.;
Dannenberg, D. K.; Malick, A. D.; Rabuck, K.; Raghavachari, J. B.; Foresman, J.; Cioslowski, J.
V.; Ortiz, A. G.; Baboul, B. B.; Stefanov, G.; Liu, A.; Liashenko, P.; Piskorz, I.; Komaromi, R.;
Gomperts, R. L.; Martin, D. J.; Fox, T.; Keith, M. A.; Al-Laham, C. Y.; Peng, A.; Nanayakkara,
M.; Challacombe, P. M. W.; Gill, B.; Johnson, W.; Chen, M. W.; Wong, J. L.; Andres, C.;
Gonzalez, M.; Head-Gordon, E. S.; Replogle, J. A.; Pople, Gaussian 98 (Gaussian, Inc.,
Pittsburgh, PA, 1998)

Determination of forward commitment factor for *N. meningitides* MTAN

The forward commitment factor for *N. meningitides* MTAN was determined by the isotope trapping method under rapid-mixing pre-steady state conditions.^{10,18} Briefly, 25.1 μL stock solution of 30 μM *N. meningitides* MTAN was pre-mixed with 20.9 μL of 250 μM 1-¹⁴C-MTA (total 100,000 cpm) for 2 ms using a quench flow apparatus (PQF-3, KinTek). Following this equilibration with limited catalytic turnover, a chase solution containing 3 mM MTA in reaction buffer was added rapidly through the third syringe to the final volume of 1 mL. Subsequently, 100 μL aliquots were collected every 15 s for 2.5 min and quenched with 50 μL of 1 N HCl, followed by neutralization with 50 μL of 1 N KOH. The labeled ribose product was purified by acid-washed charcoal-sepharose column and quantified using scintillation counter as described below for KIE determination. The amount of 1-¹⁴C methylthioribose formed after the chase step was corrected for the background as well as for the 1-¹⁴C methylthioribose generated during 2 ms pre-mixing period. The former was determined through control experiments in the absence of enzyme. The latter was estimated on the basis of known k_{cat} values and enzyme concentrations. The amount of MTAN-bound radiolabeled substrate prior to the chase step was calculated on the basis of the concentrations of MTAN and MTA. Substrate (MTA) concentration was approximately 200-fold larger than K_m . The ratio of the amount of radiolabeled product formed divided by the radiolabeled substrate bound to MTAN in the preequilibration step (2 msec) was plotted as a function of time (Figure S1). The forward commitment factor C_f was obtained on the basis of y-axis intercept upon extrapolating the ratio to zero time ($C_f = (\text{intercept}/(1-\text{intercept}))$). The C_f of 0.66 was measured as shown in the figure S1 below.

Figure S1



Assay for measuring kinetic isotope effect for *N. meningitidis* MTAN

Competitive kinetic isotope effects (KIEs) for isotopic substitutions at various positions on the MTA substrate were measured by comparing the relative rate of product formation from pairs of isotopically labeled substrates. Reactions for KIEs measurement contained a mixture of ^3H and ^{14}C labeled substrates with $^3\text{H}:^{14}\text{C}$ in 4:1 ratio to facilitate easy deconvolution of the β emission spectra. The MTAN assay for KIE measurement was performed in triplicates of 1 mL reactions containing 100 mM HEPES buffer pH 7.5, 50 mM KCl, 250 μM MTA (including labeled substrates), and 1 - 5 nM *N. meningitidis* MTAN. After 20-30% completion of the reaction, 750 μL of 1 mL was resolved on charcoal-sepharose (acid-washed powdered charcoal and sepharose in 1:4 ratio made into a slurry in 1 mM MTR and settled in Pasteur pipettes). The remainder of the reaction mixture was allowed to react to completion and then applied to the column. Columns were washed with 2 volumes of 1 mM MTR and radioactive methylthioribose was eluted with 6 volumes of 15 mM MTR containing 50% ethanol. The eluate was mixed with scintillation fluid and counted for at least 3 cycles at 10 minutes per cycle. The ^3H to ^{14}C ratio was determined for partial and complete reactions and the KIEs were corrected to 0% hydrolysis

by the equation

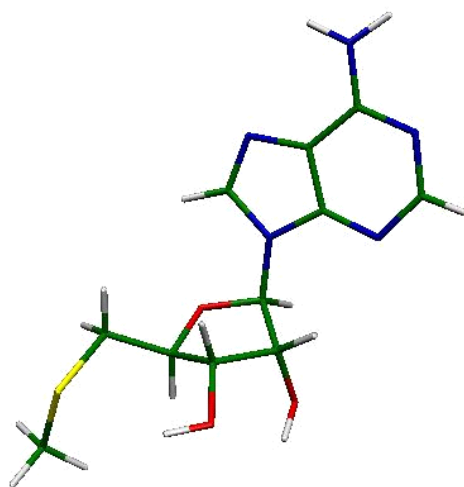
$$KIE = \frac{\ln(1-f)}{\ln\left[(1-f)\frac{R_f}{R_o}\right]}$$

Where f is the fraction of reaction progress and R_f and R_o are ratios of heavy to light isotope at partial and total completion of reaction, respectively.

Geometry of 5'-methylthioadenosine used in KIE calculations

Internal Coordinates

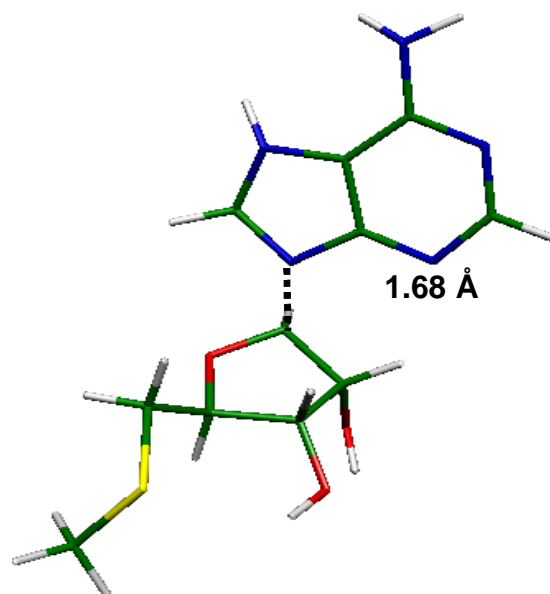
C,0,-0.0120893037,-0.0773276416,-0.0401282096
C,0,-0.0711255381,-0.0707941909,1.4944858241
O,0,1.2647507091,-0.1856944792,1.9598971401
C,0,2.1909774574,-0.1026929086,0.8575556703
C,0,1.3809430601,0.5138442349,-0.2978032309
N,0,-0.6364152082,1.179030849,2.0312859856
C,0,-1.8876233081,1.7094796589,1.7686770698
C,0,-2.0068608936,2.8018997953,2.6346250747
N,0,-0.884361983,2.940425613,3.4301898742
C,0,-0.1064961641,1.9544513191,3.050662074
C,0,-3.2137206244,3.5277035665,2.5520492367
N,0,-4.1564013698,3.1274778023,1.680167837
C,0,-3.8990155655,2.0549824964,0.9139428718
N,0,-2.8038734283,1.2890275129,0.8844722328
N,0,-3.446965192,4.6289072002,3.3089700185
C,0,3.4099052243,0.695851633,1.3038358685
S,0,4.6741724119,0.8745458897,-0.0206438194
C,0,5.488171398,-0.7634766332,0.0464051017
O,0,1.8156806223,0.1290278578,-1.5862584491
O,0,-0.0418360584,-1.4321243756,-0.4513367871
H,0,-4.6934921433,1.7734593574,0.2261496515
H,0,0.8641111155,1.7259195427,3.4628336329
H,0,-0.661728868,-0.9163699376,1.8598181908
H,0,-0.8278612257,0.5013125947,-0.4850872697
H,0,1.3487536434,1.6088611284,-0.1926488685
H,0,2.4809031173,-1.1195651908,0.5646970599
H,0,0.4373478974,-1.4600109216,-1.2945335643
H,0,3.1127676265,1.7157221544,1.5671182315
H,0,3.87517147,0.2458581737,2.1857391275
H,0,6.2869560644,-0.7433271799,-0.697691209
H,0,5.9274943541,-0.9309179618,1.0325388691
H,0,4.7983979348,-1.5735169375,-0.1976759379
H,0,2.7491252556,0.388599165,-1.6617896186
H,0,-2.8259187014,4.8337414995,4.0751037327
H,0,-4.3821482205,5.0039872052,3.3167665043



Geometry of the *Neisseria meningitidis* MTAN's transition state

Internal Coordinates

C,0,-0.0120893037,-0.0773276416,-0.0401282096
C,0,-0.0711255381,-0.0707941909,1.4944858241
O,0,1.2647507091,-0.1856944792,1.9598971401
C,0,2.1909774574,-0.1026929086,0.8575556703
C,0,1.3809430601,0.5138442349,-0.2978032309
N,0,-0.6364152082,1.179030849,2.0312859856
C,0,-1.8876233081,1.7094796589,1.7686770698
C,0,-2.0068608936,2.8018997953,2.6346250747
N,0,-0.884361983,2.940425613,3.4301898742
C,0,-0.1064961641,1.9544513191,3.050662074
N,0,-2.2389757474,1.9976604641,0.3622824506
N,0,-3.9907641683,4.3695800541,3.3289887973
C,0,2.9123705343,1.5894945931,1.4626291148
S,0,4.0387590659,2.3084761823,0.1967439337
C,0,5.4835416613,1.170665209,0.291530358
O,0,1.6807413319,0.6074382463,-1.5471329595
O,0,0.3663670243,-1.4198504411,-0.42305796
H,0,-3.7630978475,2.8128119235,-0.7672223394
H,0,0.425156094,1.496426956,3.9426596868
H,0,-0.7425872451,-0.7998978138,1.995832064
H,0,-1.0107943428,0.0986114354,-0.4665424087
H,0,0.8171222313,1.8915937448,-0.1539642076
H,0,2.7703558152,-0.339700839,0.513348091
H,0,0.8696520207,-1.2923046912,-1.2425141677
H,0,2.2547804417,2.4050505955,1.7774495324
H,0,3.5016861404,1.2840554768,2.331781807
H,0,5.6459060463,0.6811947162,-0.6700103263
H,0,6.3719635211,1.7431912421,0.5629695871
H,0,5.3066813932,0.4074357271,1.0514767695
H,0,2.4838049068,1.1475618428,-1.6168321872
H,0,-3.948486787,4.0782023606,4.2954777597
H,0,-4.9120446315,4.669884087,3.0374494726
H,0,-1.8245922624,2.6223814416,4.7152489348



Normal Modes corresponding to the transition state of *Neisseria meningitides*

MTAN

***** 1 imaginary frequencies (negative Signs) *****

Diagonal vibrational polarizability:

187.2399712 195.5430810 56.7988192

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	--	-169.2830			14.7936			26.9563		
Red. masses	--	1.0314			6.5788			5.4645		
Frc consts	--	0.0174			0.0008			0.0023		
IR Inten	--	0.2473			0.5923			2.8930		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.10	0.01	-0.06	0.02
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.09	0.00	-0.09	0.00
3	8	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.05	-0.01	-0.09	-0.03
4	6	0.00	0.01	0.00	0.02	0.02	0.02	-0.02	-0.03	-0.02
5	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.06	0.06	0.00	-0.03	0.00
6	7	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.11	0.01	-0.09	-0.02
7	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.02	0.01	-0.01	-0.07	-0.04
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.03	0.07	0.03	0.04
9	7	0.00	0.00	0.00	0.02	0.06	0.12	0.14	0.06	0.11
10	6	0.00	0.00	0.00	0.05	0.08	0.16	0.10	-0.01	0.06
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.04	-0.06	0.07	0.08	0.05
12	7	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.11	-0.15	-0.02	0.02	-0.04
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.13	-0.16	-0.09	-0.08	-0.13
14	7	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.09	-0.08	-0.09	-0.13	-0.13
15	7	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.03	-0.06	0.15	0.18	0.15
16	6	0.00	0.01	0.00	0.08	0.03	-0.02	-0.07	-0.01	-0.05
17	16	0.00	-0.02	0.00	0.16	0.02	-0.09	-0.11	0.06	-0.03
18	6	0.00	0.02	0.00	0.11	-0.11	-0.18	-0.08	0.20	0.02
19	8	0.00	0.00	0.00	0.04	0.07	0.06	0.02	0.01	0.01
20	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.10	0.02	-0.06	0.04
21	1	0.00	0.00	0.00	-0.22	-0.18	-0.24	-0.16	-0.13	-0.20
22	1	0.00	0.00	0.00	0.07	0.09	0.24	0.15	-0.05	0.10
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.11	0.00	-0.12	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	0.13	0.02	-0.06	0.03
25	1	0.00	0.00	0.00	0.05	0.09	0.05	0.00	-0.02	-0.01
26	1	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01
27	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.03	0.09	0.03	-0.04	0.04
28	1	0.00	0.01	0.00	0.12	0.06	0.02	-0.09	-0.03	-0.09
29	1	0.00	0.01	0.01	0.05	0.00	-0.05	-0.07	-0.02	-0.06
30	1	0.20	0.30	0.44	0.08	-0.13	-0.18	-0.02	0.24	0.03
31	1	-0.21	0.28	-0.46	0.18	-0.13	-0.25	-0.16	0.24	0.05
32	1	0.00	-0.58	0.01	0.05	-0.15	-0.17	-0.05	0.20	0.02
33	1	0.02	0.00	-0.02	0.07	0.08	0.02	0.01	0.03	-0.01
34	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.05	-0.02	0.19	0.28	0.20
35	1	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.05	-0.14	0.12	0.23	0.12

36	1	0.00	0.00	0.00	0.06	0.10	0.12	0.18	0.14	0.15
			4			5			6	
			A			A			A	
Frequencies	--	45.2048			70.0259				78.5098	
Red. masses	--	3.7010			5.1020				3.5200	
Frc consts	--	0.0045			0.0147				0.0128	
IR Inten	--	1.2136			1.5602				2.4846	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.03	0.01	0.02	0.00	0.03	-0.03	0.04	0.01
2	6	-0.01	0.00	0.04	-0.01	-0.02	0.03	-0.01	0.01	-0.03
3	8	0.00	-0.02	0.03	-0.02	-0.06	-0.07	-0.01	0.00	-0.03
4	6	0.02	-0.04	0.01	0.05	-0.03	-0.12	0.03	-0.04	-0.06
5	6	0.05	-0.07	0.00	0.11	0.00	-0.06	-0.03	0.06	-0.02
6	7	0.01	0.03	0.06	0.04	0.06	0.11	-0.04	0.01	-0.04
7	6	-0.01	0.03	0.04	0.02	0.05	0.08	-0.03	-0.01	-0.03
8	6	-0.01	0.02	0.00	0.01	0.03	0.05	-0.04	-0.02	-0.01
9	7	0.00	0.01	0.00	0.03	0.04	0.08	-0.06	-0.01	-0.02
10	6	0.02	0.02	0.04	0.05	0.06	0.12	-0.07	0.00	-0.04
11	6	-0.04	0.01	-0.05	-0.03	-0.01	-0.03	-0.02	-0.02	0.03
12	7	-0.05	0.02	-0.03	-0.04	-0.01	-0.03	0.00	-0.03	0.02
13	6	-0.03	0.04	0.03	-0.02	0.02	0.03	0.00	-0.03	-0.02
14	7	-0.01	0.05	0.06	0.01	0.05	0.08	-0.01	-0.02	-0.04
15	7	-0.05	-0.02	-0.11	-0.07	-0.06	-0.11	-0.01	-0.01	0.09
16	6	-0.01	-0.05	0.05	0.05	-0.01	-0.18	0.18	-0.04	-0.13
17	16	0.05	-0.06	0.01	-0.13	0.05	-0.03	0.05	-0.06	-0.02
18	6	0.02	0.33	-0.06	-0.01	-0.10	0.21	0.16	0.14	0.19
19	8	0.06	-0.12	-0.07	0.16	0.00	-0.12	-0.09	0.07	0.06
20	8	-0.07	-0.05	-0.03	-0.07	-0.06	0.00	-0.03	0.00	0.05
21	1	-0.04	0.06	0.04	-0.02	0.02	0.03	0.01	-0.04	-0.03
22	1	0.02	0.02	0.05	0.05	0.07	0.13	-0.08	0.01	-0.05
23	1	-0.04	0.02	0.05	-0.11	-0.01	0.09	-0.01	-0.01	-0.02
24	1	-0.02	-0.01	0.03	0.03	0.05	0.11	-0.05	0.06	0.02
25	1	0.09	-0.09	0.06	0.18	0.03	-0.02	-0.03	0.13	-0.07
26	1	0.02	-0.01	-0.02	0.04	-0.03	-0.16	-0.02	-0.14	-0.06
27	1	-0.04	-0.05	-0.07	-0.03	-0.07	-0.05	-0.07	0.00	0.08
28	1	-0.01	-0.09	0.10	0.02	0.04	-0.31	0.19	0.11	-0.25
29	1	-0.06	-0.01	0.06	0.16	-0.06	-0.17	0.33	-0.14	-0.14
30	1	0.18	0.39	-0.22	-0.09	-0.10	0.37	0.20	0.17	0.20
31	1	-0.12	0.39	0.05	0.00	-0.10	0.22	0.04	0.17	0.33
32	1	-0.02	0.47	-0.06	0.16	-0.18	0.19	0.30	0.21	0.17
33	1	0.13	-0.15	-0.11	0.10	0.01	-0.05	-0.04	0.07	0.00
34	1	-0.03	-0.05	-0.13	-0.04	-0.10	-0.14	-0.03	0.03	0.12
35	1	-0.06	-0.03	-0.13	-0.07	-0.10	-0.16	0.00	-0.01	0.11
36	1	0.01	0.00	-0.02	0.05	0.06	0.07	-0.08	-0.03	-0.02
			7			8			9	
			A			A			A	
Frequencies	--	102.7667			130.8691				154.8485	
Red. masses	--	5.8581			4.9391				6.9699	
Frc consts	--	0.0365			0.0498				0.0985	
IR Inten	--	0.4806			5.5837				9.0936	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.10	-0.01	-0.04	-0.06	0.03	0.07	0.00	-0.08	-0.12
2	6	0.01	0.01	-0.06	0.03	0.05	0.03	0.02	0.00	-0.03
3	8	0.06	-0.08	-0.04	0.08	-0.05	0.03	0.03	0.01	0.07
4	6	-0.03	-0.07	0.03	0.06	-0.03	0.05	0.03	-0.10	0.08
5	6	-0.15	0.00	0.01	0.05	-0.04	0.03	-0.05	-0.13	0.00
6	7	0.07	0.08	-0.01	0.04	0.14	0.02	-0.03	-0.05	0.02

7	6	0.10	0.07	0.02	0.02	0.07	-0.04	-0.04	-0.04	0.01
8	6	0.09	0.07	0.08	-0.05	-0.02	-0.09	-0.03	-0.02	0.02
9	7	0.08	0.11	0.13	-0.11	0.00	-0.12	-0.01	-0.03	0.03
10	6	0.07	0.14	0.07	-0.04	0.06	-0.05	-0.01	-0.03	0.03
11	6	0.05	-0.06	-0.01	0.00	-0.03	0.00	-0.03	0.02	0.01
12	7	0.09	-0.08	-0.03	0.03	-0.09	-0.07	-0.05	0.05	0.05
13	6	0.14	-0.02	-0.02	0.05	-0.06	-0.11	-0.07	0.02	0.06
14	7	0.13	0.04	-0.02	0.07	0.05	-0.06	-0.07	-0.03	0.03
15	7	-0.03	-0.16	-0.08	0.03	0.00	0.19	-0.02	0.04	-0.04
16	6	-0.03	-0.05	-0.04	-0.01	-0.01	0.03	0.09	-0.07	-0.02
17	16	-0.03	0.02	-0.05	0.00	0.11	0.01	0.08	0.29	-0.03
18	6	-0.05	0.05	-0.08	-0.02	-0.02	-0.02	0.14	0.00	0.09
19	8	-0.26	-0.01	0.14	0.05	-0.12	-0.05	-0.12	-0.20	0.03
20	8	-0.06	-0.04	0.05	-0.21	-0.11	0.08	0.04	0.03	-0.21
21	1	0.18	-0.04	-0.03	0.07	-0.12	-0.18	-0.08	0.05	0.08
22	1	0.07	0.16	0.11	-0.10	0.11	-0.07	0.00	-0.04	0.06
23	1	-0.03	0.07	-0.06	0.01	0.06	0.04	0.04	0.08	-0.08
24	1	-0.14	0.02	-0.09	-0.12	0.16	0.11	0.01	-0.15	-0.19
25	1	-0.20	0.05	-0.07	0.13	-0.03	0.09	-0.10	-0.16	-0.01
26	1	-0.02	-0.11	0.12	0.08	0.00	0.06	0.01	-0.16	0.08
27	1	-0.14	-0.05	0.11	-0.20	-0.15	0.05	-0.05	-0.15	-0.20
28	1	-0.03	-0.03	-0.07	-0.03	-0.06	0.03	0.09	-0.02	-0.07
29	1	-0.03	-0.09	-0.07	-0.06	-0.01	0.01	0.05	-0.18	-0.13
30	1	-0.02	0.07	-0.08	-0.04	-0.02	0.03	0.06	0.02	0.30
31	1	-0.06	0.07	-0.09	0.03	-0.03	-0.10	0.18	0.02	-0.05
32	1	-0.07	0.04	-0.07	-0.04	-0.10	-0.02	0.22	-0.20	0.08
33	1	-0.23	-0.02	0.11	0.05	-0.18	0.02	-0.17	-0.26	0.16
34	1	-0.06	-0.25	-0.13	0.07	0.30	0.37	-0.04	-0.07	-0.10
35	1	-0.01	-0.26	-0.11	0.02	0.00	0.15	-0.02	0.06	-0.01
36	1	0.09	0.23	0.23	-0.17	-0.24	-0.27	0.02	0.04	0.06

		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies	--	165.4978			195.4004			219.6601		
Red. masses	--	4.7273			4.7855			4.8143		
Frc consts	--	0.0763			0.1077			0.1369		
IR Inten	--	1.7107			32.8845			3.9295		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.09	-0.07	-0.07	-0.08	0.04	0.03	-0.03	0.04	-0.03
2	6	0.09	-0.04	-0.04	-0.16	0.07	0.11	0.02	0.05	-0.02
3	8	0.06	-0.08	-0.05	-0.12	0.06	0.04	0.02	0.05	-0.03
4	6	0.03	-0.06	-0.01	-0.08	0.02	-0.01	0.01	0.04	-0.03
5	6	-0.02	-0.03	-0.01	-0.06	0.03	0.02	-0.02	0.04	-0.04
6	7	0.05	0.12	0.16	0.08	-0.04	0.07	0.08	0.02	0.12
7	6	-0.01	0.07	0.07	0.09	-0.02	0.10	-0.04	-0.13	-0.09
8	6	-0.07	-0.02	-0.05	0.09	-0.06	0.00	-0.06	-0.19	-0.18
9	7	-0.10	-0.01	-0.08	0.06	-0.08	-0.05	-0.02	-0.11	-0.06
10	6	0.02	0.06	0.10	0.06	-0.11	-0.01	0.18	0.12	0.22
11	6	-0.06	0.01	-0.01	0.07	-0.04	-0.04	0.00	-0.05	-0.04
12	7	-0.08	-0.03	-0.06	-0.02	-0.09	-0.12	0.05	0.08	0.13
13	6	-0.05	0.01	-0.02	0.00	-0.05	-0.02	0.02	0.03	0.09
14	7	0.01	0.09	0.10	0.09	0.02	0.15	-0.05	-0.09	-0.04
15	7	-0.01	0.05	0.10	0.16	0.04	-0.04	0.08	0.04	-0.04
16	6	-0.01	-0.05	-0.05	0.00	0.02	-0.03	0.00	0.03	-0.01
17	16	-0.05	-0.05	-0.03	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.00
18	6	-0.05	0.01	-0.04	0.02	0.01	0.03	-0.02	0.00	-0.02
19	8	-0.06	0.01	0.10	-0.07	0.02	0.01	-0.07	0.03	0.00
20	8	0.24	0.05	-0.06	-0.11	0.12	-0.11	-0.09	-0.04	0.01

21	1	-0.07	-0.02	-0.06	-0.06	-0.08	-0.06	0.05	0.11	0.20
22	1	-0.03	0.11	0.10	0.06	-0.14	-0.10	0.17	0.25	0.50
23	1	-0.07	0.09	0.01	-0.12	0.02	0.10	-0.03	0.11	-0.02
24	1	0.12	-0.16	-0.15	-0.02	-0.02	0.06	-0.07	0.11	-0.02
25	1	-0.09	-0.02	-0.09	-0.05	0.03	0.03	-0.03	0.06	-0.06
26	1	0.04	-0.06	0.02	-0.10	-0.02	-0.03	0.01	0.04	-0.01
27	1	0.20	0.08	-0.01	-0.12	-0.02	-0.16	-0.13	-0.09	0.03
28	1	-0.03	-0.06	-0.09	0.03	0.08	-0.04	0.00	0.03	-0.01
29	1	0.00	-0.06	-0.05	0.04	-0.03	-0.05	0.02	0.05	0.01
30	1	-0.02	0.02	-0.06	0.01	0.01	0.04	-0.01	0.00	-0.04
31	1	-0.07	0.02	-0.02	0.01	0.01	0.05	-0.02	0.00	-0.01
32	1	-0.06	0.03	-0.04	0.06	0.01	0.02	-0.04	0.02	-0.01
33	1	-0.08	0.04	0.09	-0.05	0.02	-0.01	-0.07	0.02	0.02
34	1	0.12	0.40	0.29	0.41	0.41	0.14	-0.05	-0.19	-0.15
35	1	-0.07	0.07	-0.01	0.04	0.12	-0.24	0.12	0.22	0.23
36	1	-0.14	-0.33	-0.31	0.01	-0.29	-0.19	0.06	-0.10	-0.13
			13			14			15	
			A			A			A	
Frequencies	--		227.7473			266.6828			274.5780	
Red. masses	--		5.5197			3.7911			1.7807	
Frc consts	--		0.1687			0.1589			0.0791	
IR Inten	--		10.5368			8.3417			7.4127	
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.14	0.04	0.10	0.02	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.15	0.01	0.19	0.07	0.09	0.02	0.00	0.00	0.00
3	8	-0.09	-0.07	0.11	0.11	0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00
4	6	-0.03	-0.09	0.04	0.17	-0.03	-0.03	-0.01	0.00	0.00
5	6	0.04	-0.05	0.13	0.12	0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00
6	7	0.00	0.04	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	0.02
7	6	-0.03	0.02	-0.10	0.02	-0.02	0.04	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.03	0.02	-0.10	0.02	-0.01	0.08	0.03	0.02	0.04
9	7	0.02	0.03	-0.07	-0.05	-0.04	0.03	-0.03	0.05	-0.01
10	6	0.06	0.08	-0.01	-0.10	-0.05	-0.06	-0.01	0.01	0.02
11	6	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.05	0.03	0.03	0.05
12	7	0.12	0.05	0.06	-0.03	0.01	0.05	0.05	0.07	0.11
13	6	0.09	0.01	-0.04	-0.05	-0.03	-0.01	0.00	-0.01	-0.01
14	7	0.01	-0.02	-0.17	-0.05	-0.06	-0.02	-0.04	-0.07	-0.09
15	7	-0.06	-0.06	0.05	0.04	0.05	-0.08	-0.01	-0.09	-0.08
16	6	0.01	-0.07	-0.07	0.11	-0.03	-0.07	-0.01	0.00	0.00
17	16	-0.05	-0.03	-0.05	-0.06	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00
18	6	-0.03	0.00	0.00	-0.14	0.00	-0.11	0.01	0.00	0.01
19	8	0.08	-0.07	0.08	-0.03	-0.05	0.11	0.00	0.00	-0.01
20	8	0.06	0.23	-0.11	-0.06	0.08	-0.07	0.01	0.00	0.01
21	1	0.13	0.03	-0.02	-0.08	-0.06	-0.05	-0.01	-0.03	-0.04
22	1	0.08	0.10	0.08	-0.14	-0.06	-0.16	-0.01	-0.02	-0.04
23	1	-0.10	-0.12	0.22	0.09	0.07	0.02	-0.01	0.00	0.00
24	1	0.13	-0.18	0.14	0.03	0.14	0.06	-0.01	-0.01	-0.01
25	1	0.10	-0.03	0.17	0.15	0.14	-0.05	0.00	-0.01	0.01
26	1	-0.06	-0.12	0.01	0.15	-0.05	-0.05	-0.01	0.00	0.00
27	1	0.07	0.08	-0.19	-0.25	-0.29	-0.03	0.02	0.03	0.01
28	1	0.01	-0.01	-0.14	0.04	-0.02	-0.25	0.00	0.00	0.01
29	1	0.06	-0.16	-0.11	0.23	-0.06	-0.04	-0.02	0.00	0.00
30	1	-0.02	0.01	0.01	-0.09	0.00	-0.20	0.01	0.00	0.01
31	1	-0.05	0.01	0.02	-0.11	0.00	-0.16	0.01	0.00	0.01
32	1	0.00	0.00	-0.01	-0.27	0.02	-0.09	0.02	0.00	0.01
33	1	0.12	-0.06	0.01	-0.07	-0.10	0.22	0.01	-0.01	-0.02
34	1	-0.29	-0.28	-0.04	0.07	-0.14	-0.20	0.39	0.47	0.18

35	1	0.06	-0.10	0.26	0.01	0.10	-0.09	-0.16	-0.12	-0.46
36	1	0.08	0.16	-0.02	-0.08	0.02	0.12	-0.15	-0.41	-0.30
			16			17			18	
			A			A			A	
Frequencies	--	277.2364			307.3678			319.0257		
Red. masses	--	4.3197			2.8761			4.1599		
Frc consts	--	0.1956			0.1601			0.2495		
IR Inten	--	7.0335			3.8610			1.2580		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.08	-0.02	0.01	0.02	0.00	0.01	0.02	-0.03
2	6	-0.02	-0.04	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.02	0.01
3	8	-0.02	-0.04	-0.02	-0.02	0.08	0.04	-0.02	0.08	-0.01
4	6	0.02	-0.04	-0.04	0.04	-0.01	-0.01	0.01	0.06	-0.03
5	6	0.04	-0.03	-0.06	0.03	0.01	0.00	0.00	0.03	-0.04
6	7	0.00	-0.01	0.01	-0.05	-0.11	-0.09	0.09	-0.01	0.13
7	6	-0.01	0.02	0.00	-0.05	-0.05	-0.07	0.03	0.05	0.10
8	6	-0.01	0.04	-0.01	-0.03	-0.01	-0.08	0.06	0.10	0.04
9	7	0.02	0.02	-0.02	0.10	0.08	0.04	0.11	-0.09	-0.15
10	6	0.03	-0.01	0.00	0.08	0.00	0.02	0.12	-0.14	-0.03
11	6	-0.01	0.02	0.00	-0.04	-0.01	-0.06	0.02	0.10	0.03
12	7	0.01	0.02	0.00	-0.02	-0.01	-0.04	0.03	0.08	0.01
13	6	0.00	0.01	-0.01	0.02	0.07	0.07	-0.08	-0.03	-0.07
14	7	-0.01	0.01	-0.02	0.01	0.05	0.07	-0.06	-0.03	-0.04
15	7	-0.06	-0.04	0.04	-0.07	-0.09	0.09	-0.16	-0.10	0.11
16	6	-0.01	-0.06	0.07	0.11	-0.01	-0.05	0.02	0.06	-0.02
17	16	0.04	0.02	0.06	-0.02	0.00	0.04	-0.01	-0.01	0.00
18	6	0.00	0.01	-0.01	-0.08	0.00	-0.06	-0.01	0.00	-0.01
19	8	0.08	0.25	0.17	-0.01	-0.04	-0.01	-0.09	-0.05	-0.03
20	8	-0.13	-0.11	-0.22	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.03	0.03
21	1	0.00	0.01	-0.02	0.07	0.15	0.19	-0.17	-0.11	-0.19
22	1	0.04	-0.03	-0.01	0.17	-0.05	0.12	0.13	-0.19	-0.13
23	1	-0.04	-0.05	0.04	0.09	-0.05	-0.05	-0.04	0.09	0.01
24	1	0.05	-0.06	0.04	0.01	0.04	0.02	-0.01	0.06	-0.02
25	1	-0.10	0.01	-0.20	0.04	0.03	0.00	0.00	0.04	-0.05
26	1	0.02	-0.02	-0.08	0.01	-0.06	-0.05	0.01	0.07	-0.05
27	1	-0.20	-0.44	-0.29	-0.07	-0.08	0.05	-0.07	-0.08	0.08
28	1	-0.03	-0.16	0.14	0.09	0.09	-0.21	0.02	0.07	-0.03
29	1	-0.10	0.03	0.11	0.26	-0.09	-0.05	0.05	0.06	0.00
30	1	0.02	0.02	-0.01	-0.05	0.00	-0.13	-0.01	0.00	-0.02
31	1	0.00	0.02	-0.06	-0.05	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.00
32	1	-0.05	-0.02	0.00	-0.19	0.01	-0.05	-0.01	0.01	-0.01
33	1	-0.14	0.46	0.19	-0.03	-0.08	0.06	-0.09	-0.13	0.06
34	1	-0.08	0.05	0.10	0.09	0.49	0.40	-0.45	-0.26	0.07
35	1	-0.04	-0.12	0.02	-0.11	-0.17	-0.09	0.02	-0.37	0.23
36	1	0.03	-0.02	-0.07	0.12	-0.04	-0.10	0.17	-0.02	-0.15
			19			20			21	
			A			A			A	
Frequencies	--	333.9578			365.1176			373.2098		
Red. masses	--	2.6583			6.7867			3.8975		
Frc consts	--	0.1747			0.5331			0.3198		
IR Inten	--	6.0552			13.3398			11.2264		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.04	-0.06	-0.03	0.07	-0.09	-0.07	-0.07	0.02	0.00
2	6	-0.05	-0.01	-0.01	0.11	0.05	0.00	0.08	0.00	-0.04
3	8	-0.06	0.03	0.02	-0.01	0.27	0.24	0.21	-0.18	-0.01
4	6	-0.05	-0.07	0.01	-0.05	0.07	0.19	-0.06	0.04	0.16
5	6	-0.09	-0.03	-0.01	-0.02	-0.10	0.09	-0.11	0.03	0.09

6	7	0.01	0.03	0.03	-0.03	0.01	-0.01	0.04	-0.02	0.00
7	6	0.02	0.03	0.03	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.03	0.00
8	6	0.01	0.02	0.03	0.00	0.02	0.01	0.01	-0.02	0.00
9	7	-0.04	-0.03	-0.04	-0.03	0.01	-0.01	0.04	-0.02	0.01
10	6	-0.01	0.02	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.02	-0.04	-0.01
11	6	0.02	0.01	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.00
12	7	0.02	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.04	0.02	0.01
13	6	0.01	-0.03	-0.04	0.03	-0.01	-0.02	-0.05	0.01	0.03
14	7	0.01	0.00	-0.02	0.03	0.01	-0.01	-0.05	-0.02	0.03
15	7	0.03	0.03	-0.03	0.02	0.03	-0.02	-0.05	-0.03	0.04
16	6	0.15	-0.07	-0.04	0.01	0.09	-0.09	0.02	0.10	-0.04
17	16	0.01	0.04	0.11	-0.09	-0.07	-0.16	0.00	-0.03	-0.01
18	6	-0.08	0.01	-0.08	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01
19	8	0.04	0.07	-0.07	0.08	0.01	0.11	0.05	0.07	-0.07
20	8	0.03	-0.06	0.03	-0.04	-0.24	-0.05	-0.10	0.09	-0.10
21	1	-0.01	-0.07	-0.09	0.03	-0.02	-0.04	-0.07	0.03	0.04
22	1	-0.03	0.04	0.01	-0.02	0.02	0.02	0.02	-0.05	-0.04
23	1	-0.07	0.05	-0.01	0.19	0.17	-0.09	0.10	0.03	-0.06
24	1	-0.04	-0.09	-0.08	-0.01	-0.03	-0.14	-0.09	0.01	-0.07
25	1	-0.10	-0.07	0.01	-0.17	-0.26	0.09	-0.13	-0.09	0.17
26	1	-0.11	-0.19	0.01	-0.05	0.05	0.20	0.00	0.01	0.39
27	1	0.26	0.34	-0.04	0.18	0.01	-0.16	0.10	0.22	-0.24
28	1	0.15	0.14	-0.28	0.05	0.29	-0.22	0.08	0.34	-0.17
29	1	0.40	-0.24	-0.06	0.13	-0.15	-0.23	0.22	-0.10	-0.11
30	1	-0.04	0.01	-0.17	-0.03	0.00	0.07	0.00	-0.01	-0.03
31	1	-0.03	0.00	-0.18	-0.06	0.00	0.14	0.00	-0.01	0.02
32	1	-0.27	-0.01	-0.05	0.15	0.03	0.00	0.00	0.03	-0.01
33	1	0.07	0.14	-0.20	0.07	0.12	-0.01	0.20	0.12	-0.33
34	1	-0.03	-0.17	-0.13	0.02	-0.07	-0.08	-0.06	0.08	0.11
35	1	0.04	0.05	0.03	0.02	0.04	-0.02	-0.03	-0.10	0.01
36	1	-0.04	-0.01	-0.01	-0.05	-0.03	-0.02	0.05	0.01	0.02

		22			23			24		
		A			A			A		
Frequencies	--	395.3072			406.2085			421.1467		
Red. masses	--	1.5606			2.3077			2.3574		
Frc consts	--	0.1437			0.2244			0.2463		
IR Inten	--	66.6300			78.8943			43.9891		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.03	0.00	0.06	-0.02	0.04
2	6	-0.01	0.06	0.02	0.00	-0.02	0.02	-0.02	-0.08	0.04
3	8	0.02	0.03	0.00	-0.03	-0.02	-0.01	-0.03	-0.08	-0.03
4	6	0.06	-0.04	-0.04	-0.04	0.04	0.02	0.00	0.11	-0.03
5	6	0.02	0.00	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.06	0.02	-0.01
6	7	0.04	0.02	0.04	0.05	0.06	0.11	-0.05	-0.05	-0.06
7	6	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.01	-0.03	0.00	0.01	0.01
8	6	-0.01	-0.03	-0.04	-0.02	-0.03	-0.07	0.01	0.03	0.03
9	7	0.04	0.04	0.04	0.04	0.16	0.11	-0.04	0.02	-0.02
10	6	-0.02	-0.05	-0.04	-0.08	-0.09	-0.03	0.01	0.05	0.05
11	6	-0.01	-0.02	-0.03	-0.01	-0.04	-0.06	0.01	0.01	0.02
12	7	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.02
13	6	-0.01	0.01	0.02	0.03	0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.01
14	7	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	0.02	0.01	0.01
15	7	0.00	-0.02	0.01	0.04	-0.01	-0.02	0.01	0.02	-0.01
16	6	-0.02	-0.06	0.02	0.02	0.06	-0.02	0.02	0.15	-0.03
17	16	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.02	0.00	0.03
18	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01
19	8	-0.03	0.00	0.05	-0.01	-0.01	-0.03	-0.07	-0.07	0.06

20	8	-0.04	-0.02	0.01	0.03	-0.02	-0.01	-0.05	-0.06	-0.06
21	1	0.01	0.04	0.06	0.06	0.07	0.09	0.01	-0.02	-0.03
22	1	-0.03	-0.10	-0.18	-0.10	-0.24	-0.42	0.04	0.05	0.12
23	1	-0.01	0.08	0.02	-0.08	0.03	0.05	0.00	-0.16	0.06
24	1	-0.01	0.03	0.00	0.02	-0.04	0.00	0.12	-0.03	0.15
25	1	0.03	0.06	-0.07	-0.04	-0.04	0.02	0.03	0.02	-0.04
26	1	0.06	-0.02	-0.07	-0.04	0.04	0.03	0.04	0.21	-0.06
27	1	0.47	0.65	-0.22	-0.17	-0.27	0.09	0.41	0.41	-0.32
28	1	-0.05	-0.19	0.08	0.04	0.16	-0.07	0.04	0.23	-0.06
29	1	-0.13	0.03	0.03	0.12	0.00	-0.02	0.13	0.13	0.00
30	1	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.01	-0.04
31	1	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.01	-0.02
32	1	0.02	-0.01	0.00	-0.03	0.01	0.00	-0.04	0.01	0.00
33	1	0.20	0.03	-0.27	-0.15	-0.03	0.17	-0.06	-0.16	0.15
34	1	-0.03	0.06	0.06	-0.15	-0.14	-0.05	-0.07	-0.16	-0.10
35	1	0.01	0.02	0.08	0.12	0.19	0.36	0.05	0.04	0.08
36	1	0.04	0.00	0.02	-0.08	-0.35	-0.23	-0.12	-0.26	-0.19
			25			26			27	
			A			A			A	
Frequencies	--	427.0065			460.5979			527.5848		
Red. masses	--	1.5923			1.1672			6.9412		
Frc consts	--	0.1711			0.1459			1.1383		
IR Inten	--	101.3180			54.1080			5.3483		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.03	0.03	0.00	0.02	-0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.01
2	6	0.02	0.02	-0.03	-0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.01	0.00
3	8	0.02	0.03	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01
4	6	0.02	-0.05	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00
5	6	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
6	7	-0.04	-0.07	-0.07	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.04	0.03
7	6	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.01	0.00	0.08	-0.13	0.03
8	6	0.05	0.03	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.09
9	7	-0.02	0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.12	0.15
10	6	0.03	0.03	0.06	-0.01	0.00	0.00	-0.10	-0.05	0.12
11	6	0.04	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.11	0.17	-0.13
12	7	-0.02	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.17	0.13	-0.20
13	6	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.15	0.11	-0.08
14	7	-0.01	-0.01	0.04	0.01	0.00	-0.01	0.22	-0.18	-0.04
15	7	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.23	0.20	0.03
16	6	-0.01	-0.07	0.02	0.00	0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.00
17	16	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.02	0.02	0.00	-0.04	-0.02	0.05	-0.01	0.01	-0.02
20	8	-0.01	0.05	0.02	0.02	-0.02	-0.02	-0.02	0.01	0.00
21	1	-0.05	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.03	0.24	0.05
22	1	0.07	-0.02	0.06	-0.01	0.00	0.00	-0.17	-0.03	0.02
23	1	0.07	-0.01	-0.06	-0.02	-0.02	0.01	0.01	-0.01	0.00
24	1	-0.05	0.04	-0.03	0.03	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.02
25	1	0.02	0.03	0.01	0.00	0.02	-0.03	0.00	0.02	0.01
26	1	0.01	-0.08	0.01	0.00	0.05	-0.04	0.00	-0.02	0.01
27	1	-0.08	-0.02	0.05	-0.20	-0.27	0.10	0.01	0.03	-0.02
28	1	-0.03	-0.14	0.05	0.00	0.05	-0.02	0.00	-0.03	0.01
29	1	-0.09	-0.03	0.01	0.03	0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
31	1	-0.01	0.00	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.13	0.05	-0.18	0.57	-0.01	-0.73	-0.01	-0.01	0.01

34	1	-0.23	-0.28	-0.11	0.02	0.01	-0.01	-0.32	0.20	0.04
35	1	0.14	0.03	0.31	-0.01	0.02	-0.02	-0.20	-0.14	-0.21
36	1	-0.19	-0.59	-0.42	0.01	0.04	0.02	-0.21	-0.36	0.06
			28				29			30
			A				A			A
Frequencies	--	546.4439			560.4285			584.7210		
Red. masses	--	3.1701			4.8263			2.2101		
Frc consts	--	0.5577			0.8931			0.4452		
IR Inten	--	183.0137			20.1119			140.6708		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.02	-0.02	0.02	0.01	0.03	0.03	-0.02	0.03
2	6	-0.06	0.05	0.01	0.06	-0.06	0.04	0.00	-0.03	0.06
3	8	-0.02	0.00	-0.04	0.03	-0.01	0.09	0.02	-0.02	0.10
4	6	-0.04	0.02	-0.01	0.07	-0.02	0.02	0.05	-0.01	0.02
5	6	0.01	-0.05	0.01	-0.02	0.08	-0.04	-0.01	0.06	-0.05
6	7	0.06	0.05	-0.05	-0.06	-0.03	0.09	-0.03	-0.03	-0.03
7	6	0.09	-0.01	0.03	-0.11	0.07	0.00	0.03	0.04	0.06
8	6	0.14	0.04	0.14	-0.01	0.20	0.15	-0.02	-0.03	-0.01
9	7	-0.05	-0.08	-0.02	0.02	-0.02	-0.11	-0.01	-0.01	0.03
10	6	-0.03	0.08	-0.05	0.07	-0.09	0.04	-0.02	0.01	-0.01
11	6	0.00	-0.06	-0.14	-0.11	-0.10	-0.03	-0.03	0.00	-0.04
12	7	-0.07	0.03	-0.06	-0.01	-0.17	-0.04	0.04	0.06	0.06
13	6	-0.03	0.11	0.10	0.16	0.03	0.13	-0.02	-0.03	-0.09
14	7	-0.09	-0.09	-0.06	-0.03	-0.04	-0.17	0.04	0.01	0.03
15	7	0.04	-0.09	0.01	0.01	0.09	-0.01	-0.01	-0.07	-0.08
16	6	-0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.03	0.02	0.02	-0.01	0.02
17	16	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.02
18	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
19	8	0.04	-0.03	0.05	-0.08	0.05	-0.11	-0.07	0.04	-0.10
20	8	0.03	-0.03	0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.01	-0.02	-0.02
21	1	0.02	0.27	0.31	0.40	0.22	0.41	-0.11	-0.13	-0.23
22	1	-0.08	0.20	0.09	0.12	-0.14	0.06	0.00	0.06	0.12
23	1	-0.05	0.02	0.01	0.04	0.01	0.03	0.06	-0.03	0.03
24	1	0.00	-0.04	-0.04	0.03	0.02	0.07	0.08	-0.03	0.11
25	1	0.01	-0.07	0.03	-0.04	0.11	-0.08	-0.04	0.08	-0.09
26	1	-0.03	0.04	-0.02	0.06	-0.05	0.05	0.05	-0.02	0.04
27	1	-0.02	-0.03	0.06	0.02	0.00	-0.06	0.01	-0.06	-0.03
28	1	0.01	0.09	-0.03	-0.01	-0.12	0.06	0.00	-0.08	0.04
29	1	0.05	-0.01	-0.02	-0.07	0.03	0.03	-0.04	0.03	0.02
30	1	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01
31	1	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01
32	1	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.01	0.01	0.04	-0.04	-0.02	-0.06	-0.03	-0.03	-0.06
34	1	-0.14	0.35	0.31	0.15	0.05	-0.06	-0.08	0.37	0.22
35	1	0.15	0.16	0.48	-0.12	0.35	-0.03	0.06	0.46	0.56
36	1	-0.13	0.01	0.15	0.08	0.02	-0.14	0.02	0.11	0.11
			31				32			33
			A				A			A
Frequencies	--	594.1399			631.6526			639.5570		
Red. masses	--	3.0565			5.7610			5.3126		
Frc consts	--	0.6357			1.3543			1.2803		
IR Inten	--	39.2051			56.8790			179.0108		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.05	-0.05	0.03	0.01	-0.04	-0.02	-0.07	-0.02	-0.15
2	6	-0.04	0.02	0.13	-0.14	0.13	0.11	-0.23	0.29	0.12
3	8	0.02	-0.04	0.13	0.03	-0.02	0.03	0.12	-0.13	0.01
4	6	0.06	0.00	0.02	0.01	0.01	-0.01	0.07	0.02	0.00

5	6	-0.01	0.06	-0.07	0.00	-0.02	-0.05	0.02	-0.10	-0.09
6	7	0.02	0.04	-0.01	0.21	-0.01	-0.14	-0.13	-0.03	0.02
7	6	0.01	-0.07	-0.05	0.12	0.01	-0.12	-0.14	-0.07	0.01
8	6	0.06	-0.03	-0.03	-0.01	-0.12	0.09	-0.03	0.08	-0.01
9	7	-0.05	0.02	0.01	0.08	-0.08	0.09	0.02	0.04	-0.07
10	6	-0.05	0.07	-0.03	0.11	0.02	-0.07	0.00	-0.01	0.00
11	6	0.11	0.03	0.00	-0.15	-0.03	0.16	0.02	0.08	0.06
12	7	-0.03	0.03	-0.08	-0.20	-0.09	0.13	0.09	-0.03	-0.06
13	6	-0.05	0.05	0.05	0.02	0.07	-0.06	0.04	-0.09	0.04
14	7	-0.05	-0.02	0.02	0.02	0.12	-0.08	0.04	-0.07	0.07
15	7	0.05	-0.02	0.08	-0.14	0.10	0.00	-0.02	0.00	-0.05
16	6	0.02	0.00	0.02	0.01	0.02	0.00	-0.02	0.10	-0.02
17	16	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.01
18	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01
19	8	-0.10	0.06	-0.12	-0.02	0.02	-0.02	0.05	0.01	0.04
20	8	0.04	-0.06	-0.02	0.05	-0.05	0.01	0.08	-0.06	0.05
21	1	-0.06	0.12	0.14	0.20	0.02	-0.10	-0.04	-0.07	0.05
22	1	-0.08	0.10	-0.02	0.01	0.09	-0.13	0.13	-0.08	0.14
23	1	0.01	0.02	0.09	0.01	0.03	0.04	-0.18	0.46	0.01
24	1	0.14	-0.09	0.14	0.07	-0.10	0.02	-0.06	-0.07	-0.18
25	1	-0.07	0.08	-0.13	-0.03	-0.03	-0.07	0.00	-0.10	-0.11
26	1	0.07	-0.01	0.04	0.04	0.04	0.02	0.15	0.15	0.05
27	1	-0.01	-0.12	0.01	-0.04	-0.06	0.10	-0.11	0.05	0.28
28	1	0.00	-0.07	0.05	0.01	0.04	0.00	-0.01	0.14	-0.05
29	1	-0.04	0.04	0.02	0.02	0.01	0.00	0.04	0.07	-0.02
30	1	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01
31	1	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
32	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01
33	1	-0.05	-0.03	-0.08	-0.05	0.03	0.00	-0.08	0.14	0.03
34	1	0.00	-0.30	-0.09	-0.02	-0.07	-0.13	0.02	0.09	0.00
35	1	0.09	-0.61	-0.41	-0.24	0.26	-0.04	-0.03	0.19	0.11
36	1	-0.12	-0.01	0.05	-0.02	-0.54	-0.21	0.07	0.11	-0.07

		34			35			36		
		A			A			A		
Frequencies	--	663.3717			689.1671			718.5800		
Red. masses	--	6.1039			5.4276			6.2331		
Frc consts	--	1.5826			1.5188			1.8963		
IR Inten	--	73.8797			3.4043			9.2607		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.01	0.04	-0.02	-0.01	-0.01	-0.15	-0.05	-0.09
2	6	0.06	-0.06	-0.02	-0.03	0.00	-0.01	-0.04	-0.04	-0.05
3	8	-0.03	0.03	-0.02	-0.01	-0.03	-0.05	0.00	-0.05	0.13
4	6	-0.03	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.01	0.10	0.01	-0.03
5	6	-0.01	0.03	0.03	-0.01	-0.01	0.01	0.04	-0.08	-0.11
6	7	0.07	0.05	0.10	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.14	0.06
7	6	-0.14	-0.17	-0.27	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.10	-0.05
8	6	0.02	0.02	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.02
9	7	-0.03	-0.08	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.12	0.10
10	6	-0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.16	0.21
11	6	0.14	0.25	0.32	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.04	-0.04
12	7	-0.07	-0.07	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.07	-0.02
13	6	0.04	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.17	-0.14
14	7	0.04	0.06	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.24	-0.14
15	7	-0.03	-0.14	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.10	0.03
16	6	0.00	-0.03	0.00	0.19	0.02	0.14	0.01	0.11	-0.02
17	16	0.00	0.00	0.00	0.13	0.01	-0.15	0.00	-0.01	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	-0.43	0.00	0.21	0.00	0.00	0.00

19	8	-0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.01	0.02	0.04	0.00	0.05
20	8	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.09	0.05
21	1	0.06	0.11	0.06	0.00	0.00	0.01	0.14	0.13	-0.18
22	1	-0.08	0.05	0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.13	-0.18	0.05
23	1	0.00	-0.08	0.03	-0.06	-0.01	0.00	0.03	0.15	-0.18
24	1	0.02	0.03	0.05	-0.01	-0.02	-0.02	-0.20	-0.04	-0.14
25	1	-0.01	0.02	0.04	-0.01	-0.04	0.04	0.09	0.00	-0.13
26	1	-0.05	-0.05	0.00	-0.04	-0.02	-0.02	0.15	0.16	-0.11
27	1	0.03	-0.02	-0.08	-0.01	0.01	0.02	-0.09	0.16	0.15
28	1	0.00	-0.04	0.00	0.26	0.00	0.35	-0.01	0.04	0.00
29	1	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.12	0.13	-0.01	0.15	0.01
30	1	0.00	0.00	0.00	-0.35	0.04	0.17	-0.02	-0.01	0.00
31	1	0.00	0.00	0.00	-0.36	-0.02	0.17	0.01	-0.01	0.00
32	1	-0.01	0.00	0.00	-0.29	0.01	0.19	0.00	0.00	0.00
33	1	0.02	-0.04	-0.01	0.04	0.00	-0.02	-0.07	0.15	0.01
34	1	0.02	0.27	0.13	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.09	0.05
35	1	0.07	0.34	0.50	0.00	0.01	0.00	0.19	-0.26	-0.01
36	1	0.00	0.12	0.14	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.13
			37			38			39	
			A			A			A	
Frequencies	--	743.4397			748.0330			775.0346		
Red. masses	--	5.7825			5.7383			9.8769		
Frc consts	--	1.8830			1.8918			3.4955		
IR Inten	--	17.3474			10.2126			22.8792		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.08	0.05	0.00	0.20	0.12	0.02	0.03	0.03	-0.01
2	6	-0.08	0.07	0.03	-0.04	0.20	0.12	-0.01	0.03	0.01
3	8	0.01	-0.03	-0.17	0.08	0.04	-0.17	0.01	0.00	-0.03
4	6	-0.05	0.05	0.05	-0.10	-0.04	0.06	-0.01	0.00	0.02
5	6	-0.02	0.05	0.05	-0.03	0.10	0.12	0.00	0.02	0.02
6	7	-0.02	-0.06	0.01	-0.04	-0.11	0.01	-0.08	-0.07	-0.07
7	6	-0.03	0.02	-0.01	-0.06	0.03	-0.03	0.21	0.28	0.39
8	6	-0.01	0.02	0.01	-0.01	0.03	0.03	-0.17	-0.23	-0.29
9	7	-0.03	-0.02	0.02	-0.04	-0.05	0.04	0.02	0.02	0.04
10	6	-0.02	-0.05	0.06	-0.04	-0.10	0.11	-0.01	-0.03	0.02
11	6	0.01	-0.02	-0.02	0.01	-0.04	-0.05	0.13	0.20	0.26
12	7	0.02	0.02	-0.01	0.03	0.04	0.00	-0.11	-0.12	-0.18
13	6	0.01	0.03	-0.04	0.01	0.06	-0.08	0.09	0.16	0.13
14	7	-0.01	0.06	-0.03	-0.02	0.13	-0.05	-0.08	-0.15	-0.21
15	7	0.04	-0.02	0.01	0.07	-0.04	0.02	0.01	-0.06	-0.04
16	6	0.29	-0.07	0.32	-0.18	-0.13	-0.14	-0.01	-0.02	0.00
17	16	-0.17	0.01	-0.07	0.09	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
18	6	0.16	0.00	-0.11	-0.07	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	-0.01	0.01	-0.04	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00
20	8	0.02	-0.06	-0.02	0.03	-0.13	-0.04	0.00	-0.02	-0.01
21	1	0.03	0.01	-0.05	0.05	0.02	-0.12	0.15	0.23	0.23
22	1	-0.01	-0.07	0.04	-0.01	-0.12	0.16	0.04	-0.04	0.12
23	1	-0.13	-0.04	0.11	-0.06	0.03	0.20	-0.01	0.01	0.02
24	1	0.11	0.03	0.04	0.23	0.13	0.07	0.02	0.04	-0.01
25	1	-0.06	-0.05	0.10	-0.10	-0.02	0.15	0.00	0.00	0.03
26	1	-0.11	-0.09	0.08	-0.11	-0.17	0.23	-0.02	-0.02	0.04
27	1	0.02	-0.05	-0.02	0.08	-0.13	-0.09	0.01	-0.01	-0.01
28	1	0.35	0.05	0.34	-0.16	-0.04	-0.20	-0.01	0.01	-0.02
29	1	0.26	0.01	0.37	-0.10	-0.28	-0.22	0.00	-0.05	-0.02
30	1	0.13	0.01	-0.02	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
31	1	0.05	0.02	0.00	-0.05	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00
32	1	0.22	0.00	-0.12	-0.09	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00

33	1	0.07	-0.08	0.00	0.07	-0.16	0.03	0.01	-0.03	0.01
34	1	0.02	-0.02	0.01	0.04	-0.06	0.01	0.05	0.00	0.00
35	1	0.04	-0.06	-0.01	0.08	-0.12	-0.03	0.05	0.04	0.14
36	1	0.01	0.02	0.02	0.01	-0.01	0.03	0.14	0.12	-0.01
			40			41			42	
			A			A			A	
Frequencies	--	797.0341			816.7617			823.3739		
Red. masses	--	4.3847			1.7413			2.0085		
Frc consts	--	1.6411			0.6844			0.8022		
IR Inten	--	26.2582			62.0335			4.0604		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	-0.18	0.17	0.00	0.04	-0.04	-0.04	0.00	-0.04
2	6	0.15	0.05	0.21	0.00	-0.02	-0.04	-0.04	0.01	-0.04
3	8	0.09	0.12	-0.14	-0.03	-0.03	0.02	-0.03	-0.02	0.02
4	6	0.04	0.03	-0.15	-0.01	0.00	0.02	0.07	-0.01	-0.03
5	6	-0.16	-0.20	0.03	0.02	0.04	0.01	-0.06	0.09	0.17
6	7	-0.04	-0.02	0.00	-0.04	0.06	0.05	0.00	0.00	-0.01
7	6	-0.02	0.01	0.01	-0.03	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
9	7	-0.01	0.01	0.03	0.05	-0.02	0.07	0.01	-0.01	0.00
10	6	-0.02	-0.04	-0.06	0.00	-0.07	-0.17	0.01	0.01	0.01
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
12	7	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00
13	6	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
14	7	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
15	7	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
16	6	0.05	0.07	-0.04	0.00	-0.01	0.00	0.09	0.07	-0.11
17	16	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.02
18	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
19	8	-0.02	0.01	-0.04	0.01	0.00	0.01	0.03	-0.01	-0.01
20	8	-0.01	0.06	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.03	-0.06	-0.04
21	1	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
22	1	0.07	0.11	0.45	0.14	0.26	0.85	-0.01	-0.03	-0.09
23	1	0.15	-0.10	0.28	-0.08	0.08	-0.02	-0.05	0.08	-0.06
24	1	-0.17	-0.22	-0.08	0.00	0.05	-0.04	-0.05	-0.08	-0.17
25	1	-0.19	-0.19	0.00	0.04	0.04	0.02	0.01	0.07	0.25
26	1	0.03	-0.04	-0.07	-0.02	-0.01	-0.01	-0.05	-0.28	0.01
27	1	0.01	-0.11	-0.08	-0.01	0.03	0.02	0.01	-0.01	0.00
28	1	0.02	-0.12	0.11	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.43	0.27
29	1	-0.11	0.29	0.06	0.00	-0.01	0.00	-0.40	0.48	-0.01
30	1	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.01	-0.09
31	1	0.02	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.05	0.01	-0.08
32	1	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.01	0.03
33	1	-0.13	0.17	-0.11	0.02	-0.03	0.02	0.06	-0.09	0.07
34	1	0.01	-0.03	-0.01	0.02	-0.08	-0.03	0.00	0.00	0.00
35	1	0.02	-0.02	-0.01	0.02	-0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00
36	1	-0.04	-0.07	-0.01	-0.07	-0.28	-0.04	0.01	0.00	0.00
			43			44			45	
			A			A			A	
Frequencies	--	882.9053			908.0130			926.1346		
Red. masses	--	6.0751			4.2362			2.0327		
Frc consts	--	2.7902			2.0578			1.0272		
IR Inten	--	129.2362			14.9459			4.2106		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.03	0.15	0.08	-0.06
2	6	-0.07	-0.02	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
3	8	0.02	0.02	0.03	0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.02	0.00

4	6	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.09
5	6	0.01	0.03	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.11	-0.09
6	7	0.29	-0.13	-0.04	0.16	-0.15	0.07	0.00	0.01	0.00
7	6	0.01	0.05	0.00	0.13	-0.07	-0.03	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.05	-0.07	0.02	0.07	-0.03	0.00	0.00	0.00
9	7	-0.11	0.03	0.07	-0.15	0.24	-0.12	0.00	-0.01	0.00
10	6	-0.06	-0.04	-0.03	-0.10	-0.09	0.00	0.01	0.01	0.00
11	6	0.02	0.03	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
12	7	0.25	-0.03	-0.12	-0.14	-0.02	0.09	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	-0.22	0.18	0.01	0.06	-0.06	0.00	0.00	0.00
14	7	-0.24	0.15	0.00	0.12	-0.10	0.01	0.00	0.00	0.00
15	7	-0.10	0.07	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
16	6	0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.07	0.03	-0.07
17	16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
18	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.04
19	8	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.01	-0.06	0.06	0.06
21	1	0.00	-0.26	0.14	0.04	0.08	-0.03	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.20	0.30	0.43	0.09	0.00	0.66	-0.01	0.01	-0.04
23	1	0.16	-0.18	-0.12	0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.17	0.09
24	1	0.03	-0.02	0.03	0.02	0.00	-0.01	0.17	0.24	0.17
25	1	0.03	0.02	0.03	0.01	-0.01	0.01	-0.31	-0.37	-0.16
26	1	-0.01	-0.03	0.04	-0.01	-0.01	0.02	-0.06	-0.11	0.10
27	1	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.02	0.02	-0.02	0.03	0.01
28	1	0.01	-0.04	0.04	0.01	-0.02	0.03	0.10	-0.17	0.25
29	1	-0.05	0.04	-0.02	-0.04	0.01	-0.02	-0.31	0.14	-0.17
30	1	0.02	0.00	-0.03	0.02	0.00	-0.02	0.14	-0.01	-0.18
31	1	0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.02	0.05	0.03	-0.15
32	1	-0.04	0.00	0.01	-0.04	0.00	0.01	-0.32	0.02	0.09
33	1	0.00	-0.02	0.03	0.00	-0.01	0.01	-0.09	0.16	-0.09
34	1	-0.05	0.13	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
35	1	-0.14	0.19	0.01	-0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
36	1	-0.13	-0.02	0.04	0.00	0.52	-0.04	-0.01	-0.02	0.01

		46			47			48		
		A			A			A		
Frequencies	--	957.5366			958.9369			974.5936		
Red. masses	--	1.4181			2.0804			2.4676		
Frc consts	--	0.7660			1.1272			1.3809		
IR Inten	--	2.6366			24.8016			16.1597		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.03	0.03	0.16	-0.12
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.04	0.00	0.13	0.00	0.13
3	8	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.03	-0.08	-0.04	-0.09	0.09
4	6	0.00	0.00	0.00	0.19	-0.05	0.13	-0.07	0.02	-0.13
5	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.03	0.02	-0.04	-0.04	0.04
6	7	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.01
7	6	0.01	0.02	0.02	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
8	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
9	7	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00
11	6	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
12	7	0.01	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
13	6	-0.07	-0.10	-0.13	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.01
14	7	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
15	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.08	0.01	0.01	-0.02	0.01
17	16	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.01

18	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.03	-0.08	-0.03	0.01	-0.05
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.01
21	1	0.38	0.52	0.74	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.01	0.00	-0.06
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.22	0.14	0.17	-0.28	0.23
24	1	0.00	0.00	0.00	0.04	0.02	0.01	-0.24	0.29	-0.48
25	1	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.09	-0.02	-0.07	-0.10	0.06
26	1	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.15	0.12	-0.09	0.01	-0.20
27	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.01	-0.07	0.11	0.13
28	1	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.09	-0.21	0.00	-0.01	-0.02
29	1	0.00	0.00	0.00	0.06	0.07	0.05	0.12	0.10	0.16
30	1	-0.01	0.00	0.01	-0.36	-0.03	0.35	-0.13	0.02	0.17
31	1	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.10	0.22	-0.06	-0.03	0.15
32	1	0.01	0.00	0.00	0.53	-0.07	-0.16	0.30	-0.01	-0.09
33	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.07	-0.04	-0.05	0.06	-0.02
34	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.03	0.03	0.01
35	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
36	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01	-0.02	0.02	0.02
			49			50			51	
			A			A			A	
Frequencies	--	984.1521			992.8343			1020.1988		
Red. masses	--	1.2084			1.7787			2.3920		
Frc consts	--	0.6896			1.0330			1.4668		
IR Inten	--	10.5179			24.2387			170.9621		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.00	0.01	0.09	-0.04	0.05	-0.01	0.02	-0.02
2	6	0.00	0.01	-0.01	-0.03	0.04	-0.08	-0.03	-0.03	0.01
3	8	0.01	-0.01	0.01	0.05	-0.01	0.06	0.03	0.02	0.00
4	6	-0.03	0.00	-0.03	-0.11	0.01	-0.09	0.00	0.00	-0.01
5	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.01	0.00
6	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.07	-0.03	-0.01
7	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.05	0.01	0.03
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.09	0.02	0.04
9	7	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.05	0.03	-0.05
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.11	-0.07	0.08
12	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.07	0.09	-0.11
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.09	-0.06
14	7	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.07	0.05
15	7	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.05	-0.10	0.07
16	6	0.01	-0.01	0.01	0.04	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00
17	16	0.00	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
18	6	0.01	0.12	0.02	-0.05	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.02	0.01	-0.01	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.03	0.00	-0.01	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.25	0.19	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.03	0.09	-0.14
23	1	0.03	0.05	-0.04	0.05	0.32	-0.26	0.10	-0.21	0.00
24	1	0.02	0.00	0.03	0.22	-0.04	0.31	-0.01	0.00	-0.04
25	1	0.00	-0.01	0.00	-0.13	-0.13	-0.01	0.01	0.01	0.01
26	1	-0.04	-0.02	-0.02	-0.14	-0.12	-0.01	0.01	-0.01	0.04
27	1	0.01	-0.01	-0.02	0.05	-0.10	-0.11	-0.02	0.02	0.03
28	1	0.01	0.00	0.01	0.03	-0.12	0.08	-0.01	0.00	-0.02
29	1	0.01	0.01	0.03	-0.05	0.18	0.06	0.01	0.00	0.01
30	1	-0.55	-0.21	0.13	-0.14	0.05	0.26	0.01	0.00	-0.01
31	1	0.64	-0.18	-0.28	-0.16	-0.04	0.27	-0.01	0.00	0.00

32	1	-0.14	-0.24	0.05	0.50	0.01	-0.16	-0.01	0.00	0.00
33	1	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
34	1	0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.03	-0.01	0.54	-0.40	-0.19
35	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.23	0.39	-0.05
36	1	0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.01	-0.03	0.03	0.02	-0.05
			52			53			54	
			A			A			A	
Frequencies	--	1051.3520			1062.9858			1088.9903		
Red. masses	--	2.1464			3.9898			2.7918		
Frc consts	--	1.3978			2.6562			1.9506		
IR Inten	--	15.5452			69.7777			378.2178		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.12	-0.03	-0.01	-0.14	0.25	0.21	-0.02	0.03	-0.04
2	6	0.04	-0.01	0.08	-0.02	0.03	-0.10	-0.12	-0.11	0.03
3	8	0.02	0.02	-0.04	0.01	0.01	0.02	0.13	0.08	0.02
4	6	-0.10	0.05	0.12	-0.04	-0.13	0.00	-0.02	0.01	-0.07
5	6	0.09	0.05	-0.12	-0.01	-0.14	-0.06	-0.09	0.10	-0.08
6	7	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.05	-0.02	0.03	-0.02	0.04
7	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.11	0.03	0.05
8	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01	-0.05	0.04	-0.01
9	7	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.03
10	6	0.01	0.01	0.00	-0.05	-0.06	0.06	0.02	0.04	-0.04
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.03
12	7	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.06	-0.01	0.04
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.02	-0.02	0.00
14	7	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.07	-0.03	-0.02
15	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.02	-0.03
16	6	0.08	-0.04	-0.08	0.01	0.11	0.01	-0.02	0.00	0.01
17	16	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
18	6	-0.03	0.02	-0.06	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.01
19	8	0.01	0.00	0.03	-0.02	-0.01	-0.01	0.08	-0.07	0.05
20	8	0.03	-0.01	-0.03	0.14	-0.12	-0.10	0.01	-0.01	-0.02
21	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.05	-0.03	0.00
22	1	0.01	-0.01	-0.03	-0.05	-0.01	0.16	-0.14	0.18	-0.09
23	1	0.04	-0.16	0.14	0.09	-0.27	-0.05	0.09	-0.49	0.05
24	1	-0.16	-0.02	-0.07	0.00	0.22	0.39	0.07	-0.01	0.08
25	1	0.19	0.12	-0.09	0.23	0.05	0.00	-0.14	0.00	-0.05
26	1	-0.09	0.05	0.15	-0.06	-0.18	0.00	0.00	-0.22	0.31
27	1	-0.06	0.10	0.11	0.10	-0.05	-0.02	-0.10	0.09	0.14
28	1	0.21	-0.11	0.34	0.05	0.15	0.09	-0.10	-0.04	-0.14
29	1	-0.43	-0.13	-0.39	-0.05	0.10	-0.03	0.11	0.08	0.15
30	1	-0.17	0.00	0.18	0.01	0.01	0.01	0.04	0.00	-0.04
31	1	0.00	-0.06	0.12	-0.03	0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.02
32	1	0.28	-0.03	-0.10	0.01	0.01	-0.01	-0.05	0.01	0.02
33	1	0.05	-0.08	0.06	-0.25	0.37	-0.19	0.01	0.02	0.03
34	1	-0.01	0.01	0.00	0.02	-0.02	-0.01	-0.23	0.12	0.08
35	1	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.22	-0.33	0.01
36	1	-0.02	0.00	0.02	0.16	0.03	-0.12	-0.04	-0.08	0.03
			55			56			57	
			A			A			A	
Frequencies	--	1097.5503			1116.6109			1124.0950		
Red. masses	--	1.8702			2.4993			3.3265		
Frc consts	--	1.3273			1.8360			2.4765		
IR Inten	--	3.3262			22.4947			17.9261		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.03	0.02	-0.02	0.05	0.03	-0.07	0.04	0.03
2	6	0.00	-0.01	-0.01	-0.09	-0.02	-0.07	0.00	-0.04	0.02

3	8	0.02	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01
4	6	-0.02	-0.03	-0.01	0.07	0.18	0.00	0.08	0.20	0.00
5	6	-0.01	0.00	-0.03	0.00	-0.11	0.11	-0.16	0.08	-0.08
6	7	-0.04	-0.02	0.04	0.04	-0.01	0.01	-0.07	0.06	0.00
7	6	0.01	-0.01	0.01	-0.06	0.02	0.02	0.11	-0.04	-0.03
8	6	0.04	-0.07	0.02	-0.04	0.02	0.00	0.09	-0.06	0.00
9	7	-0.13	0.05	0.02	-0.04	0.00	0.03	0.04	0.02	-0.05
10	6	0.16	0.01	-0.08	0.07	0.00	-0.04	-0.08	-0.02	0.06
11	6	0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.04	0.01
12	7	0.02	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.01	0.04	-0.01	-0.02
13	6	0.02	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.02	-0.01
14	7	-0.04	0.03	0.00	0.03	-0.02	0.00	-0.06	0.04	0.00
15	7	-0.02	0.02	0.00	0.03	0.00	-0.02	-0.06	0.00	0.03
16	6	-0.01	0.03	0.01	0.03	-0.14	-0.05	0.00	-0.13	-0.02
17	16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01
19	8	0.01	-0.01	0.01	-0.05	0.04	-0.04	0.09	-0.09	0.06
20	8	0.02	-0.01	-0.01	0.02	-0.02	-0.01	0.04	-0.03	-0.04
21	1	0.06	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.01	0.02	0.01	-0.02
22	1	0.55	-0.42	-0.12	0.04	0.02	-0.07	0.13	-0.20	0.17
23	1	-0.05	0.07	0.00	0.06	-0.11	-0.14	-0.08	0.01	0.05
24	1	0.01	0.05	0.09	0.05	-0.02	0.06	0.06	0.07	0.30
25	1	0.02	0.03	-0.02	0.01	-0.20	0.21	-0.39	-0.19	-0.06
26	1	-0.04	-0.12	0.06	0.21	0.62	-0.24	0.09	0.20	0.05
27	1	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.04	-0.02	-0.08	0.07	0.12
28	1	-0.01	0.03	-0.01	0.09	-0.13	0.09	-0.13	-0.28	-0.18
29	1	0.02	0.04	0.03	-0.09	-0.18	-0.14	0.07	-0.07	0.07
30	1	0.01	0.00	-0.01	-0.05	0.00	0.04	0.00	-0.01	-0.02
31	1	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.01	0.01	0.01	-0.03
32	1	-0.01	0.00	0.00	0.05	-0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.01
33	1	-0.02	0.04	-0.02	-0.12	0.16	-0.10	-0.03	0.11	-0.03
34	1	-0.05	0.04	0.01	-0.12	0.07	0.04	0.15	-0.09	-0.07
35	1	-0.02	0.01	0.00	0.13	-0.18	0.01	-0.21	0.28	-0.01
36	1	-0.49	0.04	0.38	-0.13	-0.03	0.10	0.11	0.07	-0.09

58

59

60

A

A

A

Frequencies -- 1152.6428

1169.8433

1184.7867

Red. masses -- 3.9777

2.9082

1.5242

Frc consts -- 3.1137

2.3450

1.2606

IR Inten -- 63.3537

34.7943

10.8654

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	0.01	-0.06	0.02	-0.04	-0.04	-0.07	-0.01	0.00
2	6	-0.17	-0.13	-0.03	-0.06	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.01
3	8	0.16	0.10	0.02	0.04	0.03	0.02	0.00	0.00	-0.02
4	6	-0.05	-0.04	-0.08	-0.02	-0.01	-0.02	-0.05	0.07	0.05
5	6	0.10	-0.08	0.09	0.04	0.00	0.02	0.14	-0.05	-0.01
6	7	-0.10	0.02	0.09	0.02	0.21	-0.14	0.00	-0.01	0.01
7	6	0.05	-0.06	0.02	0.04	0.04	-0.06	0.00	0.00	0.00
8	6	0.12	-0.09	0.00	-0.05	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
9	7	0.09	0.02	-0.07	-0.07	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.13	0.07	0.02	0.04	-0.17	0.10	0.00	0.01	0.00
11	6	0.03	-0.04	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
12	7	0.03	-0.03	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
13	6	0.03	0.05	-0.05	-0.07	-0.06	0.07	0.00	0.00	0.00
14	7	-0.08	0.06	0.00	0.05	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
15	7	-0.07	0.02	0.02	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.02

17	16	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
18	6	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
19	8	-0.06	0.06	-0.04	-0.01	0.02	-0.01	-0.06	0.05	-0.01
20	8	-0.03	0.01	0.02	-0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.02
21	1	0.16	0.00	-0.09	-0.20	-0.01	0.11	0.01	0.00	-0.01
22	1	0.08	-0.12	0.08	0.40	-0.49	0.26	-0.02	0.02	-0.01
23	1	-0.20	-0.49	0.13	-0.04	-0.39	0.14	0.04	0.03	-0.03
24	1	0.03	-0.10	-0.23	0.02	-0.12	-0.14	-0.01	0.03	0.15
25	1	0.26	0.00	0.19	-0.05	-0.06	-0.01	0.04	-0.34	0.15
26	1	0.10	0.10	0.14	0.01	-0.01	0.05	-0.18	-0.26	0.15
27	1	-0.03	0.02	0.03	-0.06	0.06	0.08	-0.07	0.13	0.13
28	1	0.15	0.15	0.18	0.01	0.01	0.01	-0.27	-0.37	-0.32
29	1	-0.05	0.00	-0.05	0.03	0.04	0.04	0.24	0.31	0.38
30	1	-0.02	0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.04
31	1	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02
32	1	0.04	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.02
33	1	-0.03	-0.01	0.00	0.10	-0.16	0.08	0.06	-0.11	0.04
34	1	0.08	-0.06	-0.05	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
35	1	-0.19	0.23	-0.02	0.06	-0.06	0.01	0.00	0.00	0.00
36	1	0.05	0.01	-0.04	0.14	0.09	-0.09	-0.01	0.00	0.00

		61			62			63		
		A			A			A		
Frequencies	--	1225.4535			1234.0906			1247.6368		
Red. masses	--	1.3443			1.2102			2.0868		
Frc consts	--	1.1895			1.0859			1.9138		
IR Inten	--	7.5985			33.7292			2.8557		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.03	0.01	0.05	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01
2	6	-0.01	0.10	-0.03	-0.02	0.02	-0.01	-0.02	0.03	-0.01
3	8	-0.04	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
4	6	0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.06	0.05	0.00	0.01	0.01
5	6	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.01
6	7	0.00	0.03	0.03	0.00	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.01
7	6	-0.03	-0.02	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.02	0.01
8	6	0.01	-0.04	0.02	-0.01	-0.01	0.02	0.10	0.10	-0.14
9	7	0.02	0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.05	0.04
10	6	-0.03	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.04	0.04
11	6	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.09	0.01	-0.06
12	7	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.08	0.01	0.03
13	6	0.03	0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.04
14	7	-0.03	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.08	-0.01	-0.04
15	7	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.06	-0.03	0.06
16	6	0.00	0.01	0.01	0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
17	16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00
20	8	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.04	0.00	0.00	0.01
21	1	0.08	0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.05	0.03
22	1	0.13	-0.12	0.05	0.06	-0.06	0.02	-0.13	0.08	0.01
23	1	0.70	-0.47	-0.27	0.02	-0.08	0.01	0.20	-0.19	-0.06
24	1	0.10	-0.18	-0.01	-0.10	-0.06	-0.32	0.01	-0.08	-0.08
25	1	-0.11	0.02	-0.10	0.40	0.29	0.09	0.03	0.06	-0.02
26	1	-0.04	0.01	-0.15	-0.06	-0.05	0.12	-0.02	0.00	-0.02
27	1	-0.02	0.01	0.02	0.20	-0.27	-0.31	0.03	-0.05	-0.05
28	1	-0.05	-0.04	-0.06	-0.15	-0.22	-0.18	-0.04	-0.05	-0.05
29	1	-0.02	-0.02	-0.03	0.03	0.09	0.10	0.01	0.02	0.02
30	1	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00

31	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00
33	1	0.10	-0.14	0.07	-0.25	0.37	-0.19	-0.01	0.01	-0.01
34	1	-0.07	0.04	0.02	-0.03	0.02	0.01	0.28	-0.19	-0.11
35	1	0.04	-0.07	0.00	0.03	-0.04	0.00	-0.32	0.42	-0.04
36	1	0.02	0.03	-0.01	0.05	0.02	-0.04	-0.43	-0.20	0.37
			64			65			66	
			A			A			A	
Frequencies	--	1268.0659			1271.3934			1304.6161		
Red. masses	--	1.2069			1.2729			1.4161		
Frc consts	--	1.1434			1.2123			1.4200		
IR Inten	--	26.5439			5.8060			22.6578		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.01	-0.09	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01
2	6	0.04	-0.01	0.05	0.00	0.02	-0.01	-0.03	-0.03	0.03
3	8	-0.02	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.04	-0.01	-0.02
4	6	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.04	0.06	0.03	-0.06
5	6	-0.02	0.01	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.04	0.02	-0.01
6	7	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.03
7	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.02
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.02
9	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.05	-0.01
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.02
12	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01
13	6	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.04
14	7	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	0.02	-0.04
15	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.01
16	6	-0.02	-0.01	-0.01	-0.05	-0.07	-0.11	-0.02	-0.01	0.02
17	16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
20	8	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01
21	1	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.07	-0.03	0.05
22	1	0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.21	-0.19	0.03
23	1	0.21	0.07	-0.09	0.03	-0.07	0.01	0.32	0.17	-0.28
24	1	0.37	-0.19	0.36	-0.07	0.06	-0.03	-0.22	0.21	-0.11
25	1	0.35	0.09	0.29	-0.05	0.11	-0.15	-0.04	-0.33	0.20
26	1	0.01	-0.03	0.02	0.14	0.13	0.21	0.08	-0.26	0.43
27	1	-0.19	0.24	0.26	0.06	-0.08	-0.09	0.10	-0.11	-0.13
28	1	0.10	0.12	0.13	0.30	0.20	0.45	0.11	0.17	0.12
29	1	0.05	0.03	0.05	0.38	0.35	0.46	-0.05	-0.16	-0.13
30	1	-0.02	0.00	0.01	0.03	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.01
31	1	0.00	0.00	0.01	0.06	-0.02	-0.04	0.00	0.00	0.01
32	1	-0.01	0.00	0.00	0.08	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
33	1	-0.24	0.33	-0.14	0.05	-0.05	0.02	-0.03	0.05	-0.04
34	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.05	-0.02
35	1	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.01
36	1	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.03	-0.03	-0.02
			67			68			69	
			A			A			A	
Frequencies	--	1313.0083			1346.6109			1349.6792		
Red. masses	--	2.2830			2.0075			1.8611		
Frc consts	--	2.3190			2.1449			1.9975		
IR Inten	--	28.0563			35.8539			15.0273		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.08	-0.06	0.00	-0.08	-0.06

2	6	0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	0.04	-0.04	0.00	0.02
3	8	0.03	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.02	0.01	-0.01
4	6	-0.05	-0.04	0.06	-0.01	-0.03	0.01	-0.01	-0.03	0.01
5	6	-0.03	-0.02	0.02	-0.02	0.01	0.03	-0.02	0.02	0.02
6	7	0.02	-0.08	0.06	0.05	0.02	-0.05	-0.05	0.03	0.02
7	6	0.05	0.00	-0.02	-0.07	0.08	-0.02	0.04	-0.07	0.02
8	6	-0.07	-0.01	0.04	0.05	0.02	-0.05	-0.02	0.00	0.02
9	7	0.04	-0.04	0.00	0.05	-0.02	-0.02	-0.06	0.02	0.03
10	6	-0.10	0.13	-0.05	-0.08	0.01	0.05	0.09	-0.05	-0.02
11	6	-0.04	0.08	-0.04	-0.03	-0.05	0.05	0.06	0.01	-0.03
12	7	-0.01	0.02	-0.01	-0.04	0.06	-0.02	0.05	-0.08	0.03
13	6	-0.07	-0.07	0.09	0.11	-0.02	-0.04	-0.09	0.06	0.01
14	7	0.09	0.05	-0.08	-0.05	-0.07	0.07	0.03	0.04	-0.04
15	7	0.03	-0.04	0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.00
16	6	0.02	0.01	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
17	16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	8	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.01	-0.01	0.02	0.01	0.00
21	1	-0.11	-0.06	0.10	0.08	-0.01	-0.03	-0.10	0.06	0.00
22	1	0.40	-0.35	0.03	0.13	-0.20	0.10	-0.21	0.24	-0.08
23	1	-0.08	-0.05	0.08	0.04	0.03	-0.02	0.20	-0.15	-0.08
24	1	0.02	0.11	0.19	-0.31	0.66	0.37	-0.28	0.60	0.35
25	1	0.02	0.29	-0.18	0.09	0.05	0.10	0.10	0.02	0.13
26	1	-0.06	0.28	-0.42	0.02	0.13	-0.13	0.01	0.11	-0.13
27	1	-0.03	0.04	0.04	0.06	-0.06	-0.07	0.10	-0.11	-0.13
28	1	-0.10	-0.16	-0.11	-0.03	-0.03	-0.04	-0.03	-0.03	-0.05
29	1	0.04	0.15	0.10	-0.01	0.02	0.00	-0.02	0.02	0.00
30	1	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.04	-0.06	0.04	-0.02	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.01
34	1	0.17	-0.10	-0.04	-0.08	0.04	0.02	-0.01	0.00	-0.01
35	1	0.00	0.03	0.02	0.04	-0.08	-0.01	-0.05	0.08	-0.01
36	1	0.05	-0.07	-0.04	-0.19	-0.08	0.18	0.17	0.08	-0.16

		70			71			72		
		A			A			A		
Frequencies	--	1359.2698			1362.7969			1371.1734		
Red. masses	--	1.4148			1.7253			2.6737		
Frc consts	--	1.5401			1.8879			2.9618		
IR Inten	--	31.7757			1.1277			22.1890		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.04	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.02	-0.01	-0.01
2	6	-0.03	-0.05	0.04	0.00	0.02	-0.01	0.03	0.01	-0.01
3	8	-0.02	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.01	-0.04	-0.01	0.01
4	6	-0.03	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.03	-0.04
5	6	-0.03	-0.09	0.04	0.01	0.03	-0.01	-0.02	-0.05	0.01
6	7	-0.02	0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.07	0.03	-0.06
7	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.04	0.03	-0.01	-0.11	0.08
8	6	0.03	-0.04	0.02	0.02	-0.05	0.04	-0.08	0.13	-0.06
9	7	-0.02	0.02	0.00	-0.05	0.02	0.01	-0.01	-0.06	0.04
10	6	0.03	-0.03	0.00	0.05	-0.03	-0.01	-0.04	0.04	-0.01
11	6	-0.01	0.00	0.00	-0.06	0.11	-0.06	0.01	0.10	-0.08
12	7	-0.03	0.05	-0.02	-0.07	0.09	-0.03	0.05	-0.12	0.06
13	6	0.02	-0.04	0.02	0.06	-0.08	0.03	-0.03	0.11	-0.07
14	7	0.01	0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.01	-0.07	-0.03	0.06
15	7	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.05	0.03	0.02	-0.02	0.01

16	6	0.04	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01
17	16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
19	8	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
20	8	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
21	1	0.06	-0.05	0.01	0.74	-0.32	-0.14	0.50	-0.08	-0.21
22	1	-0.11	0.10	-0.02	-0.10	0.11	-0.05	0.30	-0.28	0.05
23	1	0.23	0.24	-0.25	-0.04	-0.09	0.07	-0.13	0.05	0.07
24	1	0.01	0.08	0.00	-0.03	0.04	0.05	0.02	0.07	0.10
25	1	0.05	0.46	-0.34	0.00	-0.13	0.11	0.12	0.21	-0.07
26	1	0.20	0.18	0.45	-0.06	-0.04	-0.15	0.12	-0.01	0.40
27	1	-0.08	0.11	0.12	0.04	-0.05	-0.05	-0.06	0.08	0.08
28	1	-0.10	-0.12	-0.18	0.03	0.03	0.05	-0.02	-0.01	-0.06
29	1	-0.09	0.06	-0.01	0.03	-0.02	0.00	-0.07	-0.02	-0.04
30	1	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.06	-0.02	0.06
31	1	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.06	0.02	0.05
32	1	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.01
33	1	0.11	-0.15	0.08	-0.03	0.04	-0.02	0.08	-0.11	0.05
34	1	0.02	-0.01	-0.01	0.25	-0.14	-0.06	0.12	-0.07	-0.04
35	1	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.03	0.04	-0.03	0.06	-0.01
36	1	0.08	0.06	-0.07	0.18	0.12	-0.15	0.00	-0.10	0.01

73

74

75

		A			A			A		
Frequencies	--	1374.2480			1383.0064			1403.0507		
Red. masses	--	1.1572			1.7043			1.3678		
Frc consts	--	1.2876			1.9206			1.5864		
IR Inten	--	5.9035			43.1004			3.0457		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.03	0.00	-0.01	0.01
2	6	0.01	0.00	0.00	0.05	0.10	-0.08	0.04	0.04	-0.02
3	8	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.04	-0.03	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.08	-0.06	-0.05	-0.11	-0.03
5	6	-0.01	-0.01	-0.01	-0.06	-0.07	-0.02	-0.01	0.06	-0.04
6	7	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.03	0.00	-0.01	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.01	-0.01	0.01
9	7	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.02	0.02	0.01	-0.02
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.02	-0.02	0.01	0.00
12	7	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.00	-0.01	0.01
14	7	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	-0.02	0.00	0.01	-0.01
15	7	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
16	6	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.05	0.02	0.01
17	16	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	-0.09	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
19	8	0.00	0.01	0.00	0.00	0.04	0.01	0.00	0.00	0.01
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
21	1	0.02	0.00	-0.01	-0.13	0.01	0.06	-0.02	0.00	0.01
22	1	0.02	-0.02	0.00	-0.07	0.07	-0.02	-0.04	0.03	0.00
23	1	-0.01	0.01	0.01	-0.23	-0.36	0.29	-0.05	-0.09	0.10
24	1	0.03	-0.02	0.01	0.09	0.08	0.30	0.04	-0.09	-0.02
25	1	0.08	-0.01	0.07	0.34	0.15	0.15	0.03	-0.33	0.31
26	1	0.02	0.02	0.05	0.00	-0.27	0.32	0.41	0.60	0.35
27	1	0.00	-0.01	-0.01	0.03	-0.04	-0.04	0.00	-0.02	-0.01
28	1	-0.05	-0.07	-0.04	0.04	0.10	0.01	-0.09	-0.15	-0.14
29	1	-0.01	-0.06	-0.05	-0.07	-0.10	-0.08	-0.04	0.10	0.02

30	1	0.39	0.14	-0.37	-0.02	0.00	0.03	-0.04	-0.01	0.04
31	1	0.39	-0.15	-0.37	-0.02	0.00	0.03	-0.04	0.02	0.01
32	1	0.58	0.01	-0.06	-0.04	0.00	0.00	-0.05	0.03	0.01
33	1	0.01	-0.02	0.02	0.21	-0.28	0.14	0.00	0.01	0.00
34	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
35	1	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	0.01	0.02	-0.02	0.01
36	1	0.00	-0.01	0.00	-0.09	0.00	0.07	-0.10	-0.01	0.08
			76			77			78	
			A			A			A	
Frequencies	--	1413.0477			1431.0266			1440.4169		
Red. masses	--	2.1597			1.6863			1.6625		
Frc consts	--	2.5407			2.0347			2.0322		
IR Inten	--	175.1565			63.5984			6.4704		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	-0.03	0.02	0.08	-0.10	0.10	0.11	0.00	0.10
2	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.08	-0.09	-0.04	-0.03	0.00
3	8	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.02	0.01	0.00	-0.01
4	6	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.05
5	6	0.03	0.00	0.03	0.05	0.04	0.04	-0.11	-0.03	-0.12
6	7	0.01	0.03	-0.04	-0.01	-0.02	0.03	0.00	0.01	0.00
7	6	0.01	-0.06	0.04	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.05	-0.07	0.06	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	7	0.11	0.08	-0.12	-0.02	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	-0.06	0.07	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.11	0.09	-0.02	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
12	7	0.05	-0.04	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.05	0.01	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
14	7	0.01	0.04	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	7	0.05	-0.03	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.02
17	16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
19	8	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	-0.04	-0.01	0.00	0.04	0.02
20	8	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.06	-0.01	-0.01	-0.04
21	1	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.01	0.01	0.02	0.00	-0.01
22	1	-0.23	0.16	0.06	0.04	-0.02	-0.03	-0.01	0.01	0.01
23	1	-0.01	0.04	-0.02	-0.11	-0.19	0.08	0.06	0.16	-0.15
24	1	-0.12	0.11	-0.05	-0.29	0.22	-0.14	-0.16	0.09	-0.30
25	1	-0.09	0.09	-0.15	-0.12	0.06	-0.14	0.42	-0.11	0.41
26	1	-0.07	-0.10	-0.04	0.03	-0.03	0.16	-0.06	0.01	-0.25
27	1	-0.09	0.13	0.13	-0.30	0.40	0.43	-0.18	0.23	0.25
28	1	0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.06	0.11
29	1	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.02	-0.02	0.12	0.00	0.04
30	1	0.02	0.01	-0.02	0.02	0.01	-0.03	-0.03	-0.02	0.01
31	1	0.02	-0.01	-0.02	0.03	-0.01	-0.03	-0.03	0.01	0.03
32	1	0.03	-0.01	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.04	-0.02	0.00
33	1	-0.11	0.15	-0.07	-0.24	0.31	-0.15	0.20	-0.29	0.16
34	1	0.10	-0.04	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.10	-0.10	0.03	-0.03	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
36	1	-0.61	-0.08	0.49	0.15	0.03	-0.12	-0.02	-0.01	0.02
			79			80			81	
			A			A			A	
Frequencies	--	1466.0126			1477.4930			1486.8372		
Red. masses	--	6.2627			1.0690			1.0857		
Frc consts	--	7.9302			1.3749			1.4141		
IR Inten	--	191.6600			7.6374			3.7143		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	6	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
2	6	-0.06	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	8	0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.02
5	6	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01
6	7	-0.17	-0.03	0.15	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
7	6	0.41	0.06	-0.26	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01
8	6	-0.14	0.22	-0.10	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
9	7	0.02	-0.06	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.05	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.15	0.03	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	7	0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	7	-0.11	-0.09	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	7	0.07	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.04	0.00	0.02	-0.07	0.01
17	16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.05	0.00	-0.01	0.03	-0.01
19	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.17	-0.08	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.18	0.17	-0.11	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
23	1	0.27	-0.23	-0.13	0.00	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.00
24	1	-0.02	-0.02	-0.04	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	-0.03
25	1	-0.04	0.03	-0.05	0.02	-0.02	0.02	0.02	-0.05	0.04
26	1	-0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.02	-0.05	-0.01	0.00	-0.05
27	1	-0.01	0.01	0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01
28	1	0.01	0.09	-0.11	0.06	0.28	-0.21	0.10	0.46	-0.36
29	1	-0.11	0.09	0.03	-0.25	0.21	0.08	-0.44	0.35	0.12
30	1	0.01	0.01	0.03	-0.02	0.10	0.43	0.12	0.03	-0.21
31	1	0.02	0.00	-0.05	0.11	0.02	-0.39	0.05	-0.10	0.29
32	1	0.01	0.06	0.00	-0.01	0.63	-0.01	-0.02	-0.38	0.01
33	1	-0.03	0.05	-0.02	0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00
34	1	0.03	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.18	-0.19	0.05	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
36	1	-0.25	-0.22	0.20	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01

82

83

84

A

A

A

Frequencies -- 1492.7194

1505.1427

1603.1919

Red. masses -- 2.3697

1.0536

8.4445

Frc consts -- 3.1110

1.4063

12.7877

IR Inten -- 32.3197

6.9425

34.5842

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01
3	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	7	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.07	0.04
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.46	-0.29
8	6	-0.08	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.24	0.19
9	7	0.04	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.03
10	6	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
11	6	0.08	-0.17	0.10	0.00	0.00	0.00	0.16	0.15	-0.20
12	7	0.03	0.08	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.17	0.07
13	6	-0.18	0.05	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.11	0.00
14	7	0.08	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.21	0.16

15	7	-0.01	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.01	0.03
16	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
17	16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.78	-0.29	-0.19	0.00	0.00	0.00	0.32	-0.07	-0.12
22	1	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.05
23	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.07	-0.01
24	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.05	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01
26	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.02
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01
28	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.10	0.06	-0.01	-0.01	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.07	-0.02	0.01	-0.01	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.40	0.40	0.35	0.00	0.00	0.00
31	1	0.00	0.00	0.00	0.41	-0.37	0.34	0.00	0.00	0.00
32	1	0.00	0.00	0.00	-0.32	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
34	1	-0.31	0.13	0.08	0.00	0.00	0.00	0.38	-0.11	-0.12
35	1	-0.05	0.04	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.08	0.13
36	1	-0.12	-0.06	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.06	0.05

85

86

87

		A	A	A
Frequencies	--	1635.4888	1669.9040	3062.9084
Red. masses	--	1.5682	3.3029	1.0847
Frc consts	--	2.4715	5.4267	5.9957
IR Inten	--	21.1184	510.3753	3.9203

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.02	0.02
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.03	-0.04
6	7	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.03	0.01	0.01	-0.05	0.07	-0.02	0.00	0.00	0.00
8	6	0.11	0.02	-0.07	0.24	-0.02	-0.10	0.00	0.00	0.00
9	7	-0.02	-0.01	0.02	-0.05	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.09	-0.04	0.05	-0.24	0.09	0.07	0.00	0.00	0.00
12	7	0.04	-0.02	0.00	0.08	-0.07	0.01	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.08	0.03	0.01	-0.12	0.05	0.03	0.00	0.00	0.00
14	7	0.04	0.00	-0.02	0.05	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
15	7	-0.06	0.05	-0.03	0.13	-0.06	0.01	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.09	-0.02	-0.03	0.14	-0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00
22	1	0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01
24	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.02	0.01	-0.01
25	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.43	0.40	0.48
26	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.55	-0.26	-0.17
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.02	0.01

29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.02
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.01
31	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01
32	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.04
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	1	0.61	0.04	-0.13	-0.65	-0.04	0.15	0.00	0.00	0.00
35	1	0.39	-0.45	0.44	-0.22	0.23	-0.43	0.00	0.00	0.00
36	1	0.05	0.01	-0.04	0.15	0.05	-0.11	0.00	0.00	0.00
			88			89			90	
			A			A			A	
Frequencies	--	3069.0864			3069.6467			3075.5770		
Red. masses	--	1.0602			1.0493			1.0647		
Frc consts	--	5.8840			5.8253			5.9338		
IR Inten	--	4.9161			45.8824			27.9073		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.04	0.02	0.01	0.03	-0.02	-0.01	-0.03	0.01	0.01
5	6	-0.02	0.02	0.03	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.02
6	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.02	0.05	-0.03
17	16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.03	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
23	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
24	1	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.27	-0.25	-0.31	-0.17	0.16	0.19	0.16	-0.14	-0.18
26	1	0.44	-0.21	-0.14	-0.37	0.17	0.12	0.31	-0.14	-0.10
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	-0.22	0.09	0.09	0.25	-0.11	-0.10	0.46	-0.21	-0.20
29	1	0.07	0.10	-0.12	-0.08	-0.13	0.16	-0.26	-0.41	0.50
30	1	-0.19	0.30	-0.11	-0.22	0.36	-0.13	0.03	-0.05	0.02
31	1	-0.18	-0.31	-0.10	-0.22	-0.38	-0.12	0.03	0.05	0.01
32	1	0.07	0.01	0.37	0.07	0.01	0.43	-0.01	0.00	-0.06
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			91			92			93	
			A			A			A	
Frequencies	--	3130.3434			3143.0445			3149.5669		
Red. masses	--	1.1071			1.0893			1.0890		
Frc consts	--	6.3920			6.3401			6.3646		
IR Inten	--	10.3102			39.1905			1.8884		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.05	0.03
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
3	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.06	0.03	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	-0.07	-0.01	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
22	1	0.01	0.01	-0.01	0.69	0.66	-0.30	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.04	-0.09
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.74	0.53	-0.39
25	1	0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.02
26	1	0.11	-0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	0.63	-0.30	-0.25	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
29	1	0.23	0.39	-0.47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	1	0.02	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00

94

95

96

A

A

A

Frequencies	--	3161.0489		3164.1773		3177.9979
Red. masses	--	1.1075		1.1056		1.0900
Frc consts	--	6.5201		6.5221		6.4861
IR Inten	--	4.8926		8.0267		30.3618

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.07	0.05

14	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.01	-0.09	0.01	-0.04	-0.01	-0.08	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.11	0.78	-0.62
22	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	1	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
29	1	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
30	1	-0.38	0.60	-0.21	0.17	-0.29	0.08	0.00	0.00	0.00
31	1	0.33	0.54	0.18	0.22	0.39	0.10	0.00	0.00	0.00
32	1	-0.01	-0.02	-0.07	0.12	0.01	0.80	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

97

98

99

A

A

A

Frequencies -- 3179.1758

3563.4147

3584.3199

Red. masses -- 1.0931

1.0475

1.0771

Frc consts -- 6.5096

7.8366

8.1534

IR Inten -- 15.8075

31.4661

10.2400

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.05	-0.03	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	7	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.04	0.04	-0.04
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	7	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.52	0.32	0.78	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.08	0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	1	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.35	-0.58	-0.01	0.04	-0.07
35	1	0.00	0.00	0.00	-0.59	-0.27	0.30	-0.10	-0.05	0.05
36	1	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.07	-0.08	0.61	-0.52	0.58
			100			101			102	
			A			A			A	
Frequencies	--		3682.7308			3743.7479			3760.3394	
Red. masses	--		1.0996			1.0661			1.0656	
Frc consts	--		8.7870			8.8034			8.8773	
IR Inten	--		21.5431			135.1340			48.0940	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	7	-0.03	-0.05	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.04	-0.03	0.01	0.01	0.00
20	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.04	0.02	-0.04
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.04	0.09	0.68	-0.29	0.66
28	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
33	1	0.00	0.00	0.00	0.61	0.60	0.49	-0.09	-0.08	-0.07
34	1	-0.11	0.36	-0.62	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.58	0.26	-0.26	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	1	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00