

All borylenes studied by the (U)B3LYP/6-311+g(d, p) model chemistry are listed below, with their short name, ZPE-corrected energy in hartree, optimized Cartesian coordinates, and the first six normal modes (including frequencies).

1 bh

0 1 -25.292202

B 0.00000000 0.00000000 0.20574100

H 0.00000000 0.00000000 -1.02870500

1

SG

Frequencies -- 2343.7581

Red. masses -- 1.0909

Frc consts -- 3.5308

IR Inten -- 421.0243

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

1	5	0.00	0.00	0.09
---	---	------	------	------

2	1	0.00	0.00	-1.00
---	---	------	------	-------

0 3 -25.250141

B 0.00000000 0.00000000 0.19875100

H 0.00000000 0.00000000 -0.99375600

1

SG

Frequencies -- 2607.1010

Red. masses -- 1.0909

Frc consts -- 4.3689

IR Inten -- 3.3047

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

1	5	0.00	0.00	0.09
---	---	------	------	------

2	1	0.00	0.00	-1.00
---	---	------	------	-------

2 bh-nh3

0 1 -81.863998

B 1.09001100 -0.23367800 -0.01952700

H	1.43089100	0.94330600	0.01425800
N	-0.57814600	0.01275700	-0.01119800
H	-0.97067100	0.80920900	-0.53249800
H	-1.06614800	-0.83296400	-0.28703000
H	-0.79710700	0.15953700	0.98129300

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	181.9839	471.2084	659.7485
Red. masses --	1.1210	5.3497	1.1957
Frc consts --	0.0219	0.6999	0.3066
IR Inten --	97.7457	11.7031	17.5818

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.01	0.00	0.10	0.51	-0.09	-0.03	0.06	-0.01	0.04
2	1	0.11	-0.02	-0.74	0.15	0.05	-0.12	-0.09	0.03	0.27
3	7	0.00	0.02	-0.03	-0.34	0.06	0.05	-0.04	0.00	-0.09
4	1	-0.21	0.16	0.31	-0.24	-0.02	-0.07	-0.41	0.02	0.20
5	1	0.08	0.03	-0.22	-0.08	-0.01	-0.18	-0.28	0.00	0.34
6	1	0.13	-0.42	0.06	-0.68	0.03	-0.05	0.70	0.05	0.07

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	739.1508	1144.2622	1318.2427
Red. masses --	1.0752	1.2134	1.1732
Frc consts --	0.3461	0.9361	1.2012
IR Inten --	33.4788	94.8011	68.4549

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.04	0.01	0.02	-0.01	0.10	0.00	0.01	-0.01	0.00
2	1	-0.47	0.19	-0.20	0.86	-0.19	0.00	-0.06	0.00	-0.01
3	7	0.00	-0.06	0.00	-0.04	-0.08	-0.01	0.11	-0.01	-0.02
4	1	0.54	0.22	0.06	0.19	0.07	0.03	-0.52	-0.08	0.25
5	1	-0.53	0.26	-0.08	-0.39	0.11	0.04	-0.46	0.23	0.14
6	1	0.08	0.06	0.00	0.03	0.06	0.00	-0.57	0.08	-0.15

0 3 -81.854570

B	1.01544200	0.22059600	0.00000400
H	1.72167300	-0.73803400	0.00004200
N	-0.56536800	-0.02473800	0.00005000
H	-1.03845000	0.87680000	-0.00093000
H	-0.90118700	-0.53497400	-0.82325700
H	-0.90167000	-0.53360900	0.82377000

	1			2			3		
	A			A			A		
Frequencies --	218.2714			685.5426			737.2610		
Red. masses --	1.0856			1.0591			6.7486		
Frc consts --	0.0305			0.2933			2.1612		
IR Inten --	11.8856			4.3253			4.4499		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.09	-0.04	-0.03	0.00	0.58	0.09	0.00
2	1	0.00	0.00	-0.82	0.53	0.41	0.00	0.39	-0.08	0.00
3	7	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.41	-0.06	0.00
4	1	0.00	0.00	-0.36	0.50	0.21	0.00	-0.29	0.00	0.00
5	1	0.16	-0.25	0.09	-0.31	0.16	-0.01	-0.34	-0.02	-0.01
6	1	-0.16	0.25	0.09	-0.31	0.16	0.01	-0.34	-0.02	0.01

	4			5			6		
	A			A			A		
Frequencies --	837.1346			1016.9147			1357.2925		
Red. masses --	1.2258			1.3236			1.1521		
Frc consts --	0.5061			0.8064			1.2505		
IR Inten --	8.3770			64.9176			30.5722		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.09	0.02	0.13	0.00	0.01	0.00	0.00
2	1	0.00	0.00	-0.09	-0.64	-0.37	0.00	-0.01	-0.01	0.00
3	7	0.00	0.00	-0.11	0.03	-0.10	0.00	0.10	0.01	0.00
4	1	0.00	0.00	0.19	0.51	0.16	0.00	-0.51	-0.28	0.00
5	1	-0.63	-0.15	0.22	-0.24	0.12	-0.02	-0.54	0.03	0.19

6 1 0.63 0.15 0.22 -0.24 0.12 0.02 -0.54 0.03 -0.19

3 bh-ph3

0 1 -368.463007

B	1.54686100	-0.18289600	0.00002600
H	2.10627500	0.88910100	-0.00078100
P	-0.43754900	0.03553600	-0.00011600
H	-1.53954900	0.99305100	-0.00199200
H	-0.86824000	-0.74757100	1.08838400
H	-0.86955200	-0.75313700	-1.08400300

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		93.8814			427.7531			489.9174		
Red. masses --		1.0514			6.6447			1.1037		
Frc consts --		0.0055			0.7163			0.1561		
IR Inten --		7.3595			1.8400			190.2289		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.04	0.64	-0.14	0.00	0.07	0.02	0.00
2	1	0.00	0.00	0.74	0.09	0.22	0.00	-0.42	0.29	0.00
3	15	0.00	0.00	-0.03	-0.21	0.06	0.00	0.00	-0.04	0.00
4	1	0.00	0.00	0.12	-0.50	-0.36	0.00	0.48	0.46	0.00
5	1	0.33	0.20	0.25	-0.07	-0.17	-0.10	-0.36	0.14	-0.01
6	1	-0.33	-0.20	0.26	-0.07	-0.17	0.11	-0.35	0.14	0.01

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		636.1962			830.7467			995.9311		
Red. masses --		1.2695			1.2357			1.0480		
Frc consts --		0.3027			0.5025			0.6124		
IR Inten --		22.0088			2.8067			9.9316		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.13	0.04	0.10	0.00	0.02	-0.03	0.00
2	1	0.00	0.00	-0.47	0.80	-0.33	0.00	-0.22	0.11	0.00

3	15	0.00	0.00	-0.06	-0.04	-0.05	0.00	-0.02	-0.02	0.00
4	1	0.00	0.00	0.64	0.18	0.24	0.00	0.04	0.02	0.00
5	1	0.41	-0.08	0.05	-0.11	0.20	0.13	0.38	0.37	0.43
6	1	-0.41	0.08	0.05	-0.11	0.20	-0.13	0.38	0.37	-0.43

0 3 -368.468895

B		1.40944500	0.16942900	-0.00006100
H		2.30388200	-0.60096300	-0.00032100
P		-0.40512000	-0.01162300	-0.00002900
H		-1.10345300	-0.65108100	-1.07568100
H		-1.06939100	1.23134900	0.00088000
H		-1.10146100	-0.65210900	1.07587100

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		262.5429			505.7037			601.4568		
Red. masses --		1.1229			1.0935			1.2351		
Frc consts --		0.0456			0.1648			0.2632		
IR Inten --		14.1524			20.8515			0.2845		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.11	-0.06	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.10
2	1	0.00	0.00	-0.91	0.55	0.67	0.00	0.00	0.00	-0.03
3	15	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.07
4	1	0.13	-0.21	0.05	-0.17	0.19	-0.02	-0.58	-0.06	0.34
5	1	0.00	0.00	-0.20	0.29	0.15	0.00	0.00	0.00	0.28
6	1	-0.13	0.21	0.05	-0.17	0.19	0.02	0.58	0.06	0.33
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		651.7230			800.4159			1059.3957		
Red. masses --		1.7812			2.7862			1.0290		
Frc consts --		0.4458			1.0517			0.6804		
IR Inten --		6.3542			18.8889			20.3196		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	5	0.18	0.15	0.00	0.34	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.01
2	1	-0.14	-0.26	0.00	0.63	0.22	0.00	0.00	0.00	-0.08
3	15	-0.05	-0.07	0.00	-0.13	0.04	0.00	0.00	0.00	0.03
4	1	-0.38	0.32	-0.02	0.05	-0.24	0.05	-0.28	0.37	-0.05
5	1	0.54	0.24	0.00	-0.51	-0.17	0.00	0.00	0.00	-0.75
6	1	-0.38	0.32	0.02	0.05	-0.24	-0.06	0.28	-0.37	-0.05

4 bh-nhc

0 1 -251.548779

B		-2.30499400	-0.00038900	-0.22513000
H		-3.25591200	0.00108600	0.47862300
C		-0.85707400	-0.00035300	0.04299400
C		1.33887200	0.67178500	-0.04071200
C		1.33926100	-0.67120800	-0.04057600
H		-0.29423600	2.02521900	-0.14403800
H		2.15762400	1.36964700	-0.06016200
H		2.15843200	-1.36859200	-0.05967800
H		-0.29308200	-2.02521300	-0.14541400
N		0.00928800	-1.09681300	0.09200000
N		0.00868200	1.09659300	0.09172700

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		149.2694			245.1520			297.7219		
Red. masses --		3.2874			1.3291			1.6677		
Frc consts --		0.0432			0.0471			0.0871		
IR Inten --		131.4554			30.4384			127.1253		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.10	0.00	0.17	0.00	0.07	0.00	0.00	0.17	0.00
2	1	0.29	0.00	0.72	0.00	0.84	0.00	0.00	0.08	0.00
3	6	0.00	0.00	-0.10	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.10	0.00
4	6	0.03	0.00	0.16	-0.04	0.03	-0.02	-0.03	0.01	0.01
5	6	0.03	0.00	0.16	0.04	0.03	0.02	0.03	0.02	0.00

6	1	0.01	0.07	0.19	-0.10	0.02	0.33	-0.08	-0.21	-0.65
7	1	0.02	0.01	0.24	-0.08	0.07	-0.06	-0.07	0.05	0.00
8	1	0.02	-0.01	0.24	0.08	0.07	0.06	0.07	0.05	0.01
9	1	0.01	-0.07	0.18	0.10	0.02	-0.32	0.08	-0.21	0.62
10	7	0.00	0.03	-0.21	0.04	-0.05	0.03	0.05	-0.03	-0.07
11	7	0.00	-0.03	-0.21	-0.04	-0.05	-0.03	-0.05	-0.03	0.07
		4				5			6	
		A				A			A	
Frequencies --		321.9890				488.3905			514.4090	
Red. masses --		1.3567				2.7943			1.2290	
Frc consts --		0.0829				0.3927			0.1916	
IR Inten --		336.7351				0.2717			249.6211	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.04	0.00	0.14	0.00	0.23	0.00	-0.02	0.00	-0.10
2	1	-0.18	0.01	-0.20	-0.01	-0.72	-0.01	0.54	0.00	0.70
3	6	0.00	0.00	-0.07	0.00	-0.04	0.00	0.03	0.00	-0.02
4	6	0.00	-0.01	0.03	-0.03	0.02	0.13	-0.01	0.00	-0.01
5	6	0.00	0.01	0.03	0.03	0.02	-0.13	-0.01	0.00	-0.01
6	1	0.04	-0.09	-0.63	-0.07	0.01	0.24	-0.02	-0.09	-0.30
7	1	0.01	-0.02	0.16	-0.07	0.07	0.30	-0.01	0.00	-0.01
8	1	0.01	0.02	0.16	0.07	0.07	-0.30	-0.01	0.00	-0.01
9	1	0.04	0.09	-0.66	0.07	0.01	-0.23	-0.02	0.09	-0.30
10	7	-0.01	-0.05	0.00	0.04	-0.07	0.16	-0.01	0.00	0.06
11	7	-0.01	0.05	-0.01	-0.04	-0.07	-0.16	-0.01	0.00	0.05

0 3 -251.561541

B	-2.33332900	-0.19080100	-0.00006200
H	-3.15937900	0.66182700	-0.00003700
C	-0.85479200	-0.07227400	-0.00015600
C	1.29501600	0.74213100	0.00005400
C	1.37739100	-0.61136800	-0.00019200
H	-0.43293500	1.99611200	0.00026400
H	2.07376000	1.48504000	0.00013900

H	2.24052800	-1.25386500	-0.00028700
H	-0.18973200	-2.06602200	0.00049300
N	0.08330400	-1.09737300	0.00017900
N	-0.05063000	1.06594200	0.00003500

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		194.7423			306.5682			427.1940		
Red. masses --		4.8812			2.3602			1.3395		
Frc consts --		0.1091			0.1307			0.1440		
IR Inten --		2.5425			7.4881			6.9337		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.30	-0.02	0.23	0.00	0.00	0.00	0.02
2	1	0.00	0.00	0.62	0.45	0.70	0.00	0.00	0.00	-0.29
3	6	0.00	0.00	-0.20	0.01	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.03
4	6	0.00	0.00	0.19	-0.08	0.04	0.00	0.00	0.00	0.04
5	6	0.00	0.00	0.20	0.05	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.03
6	1	0.00	0.00	0.03	-0.20	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.82
7	1	0.00	0.00	0.36	-0.15	0.12	0.00	0.00	0.00	0.09
8	1	0.00	0.00	0.38	0.12	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.14
9	1	0.00	0.00	0.07	0.20	-0.12	0.00	0.00	0.00	-0.43
10	7	0.00	0.00	-0.25	0.09	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.08
11	7	0.00	0.00	-0.26	-0.09	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.13

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		483.9536			545.1252			607.3025		
Red. masses --		1.1937			1.2973			2.6072		
Frc consts --		0.1647			0.2271			0.5665		
IR Inten --		106.3663			13.1608			0.0000		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	-0.01
2	1	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	0.92	0.00	0.00	-0.02
3	6	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.06

4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.24
5	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.24
6	1	0.00	0.00	0.47	0.00	0.00	0.32	0.00	0.00	-0.52
7	1	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.47
8	1	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.41
9	1	0.00	0.00	0.84	0.00	0.00	0.14	0.00	0.00	0.44
10	7	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	0.08
11	7	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.13

5 bh-nhc(Me)₂

0 1 -330.137304

B	-0.00083700	2.13919300	0.19055900
H	-0.01381900	3.09662300	-0.50803500
C	0.00020200	0.68275900	-0.10741600
C	-0.67361400	-1.48483300	0.02601900
C	0.67526500	-1.48445100	0.02508800
H	-1.37099700	-2.30410100	0.06002000
H	1.37306400	-2.30346000	0.05671000
N	1.10182500	-0.16225100	-0.11516500
N	-1.10110200	-0.16303100	-0.11616200
C	-2.44585900	0.33352200	0.06127900
H	-2.49842100	0.95652200	0.96652300
H	-3.13599400	-0.50392300	0.16076300
H	-2.75300500	0.93905900	-0.79672300
C	2.44602800	0.33609900	0.06084400
H	3.13253200	-0.49931900	0.19649600
H	2.48703900	0.98701100	0.94705600
H	2.76659800	0.91401800	-0.81120600

1	2	3
A	A	A

Frequencies --	43.2451	87.0902	130.8050
Red. masses --	1.0186	2.0142	1.4500

Frc consts -- 0.0011 0.0090 0.0146
 IR Inten -- 2.8778 18.3423 3.8960

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.07	0.00	0.00	0.07
2	1	0.27	0.00	0.00	0.01	0.07	0.06	0.01	0.03	0.12
3	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.03
4	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.04	0.00	0.00	0.07
5	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.04	0.00	0.00	0.07
6	1	0.01	-0.01	-0.04	0.01	0.01	0.06	0.00	0.01	0.09
7	1	0.01	0.01	0.04	-0.01	0.01	0.07	0.00	0.01	0.09
8	7	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.11	0.00	0.00	0.02
9	7	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.02
10	6	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.13	-0.01	-0.01	-0.11
11	1	0.12	0.32	-0.22	0.09	-0.29	0.34	-0.20	-0.24	0.04
12	1	0.05	0.01	0.40	-0.01	0.00	-0.12	-0.06	-0.01	-0.50
13	1	-0.16	-0.32	-0.18	0.02	0.30	0.34	0.20	0.23	-0.02
14	6	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.13	0.01	0.00	-0.11
15	1	0.05	-0.02	-0.38	0.01	-0.01	-0.15	0.07	-0.02	-0.51
16	1	0.11	-0.30	0.22	-0.08	-0.30	0.36	0.20	-0.25	0.06
17	1	-0.15	0.30	0.16	-0.03	0.32	0.34	-0.21	0.25	-0.02

4 5 6
 A A A

Frequencies -- 179.9330 185.6177 198.2267
 Red. masses -- 2.6218 2.7780 2.6989
 Frc consts -- 0.0500 0.0564 0.0625
 IR Inten -- 7.8271 17.0667 12.4311

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.06	0.01	-0.02	-0.01	-0.09	0.24	0.31	0.00	0.01
2	1	0.61	-0.01	-0.05	0.02	0.13	0.55	0.71	0.01	0.02
3	6	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.02	-0.09	-0.04	0.00	0.00
4	6	-0.02	-0.01	-0.13	0.00	0.00	0.11	-0.01	0.00	0.04
5	6	-0.02	0.01	0.11	0.00	0.00	0.14	-0.01	0.00	-0.04
6	1	-0.01	-0.02	-0.26	0.00	0.00	0.19	0.00	-0.01	0.08

7	1	-0.01	0.02	0.22	-0.01	0.00	0.24	0.00	0.01	-0.06
8	7	-0.02	0.01	0.21	0.00	-0.02	-0.12	-0.03	0.00	-0.09
9	7	-0.02	0.00	-0.18	0.00	-0.02	-0.16	-0.03	0.00	0.08
10	6	-0.01	-0.05	0.10	0.04	0.05	-0.05	-0.08	-0.10	-0.04
11	1	0.14	-0.18	0.20	0.21	0.22	-0.15	-0.25	-0.15	-0.02
12	1	0.02	-0.08	0.07	0.02	0.09	0.23	-0.02	-0.16	-0.16
13	1	-0.16	0.08	0.24	-0.08	-0.10	-0.11	-0.04	-0.09	-0.05
14	6	0.00	0.04	-0.09	-0.03	0.05	-0.07	-0.09	0.10	0.03
15	1	0.03	0.07	-0.11	-0.02	0.11	0.21	-0.03	0.17	0.18
16	1	0.17	0.15	-0.18	-0.17	0.24	-0.19	-0.27	0.17	0.00
17	1	-0.17	-0.06	-0.22	0.06	-0.13	-0.15	-0.03	0.08	0.04

0 3 -330.146452

B	0.03276600	2.19432200	-0.00001200
H	0.95694500	2.93846700	-0.00001700
C	0.00813100	0.70710000	-0.00002800
C	-0.73902700	-1.44479000	0.00000500
C	0.61884400	-1.49000600	-0.00000700
H	-1.45873000	-2.24530800	0.00000600
H	1.28404300	-2.33668900	0.00000100
N	1.07814100	-0.18868800	-0.00004300
N	-1.11312600	-0.11752400	-0.00002000
C	-2.47436100	0.38450600	0.00003000
H	-2.65094000	0.99978100	0.88537300
H	-3.16232700	-0.46118900	-0.00032000
H	-2.65073300	1.00036100	-0.88494600
C	2.46776200	0.22460400	0.00003900
H	3.10118800	-0.66227700	-0.00005500
H	2.68674900	0.82501600	0.88648600
H	2.68678200	0.82522200	-0.88625900

1

2

3

A

A

A

Frequencies --	31.1901	64.3150	127.2497
Red. masses --	1.1095	1.1260	2.3314
Frc consts --	0.0006	0.0027	0.0222
IR Inten --	0.2320	0.4374	7.1577

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.13
2	1	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.18
3	6	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.08
4	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.07
5	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.08
6	1	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.08
7	1	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.10
8	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.06
9	7	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06
10	6	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.19
11	1	0.14	0.47	-0.35	0.02	0.03	0.00	-0.21	-0.09	-0.17
12	1	0.00	0.00	0.51	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.45
13	1	-0.14	-0.47	-0.35	-0.02	-0.03	0.00	0.21	0.09	-0.17
14	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.20
15	1	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.50	0.00	0.00	-0.51
16	1	0.01	0.00	-0.02	0.10	-0.48	0.36	0.23	-0.14	-0.16
17	1	-0.01	0.00	-0.02	-0.10	0.48	0.36	-0.23	0.14	-0.16

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	213.2856	221.3172	280.2666
Red. masses --	3.4914	3.4753	2.7373
Frc consts --	0.0936	0.1003	0.1267
IR Inten --	0.0021	0.6260	8.3172

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.23	0.00	0.00	-0.13	0.34	-0.02	0.00
2	1	0.00	0.00	0.61	0.00	0.00	0.07	0.64	-0.38	0.00
3	6	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.00	0.06	-0.02	-0.01	0.00
4	6	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	-0.20	-0.02	0.00	0.00

5	6	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	0.09	-0.02	-0.01	0.00
6	1	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	-0.35	-0.02	0.00	0.00
7	1	0.00	0.00	0.36	0.00	0.00	0.14	-0.02	-0.01	0.00
8	7	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.30	-0.04	-0.01	0.00
9	7	0.00	0.00	-0.27	0.00	0.00	-0.17	-0.04	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.11	-0.08	-0.10	0.00
11	1	0.24	0.08	0.03	0.23	0.04	0.13	-0.14	-0.12	0.00
12	1	0.00	0.00	0.30	0.00	0.00	0.32	0.00	-0.16	0.00
13	1	-0.24	-0.08	0.03	-0.23	-0.04	0.13	-0.14	-0.12	0.00
14	6	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.09	-0.09	0.15	0.00
15	1	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.41	0.03	0.23	0.00
16	1	-0.05	0.06	-0.07	0.31	-0.10	-0.10	-0.17	0.19	0.00
17	1	0.05	-0.06	-0.07	-0.31	0.10	-0.10	-0.17	0.19	0.00

6 bh-py

0 1 -273.606534

B	-2.50316200	-0.00021000	-0.13644000
H	-3.12242100	0.00085300	0.88629900
C	-0.33738700	1.18463000	-0.02100400
C	1.03607100	1.19248800	0.01230000
C	1.76841300	0.00000600	0.02981300
C	1.03605400	-1.19248000	0.01251500
C	-0.33738900	-1.18464000	-0.02103200
N	-1.06211500	0.00002200	-0.02939100
H	2.84937500	-0.00003600	0.03472100
H	-0.92142700	2.09320000	-0.07162600
H	1.53597900	2.15377100	0.01742200
H	1.53598900	-2.15374900	0.01777800
H	-0.92145100	-2.09316100	-0.07220400

1	2	3
A	A	A

Frequencies -- 92.4111 169.1696 283.7966

Red. masses --	1.1411	3.5659	5.0248
Frc consts --	0.0057	0.0601	0.2384
IR Inten --	44.7626	5.5987	15.6973

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.04	0.00	-0.01	0.00	0.30	0.00	0.47	0.00
2	1	0.00	0.94	0.00	0.30	0.01	0.48	0.00	0.34	0.00
3	6	-0.01	-0.01	0.05	0.00	0.00	-0.21	-0.08	-0.15	-0.08
4	6	-0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.01	0.09
5	6	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.23	0.00	0.06	0.00
6	6	0.01	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	0.12	0.01	-0.09
7	6	0.01	-0.01	-0.05	0.00	-0.01	-0.21	0.08	-0.15	0.08
8	7	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.00	-0.20	0.00
9	1	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.45	0.00	0.17	0.00
10	1	-0.03	-0.01	0.22	0.00	0.00	-0.34	-0.17	-0.21	-0.30
11	1	-0.02	0.01	-0.05	0.00	0.00	-0.01	-0.22	0.06	0.15
12	1	0.02	0.01	0.05	0.00	0.00	-0.01	0.22	0.06	-0.15
13	1	0.03	-0.01	-0.21	0.00	0.00	-0.35	0.17	-0.21	0.30

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	443.7113	444.1153	526.9635
Red. masses --	2.7813	2.5825	6.5955
Frc consts --	0.3226	0.3001	1.0791
IR Inten --	11.3824	33.8029	20.3716

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.16	0.01	-0.03	0.03	-0.07	0.44	0.00	-0.01
2	1	0.07	-0.56	0.06	-0.43	-0.09	-0.32	0.18	0.00	-0.19
3	6	-0.02	-0.03	0.18	0.01	-0.02	0.00	-0.05	0.18	0.01
4	6	-0.02	0.01	-0.16	0.02	-0.02	-0.14	-0.11	0.16	-0.02
5	6	-0.01	0.02	-0.03	0.04	0.00	0.15	-0.33	0.00	0.03
6	6	0.01	0.00	0.20	0.02	0.02	-0.08	-0.11	-0.16	-0.02
7	6	0.01	-0.04	-0.17	0.01	0.01	-0.05	-0.05	-0.18	0.01
8	7	0.01	-0.04	-0.04	-0.04	-0.01	0.26	0.25	0.00	0.08
9	1	-0.01	0.03	-0.03	0.04	0.00	0.20	-0.33	0.00	-0.10

10	1	-0.05	-0.04	0.35	0.04	-0.01	-0.27	-0.25	0.04	-0.20
11	1	-0.04	0.02	-0.33	0.00	-0.01	-0.46	0.09	0.05	-0.18
12	1	0.03	0.01	0.46	0.01	0.01	-0.33	0.09	-0.05	-0.18
13	1	0.03	-0.05	-0.24	0.06	0.00	-0.36	-0.25	-0.04	-0.20

0 3 -273.625585

B		2.48319200	-0.19754800	0.00056400
H		3.21144000	0.74176700	0.00088000
C		0.41093400	1.15305400	-0.00038400
C		-0.95205500	1.25219700	-0.00000400
C		-1.76466900	0.10150500	0.00035500
C		-1.11509800	-1.14965200	0.00003000
C		0.24813300	-1.23684900	-0.00033000
N		1.06890600	-0.09416600	-0.00014000
H		-2.84335700	0.17517900	0.00082200
H		1.06621300	2.01175000	-0.00070700
H		-1.39336100	2.24192800	-0.00011000
H		-1.68656100	-2.07013500	-0.00003800
H		0.78385600	-2.17511300	-0.00068400

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		149.8680			364.6750			403.2313		
Red. masses --		3.7010			2.8817			2.8299		
Frc consts --		0.0490			0.2258			0.2711		
IR Inten --		1.2343			1.7005			8.5981		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.31	0.02	0.31	0.00	0.00	0.00	-0.07
2	1	0.00	0.00	0.53	-0.44	0.67	0.00	0.00	0.00	-0.49
3	6	0.00	0.00	-0.22	0.06	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.08
4	6	0.00	0.00	0.00	0.09	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05
5	6	0.00	0.00	0.23	0.01	0.06	0.00	0.00	0.00	0.16
6	6	0.00	0.00	0.01	-0.08	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.18

7	6	0.00	0.00	-0.21	-0.06	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.02
8	7	0.00	0.00	-0.10	-0.01	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.28
9	1	0.00	0.00	0.46	0.02	0.13	0.00	0.00	0.00	0.25
10	1	0.00	0.00	-0.37	0.13	-0.18	0.00	0.00	0.00	-0.40
11	1	0.00	0.00	-0.02	0.19	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.27
12	1	0.00	0.00	0.01	-0.17	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.53
13	1	0.00	0.00	-0.34	-0.14	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.18
			4			5			6	
			A			A			A	
Frequencies --		417.7479			528.1478			607.5397		
Red. masses --		3.0838			6.8137			1.2957		
Frc consts --		0.3171			1.1198			0.2818		
IR Inten --		0.7207			0.6316			0.0001		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.05	0.39	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.13
2	1	0.00	0.00	0.05	0.39	0.02	0.00	0.00	0.00	0.95
3	6	0.00	0.00	0.20	-0.05	-0.21	0.00	0.00	0.00	0.02
4	6	0.00	0.00	-0.25	-0.11	-0.17	0.00	0.00	0.00	-0.04
5	6	0.00	0.00	0.06	-0.36	0.03	0.00	0.00	0.00	0.05
6	6	0.00	0.00	0.17	-0.10	0.19	0.00	0.00	0.00	-0.05
7	6	0.00	0.00	-0.21	-0.03	0.18	0.00	0.00	0.00	0.05
8	7	0.00	0.00	0.09	0.27	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01
9	1	0.00	0.00	0.08	-0.36	0.03	0.00	0.00	0.00	0.10
10	1	0.00	0.00	0.37	-0.27	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.12
11	1	0.00	0.00	-0.54	0.12	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.13
12	1	0.00	0.00	0.25	0.10	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.06
13	1	0.00	0.00	-0.56	-0.29	0.03	0.00	0.00	0.00	0.17

7 bh-pyCN

0 1 -365.870147

B	-2.43924200	-1.69220300	-0.13625800
H	-2.88787200	-2.19937700	0.84316400
C	-1.82286100	0.69165900	-0.01435200

C	-0.88864600	1.69420800	0.01626100
C	0.48341900	1.42089600	0.02290900
C	0.85112100	0.06419700	0.00339800
C	-0.09731100	-0.94098400	-0.02007400
N	-1.45569300	-0.65634800	-0.02694900
H	1.22817300	2.20243800	0.02153700
H	-2.88458500	0.88785200	-0.06297200
H	-1.24562600	2.71673000	0.02630900
H	0.17771900	-1.98483300	-0.06439200
C	2.23301500	-0.31408700	0.00351400
N	3.34940500	-0.60895700	0.00519300

		1		2		3				
		A		A		A				
Frequencies --		133.9097		145.1060		158.7503				
Red. masses --		2.7686		3.5735		3.6484				
Frc consts --		0.0293		0.0443		0.0542				
IR Inten --		4.7917		1.6047		7.1583				
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.04	0.01	0.06	0.15	-0.09	-0.03	0.06	-0.05	0.27
2	1	-0.48	0.49	0.11	0.58	-0.54	-0.06	0.07	0.31	0.47
3	6	0.01	-0.01	0.16	-0.03	0.00	0.11	-0.01	-0.01	-0.18
4	6	0.01	-0.02	0.02	-0.06	0.04	0.05	-0.04	0.01	-0.01
5	6	0.01	-0.03	-0.11	-0.04	0.11	-0.12	-0.03	0.04	0.21
6	6	0.00	-0.03	-0.14	0.01	0.12	-0.12	0.01	0.05	0.02
7	6	0.00	-0.03	-0.20	0.04	0.09	-0.03	0.03	0.03	-0.23
8	7	0.00	-0.02	-0.01	0.03	0.02	0.01	0.03	0.00	-0.07
9	1	0.02	-0.04	-0.11	-0.08	0.14	-0.18	-0.05	0.06	0.42
10	1	-0.01	0.00	0.45	-0.04	-0.04	0.19	-0.01	-0.04	-0.27
11	1	0.02	-0.02	0.11	-0.10	0.03	0.12	-0.06	0.00	-0.04
12	1	-0.02	-0.02	-0.38	0.09	0.10	0.05	0.06	0.05	-0.41
13	6	0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.02	-0.03	0.00	0.02	0.00
14	7	0.03	0.08	0.20	-0.10	-0.26	0.13	-0.04	-0.12	0.00

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		172.5533			290.2202			414.3287		
Red. masses --		1.8827			5.7077			5.0342		
Frc consts --		0.0330			0.2832			0.5092		
IR Inten --		28.5235			8.2608			18.1833		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.07	0.05	0.08	-0.35	0.31	0.01	0.12	-0.11	-0.06
2	1	0.70	-0.57	0.12	-0.14	0.12	0.01	-0.59	0.16	-0.25
3	6	0.01	0.03	-0.05	0.03	-0.16	-0.08	0.01	0.03	-0.13
4	6	0.04	0.00	0.07	-0.11	-0.08	0.12	0.04	0.02	0.03
5	6	0.03	-0.05	0.01	-0.06	0.04	-0.01	0.04	0.01	0.15
6	6	-0.01	-0.07	-0.10	0.07	0.10	-0.11	-0.02	0.00	-0.13
7	6	-0.05	-0.03	-0.05	0.15	-0.03	0.09	-0.03	0.01	0.16
8	7	-0.04	0.02	-0.02	0.12	-0.13	-0.01	-0.03	0.00	0.18
9	1	0.06	-0.08	0.04	-0.15	0.13	-0.02	0.05	-0.01	0.21
10	1	0.02	0.07	-0.19	0.01	-0.26	-0.33	0.03	0.07	-0.38
11	1	0.08	0.01	0.11	-0.22	-0.12	0.21	0.05	0.02	-0.04
12	1	-0.09	-0.05	0.09	0.25	-0.01	0.38	-0.02	0.02	0.03
13	6	0.00	-0.03	-0.04	0.09	0.14	-0.09	-0.04	-0.03	-0.41
14	7	0.03	0.12	0.09	0.03	-0.12	0.06	-0.03	0.02	0.18

0 3 -365.890088

B	2.44090500	-1.69311300	0.00064400
H	2.16410500	-2.84729900	0.00115900
C	1.84531500	0.70518200	-0.00051200
C	0.91895600	1.70842300	-0.00000400
C	-0.46022000	1.43236300	0.00053500
C	-0.84425800	0.06599100	0.00010500
C	0.09742300	-0.93390300	-0.00037400
N	1.47160200	-0.65483200	-0.00014800
H	-1.20338400	2.21593600	0.00134300
H	2.91154400	0.87745600	-0.00101300

H	1.27101100	2.73252600	-0.00022000
H	-0.16676400	-1.98082600	-0.00072200
C	-2.22924300	-0.29722400	-0.00004900
N	-3.35001300	-0.57620000	-0.00013400

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		139.9058			146.9854			152.2516		
Red. masses --		4.9934			4.3745			7.1672		
Frc consts --		0.0576			0.0557			0.0979		
IR Inten --		1.2128			2.7984			5.5541		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.36	-0.25	-0.15	0.00
2	1	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	0.51	-0.45	-0.10	0.00
3	6	0.00	0.00	0.29	0.00	0.00	-0.13	0.04	-0.03	0.00
4	6	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	0.05	0.13	0.05	0.00
5	6	0.00	0.00	-0.28	0.00	0.00	0.16	0.09	0.20	0.00
6	6	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	-0.10	-0.02	0.23	0.00
7	6	0.00	0.00	-0.14	0.00	0.00	-0.32	-0.11	0.16	0.00
8	7	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.11	-0.09	0.00	0.00
9	1	0.00	0.00	-0.41	0.00	0.00	0.37	0.18	0.28	0.00
10	1	0.00	0.00	0.59	0.00	0.00	-0.17	0.06	-0.13	-0.01
11	1	0.00	0.00	0.24	0.00	0.00	0.11	0.24	0.02	0.00
12	1	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	-0.49	-0.22	0.19	0.00
13	6	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.07	0.00
14	7	0.00	0.00	0.30	0.00	0.00	0.13	0.16	-0.49	0.00

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		355.6176			390.5220			400.6045		
Red. masses --		3.2722			6.0453			2.8285		
Frc consts --		0.2438			0.5432			0.2674		
IR Inten --		0.5291			4.6134			3.7366		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	5	0.25	0.21	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.03
2	1	0.81	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.24	0.00	0.00	0.44
3	6	-0.03	-0.12	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00	-0.12
4	6	0.08	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.24
5	6	0.05	0.03	0.00	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	-0.10
6	6	-0.06	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	-0.07
7	6	-0.12	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.16	0.00	0.00	0.18
8	7	-0.08	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.27	0.00	0.00	-0.20
9	1	0.11	0.09	0.00	0.00	0.00	0.34	0.00	0.00	-0.17
10	1	-0.01	-0.20	0.00	0.00	0.00	-0.59	0.00	0.00	-0.12
11	1	0.16	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.56
12	1	-0.19	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	0.53
13	6	-0.09	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.43	0.00	0.00	-0.04
14	7	-0.04	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	0.02

8 bh-py(NH₂)

0 1 -328.965117

B	-3.00563200	0.09400800	0.23792300
H	-3.52749700	-0.78616700	-0.40608800
C	-0.83905500	-1.13279700	-0.06817000
C	0.53053800	-1.20045300	0.01399800
C	1.30070900	-0.02302500	-0.00308200
C	0.59312600	1.19673100	-0.08067200
C	-0.77540500	1.21042900	-0.02987900
N	-1.52886700	0.06093800	-0.01612700
H	-1.45274700	-2.01822700	-0.15919700
H	1.00948500	-2.17335600	0.01550400
H	-1.34753700	2.12422300	0.05362300
H	1.12356700	2.14141900	-0.11223600
N	2.68103800	-0.05777500	-0.00416500
H	3.16934800	0.79857200	0.20685600
H	3.12886600	-0.88396400	0.36079400

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	90.6174	237.6114	309.1931
Red. masses --	3.6803	2.9454	3.3769
Frc consts --	0.0178	0.0980	0.1902
IR Inten --	5.6300	33.5468	79.5583

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.06	-0.04	0.34	0.00	-0.14	0.02	-0.01	0.32	0.00
2	1	-0.05	-0.22	0.66	0.14	-0.49	0.37	-0.18	0.05	0.49
3	6	-0.02	0.02	-0.18	-0.01	0.06	-0.06	0.00	-0.09	-0.07
4	6	-0.01	0.00	-0.10	-0.03	0.03	0.18	0.03	-0.10	0.07
5	6	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.13	0.00	-0.09	0.04
6	6	0.00	0.00	-0.10	0.02	0.03	0.16	-0.02	-0.08	0.06
7	6	0.01	0.02	-0.15	0.02	0.06	-0.05	0.02	-0.09	0.01
8	7	0.00	0.03	-0.08	0.00	0.06	-0.17	0.01	-0.08	-0.08
9	1	-0.03	0.04	-0.26	-0.02	0.07	-0.14	-0.01	-0.08	-0.13
10	1	-0.02	-0.01	-0.10	-0.05	0.01	0.24	0.03	-0.10	0.15
11	1	0.02	0.03	-0.19	0.02	0.06	-0.13	-0.01	-0.12	0.07
12	1	0.02	-0.01	-0.12	0.05	0.02	0.22	-0.01	-0.09	0.13
13	7	-0.02	0.00	0.21	-0.02	-0.06	-0.15	-0.02	0.20	-0.02
14	1	-0.05	0.00	0.28	0.10	-0.10	-0.26	-0.16	0.30	-0.13
15	1	-0.05	-0.01	0.23	0.05	-0.13	-0.40	0.30	0.22	-0.38

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	333.7400	369.3188	398.8236
Red. masses --	1.0292	1.6140	3.2419
Frc consts --	0.0675	0.1297	0.3038
IR Inten --	14.2001	631.1303	2.0713

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.01	0.00	0.00	0.04	-0.06	0.11	-0.11	0.06	0.05
2	1	0.00	0.02	-0.04	-0.26	0.61	-0.54	-0.14	0.03	0.10
3	6	0.00	0.00	0.02	-0.03	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.18
4	6	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.06	0.03	0.04	-0.20

5	6	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.03	0.06	0.06	0.03	0.01
6	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.05	0.03	0.01	0.00	0.22
7	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.05	-0.02	-0.05	-0.21
8	7	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.04	-0.05	-0.03	-0.05
9	1	0.01	-0.01	0.06	-0.02	-0.01	-0.03	0.04	-0.06	0.49
10	1	0.00	0.01	0.06	-0.06	-0.03	0.09	0.01	0.03	-0.36
11	1	0.00	0.00	-0.05	0.06	0.04	-0.09	-0.01	-0.02	-0.45
12	1	-0.01	0.00	-0.08	0.01	-0.06	0.00	-0.06	0.04	0.41
13	7	0.00	0.02	0.00	0.06	0.05	-0.09	0.07	-0.02	0.00
14	1	0.02	-0.16	0.69	-0.14	0.09	0.28	0.10	-0.04	-0.01
15	1	-0.03	-0.28	-0.64	0.03	0.17	0.23	0.04	-0.03	0.02

0 3 -328.983931

B	-2.97271800	0.11066700	0.01531200
H	-3.66174300	-0.85862300	0.02073000
C	-0.83926800	-1.15195500	-0.00389000
C	0.52522300	-1.20006200	-0.00684000
C	1.30404700	-0.02171600	0.00016900
C	0.59265500	1.20064600	-0.00624300
C	-0.77113600	1.23101900	-0.00303200
N	-1.55498900	0.06314300	0.00287800
H	-1.45217000	-2.04110000	-0.00512400
H	1.00341500	-2.17378200	-0.01791400
H	-1.33496500	2.15246700	-0.00357800
H	1.12573300	2.14518000	-0.01706800
N	2.69949500	-0.06001800	-0.07141300
H	3.17427100	0.76171500	0.27513700
H	3.12837700	-0.90866300	0.27001200

1	2	3
A	A	A

Frequencies --	103.0848	225.7061	270.6707
Red. masses --	4.1181	1.0521	4.4436

Frc consts	--	0.0258		0.0316		0.1918
IR Inten	--	0.8888		17.7617		6.2319

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.36	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.15
2	1	0.00	0.00	0.54	-0.01	0.02	0.00	0.01	0.00	0.38
3	6	0.00	0.00	-0.18	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.16
4	6	0.00	0.00	-0.14	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.19
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.27
6	6	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.21
7	6	0.00	0.00	-0.17	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.15
8	7	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.21
9	1	0.00	0.00	-0.26	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.00	-0.27
10	1	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.24
11	1	0.00	0.00	-0.23	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.25
12	1	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.27
13	7	0.01	0.00	0.24	0.00	0.05	0.00	-0.02	0.00	-0.19
14	1	-0.05	0.00	0.33	0.01	-0.23	0.66	0.11	0.01	-0.38
15	1	-0.05	0.00	0.33	-0.02	-0.23	-0.67	0.11	0.00	-0.35

	4		5		6
	A		A		A

Frequencies	--	305.0613		411.0640		414.2249
Red. masses	--	3.0433		2.7544		2.7818
Frc consts	--	0.1669		0.2742		0.2812
IR Inten	--	0.2310		1.2221		9.6760

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	0.28	0.00	-0.01	0.17	0.00	0.00	-0.02	0.02
2	1	-0.32	0.52	0.00	-0.35	0.42	0.04	0.04	-0.04	0.37
3	6	-0.01	-0.10	0.00	0.07	-0.09	0.02	-0.01	0.01	0.20
4	6	0.02	-0.11	0.00	0.08	0.11	-0.02	-0.01	-0.01	-0.15
5	6	0.00	-0.10	0.00	0.02	0.14	-0.01	0.00	-0.02	-0.13
6	6	-0.02	-0.10	0.00	-0.06	0.11	0.02	0.01	-0.01	0.20
7	6	0.02	-0.10	0.00	-0.08	-0.09	-0.01	0.01	0.01	-0.12
8	7	0.00	-0.07	0.00	-0.01	-0.13	-0.02	0.00	0.01	-0.15

9	1	-0.02	-0.09	0.00	0.18	-0.17	0.06	-0.02	0.02	0.60
10	1	0.01	-0.11	0.00	0.21	0.18	-0.02	-0.03	-0.02	-0.07
11	1	0.02	-0.09	0.00	-0.18	-0.16	-0.01	0.02	0.02	-0.10
12	1	-0.01	-0.11	0.00	-0.20	0.19	0.07	0.02	-0.02	0.54
13	7	0.01	0.22	0.00	0.02	-0.15	0.00	0.01	0.02	0.02
14	1	-0.23	0.37	-0.04	0.26	-0.27	-0.04	-0.07	0.01	0.15
15	1	0.27	0.36	0.03	-0.25	-0.26	0.07	-0.01	0.01	0.03

9 bh-nhc(NO₂)₂

0 1 -660.556335

B	-3.73851900	-0.00044800	0.00062000
N	-1.47034600	1.12363200	-0.21119900
C	-0.15876200	0.71465100	-0.06137200
C	-0.15834700	-0.71439000	0.06128800
N	-1.46969500	-1.12417400	0.21070200
C	-2.32645700	-0.00054300	-0.00004900
N	0.90274200	1.45875400	-0.00044300
O	2.10454900	0.56693000	0.40327600
O	1.07324600	2.67725100	-0.00758800
N	0.90357400	-1.45796800	0.00023300
O	1.07406200	-2.67659700	0.00777600
O	2.10433600	-0.56710400	-0.40309300
H	-4.90416800	-0.00079300	-0.00003700
H	-1.72822300	2.03998600	0.12807700
H	-1.72709400	-2.04079300	-0.12834900

1	2	3
A	A	A

Frequencies --	81.7524	108.1999	171.9621
Red. masses --	5.1546	13.6849	5.2299
Frc consts --	0.0203	0.0944	0.0911
IR Inten --	1.4226	2.3626	0.6973

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.05	0.44	0.00	0.10	-0.10	-0.02	0.00	0.00
2	7	0.01	-0.01	-0.23	0.02	0.02	-0.02	-0.02	0.05	0.34
3	6	0.00	-0.01	-0.12	0.02	-0.05	-0.20	-0.01	0.01	0.09
4	6	0.00	-0.01	-0.12	-0.02	-0.05	-0.20	-0.01	-0.01	-0.09
5	7	-0.01	-0.01	-0.23	-0.02	0.02	-0.02	-0.02	-0.05	-0.34
6	6	0.00	0.02	-0.05	0.00	0.03	-0.01	-0.02	0.00	0.00
7	7	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.03	0.02	0.01	0.00	-0.10
8	8	-0.04	0.00	0.09	0.10	0.00	-0.33	0.04	0.04	-0.06
9	8	-0.02	0.00	0.05	-0.12	-0.01	0.50	-0.01	0.00	-0.11
10	7	0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.03	0.02	0.01	0.00	0.10
11	8	0.02	0.00	0.05	0.12	-0.01	0.50	-0.01	0.00	0.11
12	8	0.04	0.00	0.09	-0.10	0.00	-0.33	0.04	-0.04	0.06
13	1	0.00	0.01	0.67	0.00	0.21	-0.07	-0.02	0.00	0.00
14	1	0.03	0.02	-0.30	0.10	-0.02	0.16	0.00	-0.03	0.58
15	1	-0.03	0.02	-0.30	-0.10	-0.02	0.16	0.00	0.03	-0.58

4
5
6
A
A
A

Frequencies -- 189.1446 231.2773 247.2955
 Red. masses -- 4.0746 7.5984 14.3120
 Frc consts -- 0.0859 0.2395 0.5157
 IR Inten -- 7.2606 0.3237 0.1609

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.35	-0.03	0.00	0.12	0.06	-0.09	0.00	0.00
2	7	0.04	-0.04	0.05	0.07	-0.06	-0.14	-0.08	0.03	0.05
3	6	0.01	-0.10	-0.03	0.02	-0.05	0.31	-0.08	0.02	0.10
4	6	-0.01	-0.10	-0.03	-0.02	-0.05	0.31	-0.08	-0.02	-0.10
5	7	-0.04	-0.04	0.04	-0.07	-0.06	-0.14	-0.08	-0.03	-0.04
6	6	0.00	0.00	0.05	0.00	-0.01	-0.15	-0.08	0.00	0.00
7	7	-0.03	-0.06	-0.03	0.00	-0.02	0.24	0.01	-0.09	0.25
8	8	-0.04	0.05	0.06	0.14	0.07	-0.17	-0.21	-0.16	0.22
9	8	-0.18	-0.03	-0.06	-0.04	-0.01	-0.07	0.40	-0.15	-0.24
10	7	0.03	-0.06	-0.03	0.00	-0.02	0.24	0.01	0.09	-0.25

11	8	0.18	-0.03	-0.06	0.04	-0.01	-0.07	0.40	0.15	0.24
12	8	0.04	0.05	0.06	-0.14	0.08	-0.17	-0.21	0.16	-0.22
13	1	0.00	0.81	-0.11	0.00	0.13	-0.23	-0.09	0.00	0.00
14	1	0.13	-0.04	0.13	-0.03	0.02	-0.45	-0.11	-0.02	0.15
15	1	-0.13	-0.04	0.13	0.03	0.02	-0.45	-0.12	0.02	-0.14

0 3 -660.654258

B		-3.55613100	-0.98546000	0.00866600
N		-1.56378100	0.70970600	0.01029400
C		-0.19762200	0.65594800	0.00352000
C		0.14670500	-0.67691100	0.00206400
N		-1.01043400	-1.39137900	-0.00249900
C		-2.13523900	-0.56869700	0.00579900
N		0.55086200	1.88535400	-0.04917700
O		1.74488200	1.84487800	-0.29398200
O		-0.12499500	2.90242900	0.13711300
N		1.40740300	-1.39227100	0.04400700
O		1.31999000	-2.59469800	-0.20646400
O		2.41732800	-0.78611600	0.34358400
H		-4.53801100	-0.32632900	0.02420800
H		-2.07347000	1.58223300	0.02678300
H		-1.03692400	-2.40246100	-0.02299700

		1		2		3				
		A		A		A				
Frequencies --		37.8016		46.5548		120.1990				
Red. masses --		15.4551		15.5423		5.9972				
Frc consts --		0.0130		0.0198		0.0511				
IR Inten --		4.5495		5.4917		7.3977				
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	0.04	-0.09	0.03	-0.04	0.11	0.01	-0.01	0.44
2	7	0.03	-0.01	-0.07	0.00	0.01	0.08	0.00	0.00	-0.25
3	6	0.02	-0.01	-0.04	0.02	0.03	0.07	0.00	0.00	-0.21

4	6	0.03	-0.01	-0.04	0.01	0.02	0.07	0.00	0.00	-0.19
5	7	0.02	-0.01	-0.04	0.02	0.03	0.09	0.00	0.00	-0.20
6	6	0.02	0.00	-0.07	0.02	0.01	0.09	0.00	0.00	-0.06
7	7	-0.02	0.05	0.10	-0.02	0.03	0.01	0.01	0.00	0.01
8	8	0.00	0.13	0.24	0.11	0.02	0.62	0.04	0.03	0.14
9	8	-0.10	0.00	0.08	-0.17	0.06	-0.63	-0.01	-0.02	0.07
10	7	0.00	-0.05	-0.04	0.01	-0.04	-0.09	-0.01	-0.01	0.00
11	8	-0.15	-0.17	0.57	-0.05	0.00	-0.26	0.02	-0.02	0.07
12	8	0.14	0.03	-0.66	0.04	-0.13	-0.05	-0.05	0.00	0.12
13	1	0.03	0.08	-0.12	0.00	-0.08	0.09	0.00	-0.02	0.74
14	1	0.04	0.00	-0.04	0.02	0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.10
15	1	0.03	-0.01	0.01	0.02	0.03	0.03	0.00	0.00	-0.06

4

5

6

A

A

A

Frequencies --

168.6902

179.0595

186.3582

Red. masses --

7.0758

12.6512

4.8216

Frc consts --

0.1186

0.2390

0.0987

IR Inten --

0.9991

2.7144

10.7002

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.05	-0.03	-0.01	0.14	-0.09	-0.01	-0.10	0.39	0.01
2	7	0.03	0.01	0.37	0.08	0.03	-0.17	0.10	-0.05	0.01
3	6	0.04	0.03	0.18	0.09	0.07	-0.09	0.06	-0.11	0.01
4	6	0.03	0.02	-0.19	0.11	0.06	0.08	0.02	-0.12	0.01
5	7	0.04	0.03	-0.38	0.11	0.07	0.18	-0.04	-0.08	0.01
6	6	0.04	0.01	-0.01	0.11	0.03	0.01	0.01	0.02	0.01
7	7	-0.02	0.05	-0.01	-0.08	0.18	-0.03	-0.02	-0.02	0.00
8	8	-0.04	0.07	-0.11	-0.08	0.39	-0.13	-0.04	0.15	-0.01
9	8	-0.06	0.05	-0.13	-0.23	0.06	0.13	-0.17	-0.12	-0.02
10	7	0.00	-0.05	0.01	0.00	-0.18	0.03	0.03	-0.05	0.00
11	8	-0.05	-0.08	0.14	-0.26	-0.14	-0.11	0.15	-0.05	-0.04
12	8	-0.01	-0.09	0.11	0.13	-0.45	0.12	-0.02	0.05	0.03
13	1	0.03	-0.07	0.33	0.07	-0.19	-0.17	0.16	0.78	0.01
14	1	0.04	0.01	0.44	0.08	0.03	-0.18	0.15	-0.02	0.00

15 1 0.05 0.03 -0.47 0.14 0.07 0.21 -0.09 -0.08 0.00

10 bh-nhc(CN)₂

0 1 -436.076941

B	3.33594600	-0.00000300	0.22934700
N	1.06612500	-1.12086700	-0.16338700
C	-0.25617700	-0.68014300	-0.01995800
C	-0.25614500	0.68014300	-0.01995500
N	1.06625300	1.12081900	-0.16347500
C	1.93959700	-0.00012000	-0.03082700
H	4.49800500	0.00005100	0.11614100
H	1.33035700	-2.02191600	0.20439900
H	1.33047400	2.02151100	0.20522400
C	-1.34941700	-1.56946200	0.01497900
C	-1.34931400	1.56953400	0.01493700
N	-2.22411300	-2.32477400	0.06148200
N	-2.22395400	2.32491600	0.06144200

	1	2	3
	A	A	A

Frequencies --	97.3522	109.8190	141.1486
Red. masses --	6.5021	11.1563	5.4299
Frc consts --	0.0363	0.0793	0.0637
IR Inten --	8.9734	5.8718	0.0266

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.12	0.00	0.44	0.06	0.00	0.19	0.00	0.19	0.00
2	7	-0.02	0.02	-0.22	0.11	-0.01	-0.11	0.03	-0.06	0.28
3	6	-0.02	0.00	-0.16	0.11	0.00	-0.08	0.01	-0.06	0.13
4	6	-0.02	0.00	-0.16	0.11	0.00	-0.08	-0.01	-0.06	-0.13
5	7	-0.02	-0.02	-0.22	0.11	0.01	-0.11	-0.03	-0.06	-0.28
6	6	-0.04	0.00	-0.03	0.09	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
7	1	-0.10	0.00	0.57	0.08	0.00	0.39	0.00	0.35	0.00
8	1	-0.02	-0.02	-0.30	0.10	0.00	-0.08	0.05	0.04	0.51

9	1	-0.02	0.02	-0.30	0.10	0.00	-0.08	-0.05	0.04	-0.51
10	6	0.02	-0.04	0.01	-0.01	0.16	0.00	-0.02	-0.03	0.01
11	6	0.02	0.04	0.01	-0.01	-0.16	0.00	0.02	-0.03	-0.01
12	7	0.09	-0.12	0.19	-0.27	0.47	0.10	-0.10	0.05	-0.22
13	7	0.09	0.12	0.19	-0.27	-0.47	0.10	0.09	0.05	0.22

	4		5		6
	A		A		A

Frequencies --	173.9558	195.9364	221.5171
Red. masses --	5.6112	2.1448	2.1029
Frc consts --	0.1000	0.0485	0.0608
IR Inten --	1.1257	107.7710	144.8326

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.30	0.00	0.00	0.00	0.17	0.04	0.00	0.06
2	7	0.09	-0.05	-0.15	0.00	0.04	-0.05	0.01	0.02	0.10
3	6	0.04	-0.16	-0.07	0.01	0.00	0.12	-0.01	0.00	-0.14
4	6	-0.04	-0.16	0.07	0.01	0.00	0.12	-0.01	0.00	-0.14
5	7	-0.09	-0.05	0.15	0.00	-0.04	-0.05	0.01	-0.02	0.10
6	6	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.01	0.00	0.03
7	1	0.00	0.69	0.00	-0.08	0.00	-0.78	-0.05	0.00	-0.95
8	1	0.17	-0.04	-0.19	0.08	-0.06	-0.36	-0.01	-0.03	-0.02
9	1	-0.17	-0.04	0.19	0.08	0.06	-0.36	-0.01	0.03	-0.02
10	6	0.00	-0.11	-0.03	0.01	0.00	0.07	-0.01	-0.01	-0.07
11	6	0.00	-0.11	0.03	0.01	0.00	0.07	-0.01	0.01	-0.07
12	7	-0.21	0.14	0.09	-0.01	0.01	-0.08	-0.01	0.00	0.08
13	7	0.21	0.14	-0.09	-0.01	-0.01	-0.08	-0.01	0.00	0.08

0 3 -436.084104

B	-3.41053400	-0.18214600	0.00034400
N	-1.10271300	1.03567600	-0.00026800
C	0.23297300	0.68737600	-0.00018800
C	0.28612700	-0.68710300	-0.00014900
N	-1.01556500	-1.13985600	-0.00000100
C	-1.93428900	-0.09046200	0.00000000

H	-4.22630100	0.67556000	0.00032300
H	-1.45328200	1.98054000	0.00029300
H	-1.29720900	-2.10829000	-0.00058400
C	1.28782400	1.62346400	-0.00007300
C	1.41178500	-1.53748500	-0.00002900
N	2.13157700	2.41374700	0.00021600
N	2.31855100	-2.25411500	0.00017900

1 2 3
A A A

Frequencies --	107.9015	110.0934	148.8600
Red. masses --	13.1206	6.4889	6.4752
Frc consts --	0.0900	0.0463	0.0845
IR Inten --	4.0250	7.4388	0.1202

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.12	0.01	0.00	0.00	0.00	0.44	0.00	0.00	-0.03
2	7	0.12	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	0.35
3	6	0.13	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	0.18
4	6	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	-0.16
5	7	0.12	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	-0.34
6	6	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.01
7	1	0.12	0.01	0.00	0.00	0.00	0.72	0.00	0.00	0.24
8	1	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.50
9	1	0.13	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.52
10	6	-0.02	0.18	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.04
11	6	-0.01	-0.18	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.03
12	7	-0.35	0.53	0.00	0.00	0.00	0.22	0.00	0.00	-0.26
13	7	-0.30	-0.55	0.00	0.00	0.00	0.24	0.00	0.00	0.25

4 5 6
A A A

Frequencies --	170.4163	233.4466	306.7227
Red. masses --	6.1336	9.2888	3.1017
Frc consts --	0.1050	0.2983	0.1719
IR Inten --	8.4457	9.7463	1.9814

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.02	0.37	0.00	0.00	0.00	0.22	-0.01	0.22	0.00
2	7	0.10	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.29	-0.09	-0.09	0.00
3	6	0.06	-0.18	0.00	0.00	0.00	0.36	-0.08	0.05	0.00
4	6	-0.05	-0.18	0.00	0.00	0.00	0.36	0.07	0.05	0.00
5	7	-0.10	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.27	0.09	-0.09	0.00
6	6	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.01	-0.15	0.00
7	1	0.26	0.64	0.00	0.00	0.00	0.53	0.46	0.69	0.00
8	1	0.19	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.21	-0.14	0.00
9	1	-0.19	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.02	0.21	-0.12	0.00
10	6	0.01	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.22	-0.13	0.09	0.00
11	6	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.22	0.11	0.11	0.00
12	7	-0.25	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.21	0.04	-0.08	0.00
13	7	0.23	0.17	0.00	0.00	0.00	-0.21	-0.04	-0.08	0.00

11 bh-nhcCN

0 1 -343.816540

B	-2.82768600	-0.92468300	0.21332500
N	-1.27235000	1.08737700	-0.07376600
C	0.08519700	1.30077800	0.03911400
C	0.70902100	0.10170800	0.00458400
N	-0.28396700	-0.90454000	-0.17174100
C	-1.55856300	-0.29773600	-0.04105200
H	-3.83487900	-1.37124000	-0.18750700
H	-1.95991000	1.79316700	0.12628800
H	-0.12825900	-1.81062700	0.24140800
C	2.08653700	-0.18396500	0.01546400
N	3.21598900	-0.44025500	0.04091000
H	0.51062500	2.28932700	0.07670900

1	2	3
A	A	A

Frequencies -- 107.4661 152.6993 187.2152

Red. masses --	4.2195	5.5617	5.0552
Frc consts --	0.0287	0.0764	0.1044
IR Inten --	2.2148	20.6015	72.6691

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.09	-0.03	0.29	-0.14	0.23	0.05	-0.07	-0.03	-0.04
2	7	-0.02	0.02	-0.04	0.07	-0.03	-0.03	0.02	-0.03	0.33
3	6	-0.01	0.02	0.00	0.08	-0.17	0.05	0.03	0.00	-0.21
4	6	-0.01	0.03	-0.15	-0.02	-0.22	0.00	0.02	-0.01	-0.32
5	7	0.00	0.05	-0.31	-0.10	-0.14	-0.10	-0.04	0.01	0.04
6	6	0.01	0.00	-0.03	-0.05	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	0.10
7	1	0.03	-0.14	0.57	-0.34	0.46	0.31	0.07	0.20	-0.70
8	1	0.00	-0.05	0.29	0.15	0.01	0.11	-0.01	0.08	-0.18
9	1	0.06	-0.04	-0.52	-0.20	-0.15	-0.06	0.03	-0.01	-0.02
10	6	-0.01	0.00	0.02	0.01	-0.07	0.00	0.01	-0.02	-0.12
11	7	-0.03	-0.06	0.22	0.12	0.39	0.04	0.02	0.04	0.21
12	1	-0.02	0.02	0.13	0.18	-0.22	0.10	0.04	0.00	-0.28

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	238.3211	283.7598	332.1959
Red. masses --	1.5064	2.3081	1.2079
Frc consts --	0.0504	0.1095	0.0785
IR Inten --	411.5889	10.9595	150.0065

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.04	0.01	0.16	0.07	-0.16	0.02	-0.04	0.04	0.00
2	7	0.01	-0.05	-0.02	0.05	0.10	-0.02	-0.03	0.00	-0.07
3	6	-0.01	0.00	0.02	0.08	-0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.02
4	6	0.01	0.00	0.05	-0.03	-0.07	0.03	0.00	0.00	-0.01
5	7	-0.01	0.05	0.00	-0.11	0.04	0.02	0.01	0.01	0.06
6	6	0.01	-0.02	-0.07	-0.06	0.14	0.00	0.02	-0.03	0.03
7	1	0.17	0.23	-0.69	0.41	-0.74	-0.21	0.09	0.02	-0.32
8	1	-0.06	-0.01	-0.41	0.12	0.15	0.09	0.07	-0.16	0.87
9	1	0.00	-0.14	-0.45	-0.18	-0.03	-0.09	0.07	-0.11	-0.25
10	6	0.01	-0.01	0.05	-0.04	-0.11	0.02	0.01	0.00	-0.02

11	7	0.01	0.01	-0.04	0.01	0.08	-0.02	0.01	0.00	0.01
12	1	-0.03	0.01	0.04	0.18	-0.06	-0.06	-0.01	0.00	-0.02

0 3 -343.826668

B		-2.91496600	-0.87529300	-0.00021000
N		-1.25560300	1.09603700	-0.00068400
C		0.08848400	1.32288800	0.00012200
C		0.70789100	0.10404000	0.00029600
N		-0.30482600	-0.85781200	0.00025300
C		-1.56508200	-0.26619300	0.00030500
H		-3.23771700	-2.01547300	-0.00153000
H		-1.97485800	1.80192900	0.00226800
H		-0.16064300	-1.85412200	0.00110500
C		2.08298800	-0.20074400	0.00027600
N		3.20891000	-0.47017000	-0.00046700
H		0.52299700	2.30779500	-0.00049700

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		123.9349			152.5148			220.0809		
Red. masses --		7.4055			6.5537			5.9035		
Frc consts --		0.0670			0.0898			0.1685		
IR Inten --		2.5977			13.3378			7.8216		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.39	-0.18	0.25	0.00	0.00	0.00	-0.21
2	7	0.00	0.00	0.05	0.09	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.29
3	6	0.00	0.00	-0.02	0.10	-0.18	0.00	0.00	0.00	-0.23
4	6	0.00	0.00	-0.27	-0.02	-0.24	0.00	0.00	0.00	-0.32
5	7	0.00	0.00	-0.44	-0.11	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.18
6	6	0.00	0.00	-0.04	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.21
7	1	0.00	0.00	0.47	-0.46	0.34	0.00	0.00	0.00	-0.58
8	1	0.00	0.00	0.32	0.16	0.03	0.00	0.00	0.00	0.19
9	1	0.00	0.00	-0.34	-0.22	-0.17	0.00	0.00	0.00	-0.29

10	6	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.16
11	7	0.00	0.00	0.34	0.15	0.44	0.00	0.00	0.00	0.00	0.20
12	1	0.00	0.00	0.14	0.21	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.35
		4			5			6			
		A			A			A			
Frequencies --		308.6496			386.3032			473.6655			
Red. masses --		2.6529			1.2446			5.5442			
Frc consts --		0.1489			0.1094			0.7329			
IR Inten --		4.0583			40.2554			7.8179			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	5	-0.10	0.20	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.02	
2	7	-0.04	-0.12	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.15	
3	6	-0.08	0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.23	
4	6	0.04	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.04	
5	7	0.12	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	0.14	
6	6	0.06	-0.14	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.09	
7	1	-0.73	0.39	0.00	0.00	0.00	0.26	0.00	0.00	0.25	
8	1	-0.13	-0.21	0.00	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	0.39	
9	1	0.24	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.94	0.00	0.00	0.55	
10	6	0.05	0.13	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.50	
11	7	0.01	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.20	
12	1	-0.19	0.06	0.00	0.00	0.00	0.16	0.00	0.00	0.29	

12 bh-nhc(OMe)₂

0 1 -480.584387

B	-3.21401700	-0.00365700	0.56907000
N	-1.11030700	1.18176900	-0.19238700
C	0.22208600	0.66929000	-0.33224800
C	0.22358400	-0.66889000	-0.33229400
N	-1.10767700	-1.18430500	-0.19246000
C	-1.91342000	-0.00218700	0.04294300
H	-4.32553300	-0.00490200	0.92739400
H	-1.39536800	1.72141100	-1.00968800

H	-1.39155400	-1.72459300	-1.00972900
O	1.25772400	1.51972000	-0.49200800
O	1.26108000	-1.51705100	-0.49209900
C	1.49874100	-2.41256300	0.60808500
H	2.32074200	-3.05673500	0.29943500
H	1.78439400	-1.84756100	1.50104600
H	0.61149800	-3.01207600	0.82345800
C	1.49297400	2.41620000	0.60789400
H	1.77736300	1.85208300	1.50181700
H	2.31515900	3.06055500	0.30012900
H	0.60504600	3.01540300	0.82130000

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		53.7388			80.2551			88.0004		
Red. masses --		2.5135			1.9788			3.4061		
Frc consts --		0.0043			0.0075			0.0155		
IR Inten --		4.1352			8.2747			4.2824		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.09	0.00	-0.12	0.00	-0.04	0.00	0.14	0.00	0.26
2	7	-0.02	-0.01	0.05	-0.04	0.00	-0.06	-0.03	0.01	-0.16
3	6	-0.03	0.00	-0.03	-0.02	0.04	-0.03	-0.02	0.00	-0.08
4	6	-0.03	0.00	-0.03	0.02	0.04	0.03	-0.02	0.00	-0.08
5	7	-0.02	0.01	0.05	0.04	0.00	0.06	-0.03	-0.01	-0.16
6	6	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.04
7	1	-0.13	0.00	-0.24	0.00	-0.06	0.00	0.23	0.00	0.52
8	1	-0.04	0.08	0.12	-0.06	-0.05	-0.08	-0.02	-0.10	-0.24
9	1	-0.04	-0.08	0.12	0.06	-0.05	0.08	-0.02	0.10	-0.24
10	8	-0.04	0.01	-0.05	-0.06	0.08	-0.07	0.00	-0.01	0.01
11	8	-0.04	-0.01	-0.05	0.06	0.08	0.07	0.00	0.01	0.01
12	6	0.13	0.16	0.06	-0.09	-0.08	-0.02	-0.02	0.12	0.12
13	1	0.05	0.09	0.02	0.09	0.10	0.07	-0.03	0.07	0.20
14	1	0.31	0.30	-0.09	-0.41	-0.20	0.15	-0.02	0.22	0.05

15	1	0.15	0.23	0.31	-0.05	-0.26	-0.35	-0.04	0.17	0.18
16	6	0.13	-0.16	0.06	0.09	-0.08	0.02	-0.02	-0.13	0.12
17	1	0.30	-0.30	-0.09	0.41	-0.20	-0.15	-0.01	-0.23	0.05
18	1	0.05	-0.09	0.02	-0.08	0.10	-0.07	-0.03	-0.07	0.20
19	1	0.15	-0.23	0.31	0.05	-0.25	0.35	-0.04	-0.17	0.18
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		123.4144			131.1918			145.2424		
Red. masses --		2.8537			1.0929			1.3612		
Frc consts --		0.0256			0.0111			0.0169		
IR Inten --		8.2175			0.2062			5.2755		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.26	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00
2	7	-0.03	-0.03	-0.14	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.01	-0.05
3	6	-0.01	-0.02	-0.04	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.03	-0.03
4	6	0.01	-0.02	0.04	0.01	0.00	0.02	0.01	0.03	0.03
5	7	0.03	-0.03	0.14	0.01	0.00	-0.02	0.03	0.01	0.05
6	6	0.00	-0.03	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
7	1	0.00	0.62	0.00	0.02	0.00	0.02	0.00	-0.15	0.00
8	1	-0.01	-0.19	-0.25	0.03	-0.02	-0.04	-0.04	-0.03	-0.07
9	1	0.01	-0.19	0.24	0.03	0.02	-0.04	0.04	-0.03	0.07
10	8	-0.02	0.00	0.02	-0.01	0.02	0.01	-0.02	0.04	-0.03
11	8	0.02	0.00	-0.02	0.00	-0.02	0.01	0.02	0.04	0.03
12	6	0.12	-0.05	-0.09	-0.02	-0.04	0.00	-0.03	-0.04	-0.02
13	1	0.13	0.01	-0.18	-0.29	-0.31	-0.16	-0.30	-0.30	-0.20
14	1	0.15	-0.09	-0.07	0.37	-0.08	-0.10	0.33	-0.14	-0.08
15	1	0.17	-0.10	-0.06	-0.15	0.25	0.23	-0.17	0.23	0.15
16	6	-0.12	-0.05	0.09	-0.02	0.04	0.00	0.03	-0.04	0.02
17	1	-0.15	-0.09	0.07	0.37	0.08	-0.10	-0.34	-0.14	0.08
18	1	-0.14	0.01	0.18	-0.29	0.31	-0.16	0.30	-0.30	0.20
19	1	-0.17	-0.10	0.07	-0.15	-0.24	0.23	0.18	0.24	-0.16

B	3.55612900	0.14686300	-0.05051500
N	1.27626600	-1.06336700	0.27887400
C	-0.06676300	-0.77220400	0.13540500
C	-0.15857400	0.53527500	-0.23727500
N	1.14654900	1.02654200	-0.30876500
C	2.08019200	0.03922500	-0.02005600
H	4.38110800	-0.67685200	0.17328700
H	1.63740200	-1.97749100	0.49591400
H	1.40981900	1.89873500	-0.73948800
O	-0.96933100	-1.73325300	0.40812200
O	-1.23667900	1.30634300	-0.50598100
C	-1.64069200	2.18334300	0.56653400
H	-2.49664500	2.74279700	0.19225800
H	-1.92727100	1.60219400	1.44770100
H	-0.83486400	2.87368900	0.82982900
C	-2.18180100	-1.71169400	-0.36284100
H	-1.95175900	-1.72172200	-1.43143800
H	-2.72162800	-2.61514200	-0.08563000
H	-2.78261600	-0.83113400	-0.12835500

		1			2			3			
		A			A			A			
Frequencies --		13.8523			61.3894			115.1821			
Red. masses --		2.3656			2.4496			3.2219			
Frc consts --		0.0003			0.0054			0.0252			
IR Inten --		1.7948			2.3180			0.6388			
Z	Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	
	1	5	-0.01	-0.04	-0.06	-0.03	0.06	0.03	-0.01	0.11	0.28
	2	7	-0.03	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.04	-0.01	-0.01	-0.11
	3	6	-0.03	0.03	0.05	-0.01	-0.04	-0.01	-0.01	-0.01	-0.09
	4	6	-0.01	0.03	0.02	-0.04	-0.03	0.05	-0.01	-0.02	-0.13
	5	7	0.00	-0.01	-0.04	-0.05	0.00	0.05	-0.01	-0.03	-0.16

6	6	-0.01	-0.02	-0.03	-0.03	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.03
7	1	-0.02	-0.05	-0.06	0.00	0.08	-0.01	0.00	0.17	0.47
8	1	-0.04	0.01	0.06	0.02	-0.02	-0.06	-0.01	0.03	0.07
9	1	0.01	-0.01	-0.05	-0.06	0.02	0.08	-0.01	0.02	-0.05
10	8	-0.06	0.09	0.12	0.02	-0.08	-0.05	-0.01	0.02	0.02
11	8	0.00	0.03	0.04	-0.07	-0.06	0.07	-0.01	0.02	-0.01
12	6	0.02	0.03	0.05	0.16	0.21	-0.07	0.14	-0.05	0.12
13	1	0.00	0.02	0.07	0.02	0.04	0.01	0.13	0.03	0.25
14	1	0.04	0.03	0.06	0.46	0.44	0.18	0.19	-0.12	0.09
15	1	0.02	0.03	0.03	0.18	0.35	-0.48	0.20	-0.12	0.10
16	6	0.11	-0.14	-0.17	0.01	-0.08	-0.03	-0.05	-0.04	0.08
17	1	0.37	-0.54	-0.12	-0.01	-0.02	-0.03	-0.10	-0.37	0.07
18	1	0.01	-0.03	0.02	0.04	-0.11	-0.06	-0.14	0.10	0.35
19	1	0.09	-0.04	-0.64	-0.01	-0.10	0.03	0.07	0.10	-0.14

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 133.9688

148.8274

166.6415

Red. masses -- 1.1885

1.7716

2.3222

Frc consts -- 0.0126

0.0231

0.0380

IR Inten -- 0.0104

3.9697

4.3744

Z

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	
1	5	-0.01	0.02	-0.01	-0.02	0.02	-0.03	-0.02	0.03	-0.13
2	7	0.00	-0.01	-0.03	-0.02	0.04	0.13	0.00	0.05	0.18
3	6	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.04	0.00	-0.03	-0.03
4	6	-0.02	0.00	0.02	-0.02	-0.03	-0.08	-0.01	-0.05	-0.09
5	7	-0.02	0.00	0.03	-0.02	-0.02	-0.09	-0.03	0.03	0.08
6	6	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.01	-0.02	0.04	0.08
7	1	0.00	0.03	-0.04	-0.02	0.05	0.05	0.01	0.04	-0.21
8	1	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	0.03	0.09	0.02	0.00	-0.07
9	1	-0.03	0.01	0.03	-0.02	-0.06	-0.18	-0.03	-0.08	-0.15
10	8	0.02	-0.04	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.01	-0.04	-0.07
11	8	0.01	0.02	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.04

12	6	0.03	0.06	-0.02	0.11	-0.03	0.06	0.10	-0.05	0.03
13	1	0.38	0.47	-0.23	0.18	0.11	0.13	0.11	0.02	0.11
14	1	-0.50	0.08	-0.19	0.06	-0.06	0.03	0.13	-0.08	0.02
15	1	0.23	-0.31	0.32	0.22	-0.16	0.10	0.17	-0.12	0.00
16	6	0.00	-0.06	0.02	0.03	0.00	-0.06	-0.03	0.06	-0.01
17	1	-0.02	-0.10	0.01	0.10	0.48	-0.05	-0.09	-0.39	-0.02
18	1	0.00	-0.05	0.06	0.24	-0.25	-0.45	-0.29	0.32	0.34
19	1	0.01	-0.05	0.00	-0.21	-0.25	0.25	0.25	0.33	-0.29

13 bh-nhcOMe

0 1 -366.066376

B	-2.88406600	-1.02486800	-0.07949800
N	-1.42434500	1.05858500	0.29323800
C	-0.08977400	1.37682300	-0.05797200
C	0.56167300	0.22864900	-0.28326000
N	-0.32880600	-0.85606200	-0.08512300
C	-1.62997900	-0.32557600	0.08983000
H	-3.73560800	-1.60566100	0.48628500
H	-2.16417900	1.69827800	0.05242500
H	-0.21033400	-1.67095900	-0.66822100
O	1.85498700	-0.00551000	-0.58851400
C	2.66474100	-0.48683700	0.50188600
H	3.66204100	-0.63863500	0.09228000
H	2.69796200	0.25647500	1.30370800
H	2.27516400	-1.43062700	0.89237800
H	0.28747500	2.38352600	-0.01296300

1	2	3
A	A	A

Frequencies --	63.9462	130.5913	136.4880
Red. masses --	2.5706	3.3603	1.1522
Frc consts --	0.0062	0.0338	0.0126
IR Inten --	8.2495	1.8630	1.2477

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.07	0.08	-0.08	0.00	-0.02	0.24	0.03	-0.05	0.03
2	7	0.05	-0.03	0.09	0.05	-0.02	0.01	-0.02	0.00	-0.02
3	6	0.04	-0.06	0.06	0.04	-0.01	0.01	-0.01	0.02	0.01
4	6	-0.01	-0.07	-0.02	0.01	0.01	-0.13	0.00	0.04	0.01
5	7	-0.05	-0.04	-0.06	-0.01	0.00	-0.28	0.02	0.02	-0.02
6	6	-0.02	0.00	-0.01	0.02	-0.01	-0.03	0.01	0.00	-0.01
7	1	-0.09	0.11	-0.08	0.14	-0.02	0.47	0.07	-0.09	0.03
8	1	0.06	0.03	0.20	0.04	0.02	0.12	-0.02	-0.01	-0.03
9	1	-0.08	-0.04	-0.07	-0.07	0.08	-0.39	0.03	0.05	-0.06
10	8	-0.02	-0.13	-0.05	0.05	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01
11	6	0.07	0.23	0.04	-0.14	0.02	0.16	-0.03	-0.05	0.00
12	1	0.01	0.00	-0.01	-0.04	0.12	0.36	-0.16	-0.61	-0.12
13	1	0.21	0.54	-0.25	-0.38	-0.01	0.19	0.43	0.14	-0.20
14	1	0.04	0.41	0.45	-0.15	-0.02	0.03	-0.39	0.23	0.31
15	1	0.08	-0.07	0.10	0.07	-0.02	0.15	-0.03	0.03	0.03

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	196.7188	236.0990	251.7175
Red. masses --	3.0385	1.4953	2.3738
Frc consts --	0.0693	0.0491	0.0886
IR Inten --	108.4010	535.2562	5.4730

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.11	0.02	-0.07	0.03	0.05	0.15	-0.13	0.17	0.00
2	7	0.05	0.00	0.18	-0.04	0.05	0.00	0.00	-0.11	0.00
3	6	-0.01	0.01	-0.11	0.00	-0.03	0.01	-0.05	-0.04	-0.06
4	6	-0.02	0.02	-0.15	-0.01	-0.02	0.02	0.02	0.00	-0.02
5	7	0.08	-0.02	0.10	0.01	-0.08	-0.02	0.06	-0.06	0.00
6	6	0.06	-0.01	0.09	-0.02	-0.01	-0.05	0.05	-0.12	0.01
7	1	-0.18	-0.11	-0.67	-0.39	-0.04	-0.62	-0.39	0.74	0.21
8	1	0.03	-0.06	0.07	0.05	-0.03	-0.50	-0.06	-0.13	0.14
9	1	0.01	0.02	0.02	-0.06	0.14	-0.35	0.08	-0.08	0.04
10	8	-0.01	0.00	-0.09	0.00	0.02	0.03	0.06	0.14	0.03

11	6	-0.21	0.00	0.06	0.05	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01
12	1	-0.14	-0.07	0.25	0.03	0.02	-0.06	-0.02	-0.15	-0.01
13	1	-0.32	0.04	0.03	0.08	0.01	-0.01	0.12	-0.03	0.02
14	1	-0.34	0.05	0.04	0.06	0.01	-0.01	-0.13	0.04	-0.01
15	1	0.00	0.01	-0.15	0.04	-0.05	0.06	-0.12	-0.01	-0.11

0 3 -366.078934

B		-2.94373500	-1.00827800	0.15366200
N		-1.41774800	1.06921600	0.18092400
C		-0.08181700	1.39228200	-0.01089100
C		0.56571800	0.22721100	-0.26496300
N		-0.37230500	-0.79395100	-0.21099000
C		-1.65085400	-0.29213200	0.04817100
H		-3.18153700	-2.16627300	0.04691400
H		-2.16538100	1.71898500	0.35854600
H		-0.20450800	-1.74929800	-0.48033300
O		1.85981500	-0.00054200	-0.56639500
C		2.66461900	-0.51803000	0.51109600
H		3.66737600	-0.63900000	0.10532500
H		2.68047100	0.18812400	1.34582500
H		2.28751200	-1.48558600	0.85488100
H		0.30060700	2.39593300	0.04167600

		1			2				3		
		A			A				A		
Frequencies --		49.4257			133.2223				144.1045		
Red. masses --		2.6079			4.0850				1.1292		
Frc consts --		0.0038			0.0427				0.0138		
IR Inten --		3.1190			0.9103				0.2823		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	5	0.06	-0.06	0.06	0.08	-0.05	0.28	0.04	-0.05	0.01	
2	7	-0.04	0.01	-0.09	0.04	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.01	
3	6	-0.05	0.06	-0.07	0.03	0.00	0.01	-0.02	0.02	0.00	

4	6	0.01	0.07	0.03	0.01	0.02	-0.15	0.00	0.03	0.00
5	7	0.05	0.03	0.08	-0.01	0.04	-0.30	0.02	0.02	-0.01
6	6	0.02	-0.01	0.01	0.03	0.00	-0.04	0.01	0.00	-0.01
7	1	0.12	-0.09	0.15	0.11	-0.06	0.32	0.09	-0.06	0.01
8	1	-0.07	-0.01	-0.15	0.07	-0.03	0.27	-0.02	-0.01	0.00
9	1	0.09	0.02	0.14	0.00	0.03	-0.25	0.03	0.03	-0.02
10	8	0.03	0.14	0.06	0.04	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01
11	6	-0.07	-0.23	-0.05	-0.18	0.00	0.17	-0.03	-0.05	0.00
12	1	-0.02	-0.03	0.00	-0.08	0.05	0.41	-0.16	-0.60	-0.15
13	1	-0.19	-0.54	0.21	-0.42	-0.03	0.19	0.43	0.17	-0.19
14	1	-0.05	-0.38	-0.46	-0.23	-0.03	0.05	-0.40	0.21	0.33
15	1	-0.09	0.08	-0.13	0.05	-0.01	0.15	-0.03	0.03	0.01

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 196.4660 273.2882 372.2769

Red. masses -- 4.5667 2.9511 2.2986

Frc consts -- 0.1039 0.1299 0.1877

IR Inten -- 5.9096 15.5068 4.8043

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.05	-0.02	-0.19	-0.15	0.23	0.05	-0.02	-0.03	0.02
2	7	0.07	-0.02	0.24	0.01	-0.12	0.02	0.00	0.00	0.16
3	6	0.01	0.03	-0.15	-0.03	-0.06	-0.04	-0.04	0.01	-0.13
4	6	0.00	0.04	-0.18	0.02	-0.02	-0.05	-0.01	-0.01	-0.04
5	7	0.07	-0.01	0.17	0.07	-0.10	-0.01	-0.07	0.04	-0.16
6	6	0.07	-0.01	0.16	0.04	-0.12	0.00	-0.03	0.01	0.05
7	1	0.10	-0.01	-0.44	-0.75	0.35	0.13	0.01	0.00	-0.29
8	1	0.01	0.01	-0.15	-0.04	-0.16	-0.04	-0.09	0.08	-0.53
9	1	0.00	0.05	-0.11	0.09	-0.06	-0.13	0.04	-0.15	0.60
10	8	0.00	-0.02	-0.12	0.07	0.17	0.02	0.03	0.01	0.09
11	6	-0.23	0.01	0.07	-0.01	0.01	0.01	0.11	-0.03	0.02
12	1	-0.14	-0.03	0.31	-0.03	-0.15	0.01	0.06	-0.04	-0.10
13	1	-0.42	0.04	0.05	0.10	-0.01	0.03	0.22	-0.06	0.04
14	1	-0.34	0.03	0.02	-0.18	0.07	-0.01	0.14	-0.05	0.03

15 1 0.00 0.04 -0.20 -0.06 -0.05 -0.01 -0.04 0.02 -0.21

14 bh-nhc(NH₂)

0 1 -306.904598

B	-2.57193300	-0.72676200	0.10021800
N	-0.88488900	1.18832200	-0.13679100
C	0.54195200	1.21840100	0.02207800
C	1.01561100	-0.03227300	0.03506600
N	-0.05999100	-0.96044600	0.01387500
C	-1.26840600	-0.18771500	-0.02197800
H	-3.63236300	-1.21158200	0.03600500
H	-1.38665100	1.80742600	0.48318600
H	0.02620600	-1.66484100	-0.70862200
H	1.07283800	2.15567400	0.03888000
N	2.30537600	-0.56231300	-0.04533500
H	3.02705600	0.14573200	-0.06220700
H	2.49416300	-1.24801900	0.67842200

1	2	3
A	A	A

Frequencies --	86.0179	138.5405	241.1239
Red. masses --	4.1656	1.2332	1.7375
Frc consts --	0.0182	0.0139	0.0595
IR Inten --	9.8976	99.5179	16.6696

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.05	-0.03	0.36	0.05	-0.06	-0.10	0.06	-0.11	0.01
2	7	0.03	0.01	-0.15	0.00	0.04	-0.01	-0.02	0.05	0.08
3	6	-0.01	0.00	0.11	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.04	-0.12
4	6	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.03	-0.07
5	7	-0.03	0.01	-0.28	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.06	0.00
6	6	-0.01	0.04	-0.10	-0.01	0.03	0.03	0.00	0.05	0.02
7	1	0.14	-0.22	0.16	-0.05	0.03	0.95	0.21	-0.40	-0.27
8	1	-0.11	0.11	-0.37	0.04	0.01	0.06	0.08	-0.02	0.23

9	1	-0.01	0.21	-0.48	-0.01	0.12	-0.15	-0.05	0.04	0.01
10	1	-0.01	0.00	0.31	0.02	-0.01	-0.02	0.02	0.04	-0.20
11	7	-0.01	-0.01	0.13	-0.01	-0.01	0.02	-0.04	-0.07	0.05
12	1	0.01	-0.03	0.27	0.00	-0.02	0.11	0.06	-0.16	0.52
13	1	-0.10	-0.09	0.08	-0.06	-0.08	-0.03	-0.35	-0.35	-0.13

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	250.1163	302.9487	402.5952
Red. masses --	2.4477	1.5048	2.7317
Frc consts --	0.0902	0.0814	0.2609
IR Inten --	18.9617	25.1878	4.2334

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.08	0.16	0.03	-0.01	0.04	0.00	0.01	0.02	0.00
2	7	-0.05	-0.06	0.08	0.00	-0.03	-0.09	-0.07	-0.07	-0.01
3	6	-0.03	-0.03	-0.12	-0.01	0.01	0.07	-0.06	0.13	0.05
4	6	0.02	-0.01	-0.11	0.00	0.01	0.08	0.05	0.15	-0.03
5	7	0.05	-0.06	-0.09	0.02	-0.02	0.07	0.13	0.10	-0.02
6	6	0.02	-0.10	0.03	0.01	-0.02	-0.01	0.06	-0.11	0.01
7	1	-0.27	0.57	0.10	-0.05	0.13	-0.03	-0.17	0.38	0.11
8	1	0.08	-0.18	0.29	-0.08	0.01	-0.19	-0.19	-0.08	-0.10
9	1	0.01	-0.03	-0.13	0.05	0.03	0.03	0.25	-0.02	0.11
10	1	-0.06	-0.01	-0.09	-0.02	0.01	-0.02	-0.22	0.21	0.14
11	7	0.07	0.09	0.11	-0.01	0.04	-0.10	-0.08	-0.18	0.01
12	1	0.03	0.15	0.53	0.03	0.02	0.52	0.19	-0.47	-0.27
13	1	-0.12	-0.06	0.02	-0.15	-0.51	-0.58	-0.28	-0.09	0.14

0 3 -306.917624

B	-2.68554100	-0.63432800	-0.00845900
N	-0.83130600	1.15466500	0.00659700
C	0.55891400	1.22429700	0.01667700
C	1.01653600	-0.05729500	0.00016400
N	-0.09138700	-0.88444000	0.01010800
C	-1.28456800	-0.15259100	0.00471400

H	-3.10759300	-1.74402400	-0.01493800
H	-1.46453700	1.93631500	-0.00247100
H	-0.06275300	-1.87897800	-0.14325300
H	1.09797100	2.15474500	0.04675600
N	2.30160200	-0.59964000	-0.08065100
H	3.01450600	0.09895800	-0.24115300
H	2.55245400	-1.17593600	0.71564800

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		156.4307			183.5950			259.1764		
Red. masses --		3.4975			1.1644			3.1065		
Frc consts --		0.0504			0.0231			0.1229		
IR Inten --		7.0224			35.9736			7.2833		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.01	0.29	0.01	-0.02	-0.03	-0.11	0.23	0.01
2	7	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.12
3	6	0.00	0.00	0.07	0.01	0.01	-0.03	-0.02	-0.07	0.10
4	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.05	0.11
5	7	0.00	0.01	-0.28	0.01	0.00	0.08	0.02	-0.10	0.06
6	6	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.09	-0.05
7	1	0.01	-0.01	0.46	0.05	-0.03	-0.03	-0.58	0.41	0.12
8	1	0.00	0.00	0.25	0.00	0.00	-0.04	-0.02	-0.11	0.12
9	1	0.00	-0.01	-0.14	-0.02	0.01	0.02	0.05	-0.10	0.05
10	1	0.00	0.00	0.18	0.01	0.01	-0.07	-0.03	-0.06	0.06
11	7	0.01	0.01	0.14	-0.01	0.02	-0.05	0.09	0.16	-0.08
12	1	0.07	0.06	0.58	0.06	0.11	0.64	-0.06	0.32	-0.03
13	1	-0.22	-0.27	0.01	-0.24	-0.57	-0.41	0.29	0.04	-0.23

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		280.5743			390.1340			430.4949		
Red. masses --		3.7863			1.5135			1.8011		
Frc consts --		0.1756			0.1357			0.1967		

IR Inten		4.3655			7.4135			21.8264		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.07	0.15	-0.01	0.01	0.04	-0.01	0.00	-0.03	-0.03
2	7	-0.01	-0.07	0.24	-0.03	-0.03	-0.04	0.05	0.04	-0.02
3	6	-0.03	-0.02	-0.22	-0.03	0.06	-0.01	0.05	-0.08	-0.06
4	6	0.01	-0.01	-0.21	0.02	0.08	-0.04	-0.04	-0.09	-0.06
5	7	0.04	-0.06	-0.09	0.07	0.00	0.09	-0.08	-0.05	0.06
6	6	0.01	-0.07	0.09	0.03	-0.05	0.00	-0.04	0.07	0.03
7	1	-0.42	0.29	-0.24	-0.19	0.12	0.15	0.27	-0.14	0.07
8	1	-0.05	-0.10	-0.29	-0.09	-0.07	0.39	0.12	0.11	0.55
9	1	0.05	-0.06	-0.07	0.17	0.13	-0.75	-0.20	0.03	-0.52
10	1	-0.05	-0.01	-0.15	-0.10	0.10	0.08	0.14	-0.14	0.03
11	7	0.07	0.07	0.14	-0.04	-0.07	0.02	0.05	0.10	0.03
12	1	0.07	0.14	0.44	0.09	-0.22	-0.05	-0.11	0.28	0.11
13	1	-0.17	0.09	0.24	-0.17	-0.05	0.08	0.09	0.20	0.09

15 bh-CAAC

0 1 -549.886089

B	-0.49485600	2.10401100	0.41543500
N	1.46895600	0.77684500	-0.41901300
C	1.97729300	-0.54708600	0.02793100
C	0.71483400	-1.41696400	-0.17062200
C	-0.52775900	-0.47855400	-0.06857000
C	0.12601100	0.91572900	-0.00691500
C	3.13329500	-1.01327100	-0.86480700
C	2.30851700	1.94964700	-0.28063200
C	2.42333200	-0.52954900	1.50460800
C	-1.38785200	-0.78770300	1.17581800
C	-2.64926100	0.07672300	1.24694900
C	-3.51522600	-0.08160500	-0.00856600
C	-2.70325900	0.20575300	-1.27792600
C	-1.41546000	-0.62348200	-1.33361300
H	-1.01725600	3.13296600	0.60527900

H	0.66869300	-2.22466600	0.56392700
H	0.74535400	-1.87799600	-1.16126500
H	3.40373700	-2.04505700	-0.62277900
H	4.02949100	-0.40245900	-0.72335200
H	2.84653000	-0.96697100	-1.91808500
H	1.89516500	2.75441400	-0.89815900
H	3.31889200	1.74333600	-0.63620600
H	2.36853500	2.31453900	0.75962900
H	1.62600300	-0.15586100	2.15156700
H	2.69127300	-1.53697900	1.83575700
H	3.30037600	0.10867300	1.64599700
H	-1.68604200	-1.84376700	1.13286600
H	-0.78863600	-0.66032400	2.08142700
H	-3.22349000	-0.16590900	2.14715600
H	-2.35516400	1.13433000	1.36782000
H	-4.38825400	0.57713900	0.04321900
H	-3.90079700	-1.10897700	-0.04657100
H	-3.30774900	0.01278700	-2.17027800
H	-2.44016700	1.27106900	-1.30792400
H	-0.82622700	-0.35027300	-2.21444600
H	-1.67546200	-1.68581600	-1.44158300

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		41.0916			95.2987			110.9453		
Red. masses --		3.3034			3.0549			2.9818		
Frc consts --		0.0033			0.0163			0.0216		
IR Inten --		0.2236			0.4467			0.8076		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	-0.05	0.22	-0.07	0.04	-0.17	-0.08	-0.10	0.03
2	7	-0.05	-0.01	0.00	0.02	0.02	0.09	-0.05	-0.01	-0.01
3	6	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01
4	6	0.00	-0.03	0.15	-0.01	0.00	0.05	0.04	-0.05	-0.04

5	6	-0.01	-0.03	0.08	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.10	-0.03
6	6	-0.01	-0.03	0.11	-0.01	0.01	-0.03	-0.05	-0.08	-0.02
7	6	-0.07	0.00	-0.12	-0.07	0.02	-0.14	0.05	0.07	0.02
8	6	-0.05	0.00	-0.08	0.01	0.02	0.23	-0.12	0.03	0.05
9	6	0.15	0.06	-0.06	0.14	-0.10	-0.05	-0.05	0.01	0.00
10	6	-0.09	-0.01	0.02	0.00	0.08	0.03	0.01	-0.06	-0.02
11	6	-0.07	0.03	-0.07	-0.01	0.08	-0.03	0.14	0.12	0.00
12	6	0.00	0.05	-0.12	-0.01	-0.01	-0.01	0.07	0.22	0.04
13	6	0.09	0.01	-0.08	-0.01	-0.08	-0.03	0.05	0.00	-0.03
14	6	0.08	-0.02	0.02	-0.01	-0.07	0.02	-0.03	-0.12	0.00
15	1	0.04	-0.05	0.28	-0.10	0.04	-0.28	-0.04	-0.08	0.02
16	1	0.04	0.08	0.28	0.00	0.04	0.09	0.07	-0.07	-0.07
17	1	-0.04	-0.18	0.22	-0.03	-0.05	0.07	0.06	-0.02	-0.06
18	1	-0.03	0.01	-0.11	-0.03	0.02	-0.20	0.11	0.09	0.02
19	1	-0.07	0.02	-0.23	-0.06	0.03	-0.21	0.01	0.13	0.04
20	1	-0.18	-0.05	-0.09	-0.17	0.06	-0.11	0.07	0.06	0.01
21	1	-0.11	-0.01	-0.06	0.08	0.05	0.23	-0.13	0.02	0.05
22	1	-0.08	0.01	-0.16	0.05	0.04	0.33	-0.09	0.10	0.09
23	1	0.03	0.02	-0.09	-0.11	-0.04	0.26	-0.19	0.01	0.06
24	1	0.20	0.06	0.01	0.19	-0.15	0.04	-0.08	-0.03	-0.02
25	1	0.21	0.07	-0.06	0.17	-0.12	-0.14	-0.01	0.02	0.00
26	1	0.15	0.08	-0.16	0.15	-0.11	-0.08	-0.08	0.05	0.04
27	1	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.08	0.10	-0.11	-0.02	-0.03
28	1	-0.14	-0.03	0.06	0.00	0.15	0.03	0.04	-0.14	-0.02
29	1	-0.13	0.05	-0.10	0.00	0.14	-0.01	0.13	0.24	0.03
30	1	-0.04	0.02	-0.05	-0.01	0.09	-0.10	0.31	0.08	-0.02
31	1	0.02	0.08	-0.18	-0.02	-0.02	-0.05	0.19	0.38	0.04
32	1	-0.03	0.06	-0.13	0.00	-0.02	0.06	-0.12	0.29	0.11
33	1	0.14	0.00	-0.11	-0.01	-0.15	-0.02	-0.01	-0.03	0.02
34	1	0.11	0.00	-0.08	-0.03	-0.08	-0.10	0.16	-0.03	-0.15
35	1	0.14	-0.03	0.06	-0.01	-0.12	0.01	-0.03	-0.23	-0.03
36	1	0.06	-0.01	0.01	0.01	-0.08	0.09	-0.11	-0.11	0.08

		A			A			A		
Frequencies --		152.2847			188.3533			229.9399		
Red. masses --		2.8238			1.8542			1.3391		
Frc consts --		0.0386			0.0388			0.0417		
IR Inten --		1.5324			2.7681			0.3236		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.12	-0.01	0.24	0.04	-0.01	0.00	0.14	0.05	0.01
2	7	0.01	0.02	-0.05	0.01	0.00	-0.09	0.00	-0.02	-0.02
3	6	-0.01	0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.01	0.00
4	6	-0.01	0.02	-0.06	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.00
5	6	0.00	0.03	-0.03	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	0.00
6	6	0.02	0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.06	0.00	-0.02	-0.02
7	6	0.01	-0.01	0.01	-0.02	-0.09	0.00	0.02	0.01	0.00
8	6	0.03	0.00	0.06	-0.01	0.00	0.14	-0.06	0.02	0.01
9	6	-0.07	0.00	-0.02	0.01	0.15	-0.03	0.01	0.00	-0.01
10	6	0.02	0.10	0.00	0.01	-0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.00
11	6	0.03	0.13	-0.06	-0.01	-0.05	0.02	-0.03	-0.02	0.01
12	6	-0.02	-0.08	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00
13	6	-0.10	-0.17	-0.06	0.01	0.04	0.02	0.00	0.01	0.01
14	6	-0.02	-0.05	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	-0.02	-0.02	0.01
15	1	0.22	0.01	0.39	0.06	-0.02	0.06	0.26	0.11	-0.02
16	1	-0.02	-0.01	-0.09	0.00	0.04	0.08	0.00	0.00	0.02
17	1	-0.02	0.06	-0.07	0.00	-0.08	0.06	0.00	-0.02	0.01
18	1	0.00	-0.01	0.02	0.09	-0.01	0.23	0.01	0.00	-0.03
19	1	0.01	-0.01	0.03	-0.07	0.03	-0.20	0.02	0.00	0.03
20	1	0.04	-0.01	0.00	-0.09	-0.36	0.01	0.03	0.04	0.00
21	1	0.05	0.06	0.13	0.06	0.06	0.17	0.15	-0.11	-0.31
22	1	0.03	0.01	0.05	0.04	0.04	0.26	0.07	-0.03	0.43
23	1	0.03	-0.10	0.09	-0.16	-0.12	0.19	-0.45	0.24	-0.04
24	1	-0.07	0.07	-0.05	0.10	0.48	-0.11	-0.09	-0.28	0.04
25	1	-0.15	-0.01	0.01	-0.24	0.15	0.16	0.30	0.05	-0.09
26	1	-0.03	-0.05	0.01	0.17	-0.04	-0.16	-0.17	0.24	0.04
27	1	0.00	0.10	0.08	0.02	-0.03	-0.05	0.00	-0.01	0.00

28	1	0.03	0.16	-0.02	0.02	-0.04	-0.03	-0.02	0.01	0.00
29	1	0.08	0.28	0.01	-0.01	-0.12	0.00	-0.03	-0.06	-0.01
30	1	0.04	0.15	-0.24	-0.03	-0.05	0.08	-0.05	-0.02	0.03
31	1	-0.07	-0.13	-0.03	0.01	0.02	0.03	-0.02	0.01	0.00
32	1	0.05	-0.11	0.16	-0.02	0.02	-0.03	-0.03	0.00	-0.03
33	1	-0.11	-0.34	-0.01	0.00	0.10	0.01	0.00	0.04	0.00
34	1	-0.21	-0.14	-0.20	0.04	0.03	0.07	0.02	0.01	0.03
35	1	-0.05	-0.04	-0.03	-0.03	-0.01	-0.03	-0.03	-0.05	-0.01
36	1	0.07	-0.08	0.02	-0.05	0.01	-0.01	-0.05	-0.02	0.03

0 3 -549.861754

B	0.50229600	2.36113400	-0.03587100
N	-1.48484800	0.79622400	0.09803200
C	-1.94055700	-0.60871300	-0.06991100
C	-0.65031500	-1.28665500	-0.57683100
C	0.53897700	-0.35158300	-0.23179400
C	-0.14602400	1.01203000	-0.05936600
C	-2.42853000	-1.18526000	1.27268700
C	-2.44197200	1.86463700	0.33591100
C	-3.06719100	-0.69600000	-1.11291600
C	1.57882700	-0.39892700	-1.38102600
C	2.91506400	0.29291300	-1.08403800
C	3.53692000	-0.20717400	0.22498100
C	2.54698100	-0.06109700	1.38641600
C	1.23218600	-0.79361200	1.09294600
H	0.02214300	3.44379400	0.07940300
H	-0.71022800	-1.39843600	-1.66335500
H	-0.52510000	-2.28652800	-0.15510000
H	-2.73664200	-2.22595600	1.13971100
H	-3.29127000	-0.63357600	1.65591200
H	-1.64157400	-1.15545300	2.02769200
H	-1.98324000	2.63847500	0.94952000
H	-3.31523100	1.47123900	0.85763500

H	-2.77270600	2.32315200	-0.60272500
H	-2.76602800	-0.22446900	-2.05160600
H	-3.29636300	-1.74549900	-1.31742600
H	-3.98757100	-0.21978900	-0.76497300
H	1.77195600	-1.45937700	-1.59648600
H	1.12854800	0.02503300	-2.28503600
H	3.60114600	0.12537900	-1.92178100
H	2.75126300	1.37366000	-1.01351600
H	4.45770800	0.34476700	0.44013600
H	3.82193600	-1.26350000	0.12002500
H	2.98078000	-0.45603300	2.31163000
H	2.34420600	1.00205700	1.55729800
H	0.54136700	-0.67245200	1.93302700
H	1.44115400	-1.86907000	1.01078700

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	60.6977	74.0390	101.4022
Red. masses --	3.6201	2.4907	1.1842
Frc consts --	0.0079	0.0080	0.0072
IR Inten --	3.3384	0.1014	0.1215

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.04	-0.03	0.30	0.01	0.02	0.03	-0.02	0.00	0.01
2	7	-0.02	0.01	-0.08	-0.02	0.02	-0.07	0.00	0.00	-0.04
3	6	-0.02	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	-0.03	0.09	0.00	0.06	-0.10	-0.01	0.00	-0.03
5	6	0.00	-0.01	0.07	-0.01	0.03	-0.04	0.00	-0.01	-0.02
6	6	0.00	-0.01	0.11	-0.01	0.03	-0.02	0.00	-0.01	-0.02
7	6	-0.06	0.11	0.02	0.17	0.02	0.07	0.04	0.03	0.03
8	6	-0.04	0.03	-0.21	-0.05	0.00	-0.11	0.04	0.03	0.00
9	6	0.02	-0.08	-0.04	-0.09	-0.07	0.13	-0.03	-0.04	0.03
10	6	-0.06	0.04	0.01	0.03	0.07	-0.01	0.01	0.00	-0.01
11	6	-0.06	0.06	-0.05	0.04	0.02	0.06	0.00	0.01	0.01

12	6	0.03	0.01	-0.10	-0.01	-0.07	0.05	-0.01	0.02	0.02
13	6	0.10	-0.05	-0.04	-0.03	-0.08	0.03	-0.02	-0.01	0.01
14	6	0.08	-0.05	0.02	-0.05	-0.03	-0.03	-0.01	-0.02	-0.02
15	1	0.06	-0.03	0.35	0.03	0.03	0.04	-0.05	-0.02	0.02
16	1	0.04	-0.11	0.10	-0.04	0.18	-0.12	-0.02	0.02	-0.03
17	1	-0.02	0.00	0.17	0.01	0.01	-0.22	-0.01	-0.01	-0.05
18	1	-0.04	0.09	0.10	0.20	0.00	0.13	0.03	0.03	0.07
19	1	-0.08	0.13	-0.05	0.18	0.00	0.13	0.06	0.05	0.04
20	1	-0.08	0.19	0.05	0.24	0.07	-0.01	0.07	0.04	0.00
21	1	-0.09	0.06	-0.22	0.01	0.15	-0.34	-0.11	-0.24	0.46
22	1	-0.09	0.06	-0.27	0.07	0.05	0.13	-0.20	-0.07	-0.47
23	1	0.04	-0.03	-0.27	-0.25	-0.21	-0.14	0.44	0.41	0.05
24	1	0.05	-0.15	-0.07	-0.21	-0.09	0.08	-0.06	-0.05	0.02
25	1	0.04	-0.10	0.03	-0.06	-0.09	0.18	0.00	-0.05	0.05
26	1	0.01	-0.06	-0.11	-0.07	-0.11	0.21	-0.03	-0.07	0.05
27	1	-0.05	0.05	-0.02	0.01	0.07	-0.06	0.02	0.00	0.00
28	1	-0.12	0.05	0.04	0.06	0.13	0.00	0.02	-0.01	-0.01
29	1	-0.11	0.11	-0.09	0.06	0.04	0.07	0.01	0.03	0.02
30	1	-0.08	0.05	0.01	0.07	0.02	0.12	-0.02	0.01	0.02
31	1	0.03	0.02	-0.14	0.01	-0.12	0.10	-0.02	0.03	0.03
32	1	0.04	0.02	-0.17	-0.05	-0.08	0.01	0.01	0.02	0.01
33	1	0.16	-0.10	-0.08	-0.07	-0.13	0.03	-0.03	-0.02	0.01
34	1	0.10	-0.06	0.03	0.00	-0.08	0.06	-0.04	-0.02	0.02
35	1	0.12	-0.08	0.06	-0.06	-0.04	-0.04	-0.02	-0.04	-0.02
36	1	0.08	-0.04	-0.03	-0.08	-0.03	-0.06	0.00	-0.02	-0.03

4

5

6

A

A

A

Frequencies --

115.3478

153.3747

182.5273

Red. masses --

2.6467

2.8508

1.8286

Frc consts --

0.0207

0.0395

0.0359

IR Inten --

0.6631

0.5192

1.1668

Atom

AN

X

Y

Z

X

Y

Z

X

Y

Z

1

5

0.10

-0.08

0.02

0.05

-0.02

0.25

0.00

0.00

-0.02

2	7	0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.08	-0.01	0.01	-0.11
3	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.01	-0.03
4	6	-0.04	-0.04	-0.03	0.00	0.01	-0.05	0.01	-0.02	0.02
5	6	0.00	-0.09	-0.03	-0.01	0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.02
6	6	0.05	-0.06	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.04
7	6	0.01	0.03	0.02	0.06	0.01	-0.02	-0.03	0.12	0.01
8	6	0.08	0.02	-0.02	-0.01	-0.02	0.08	0.01	-0.02	0.15
9	6	-0.05	0.05	0.04	-0.03	-0.03	-0.01	0.02	-0.09	-0.04
10	6	0.01	-0.08	-0.01	0.01	-0.09	-0.02	0.01	0.01	-0.01
11	6	-0.07	0.07	0.00	0.05	-0.15	-0.07	-0.01	0.05	0.03
12	6	-0.04	0.22	0.05	-0.02	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00
13	6	-0.09	0.02	0.02	-0.06	0.17	-0.04	0.01	-0.05	0.02
14	6	0.01	-0.12	-0.05	-0.03	0.10	0.01	-0.01	-0.01	-0.01
15	1	0.14	-0.07	0.04	0.10	-0.02	0.43	-0.01	0.00	-0.06
16	1	-0.06	-0.02	-0.03	0.01	0.04	-0.06	0.01	-0.09	0.03
17	1	-0.07	-0.05	-0.04	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.01	0.09
18	1	-0.03	0.04	0.03	0.12	-0.02	0.00	0.26	0.02	0.17
19	1	0.04	0.06	0.03	0.03	-0.04	-0.02	-0.22	-0.04	-0.20
20	1	0.03	0.01	0.00	0.07	0.07	-0.04	-0.13	0.47	0.11
21	1	0.18	0.10	-0.19	0.04	-0.05	0.08	0.13	-0.05	0.11
22	1	0.15	0.10	0.16	0.05	-0.07	0.15	0.13	-0.07	0.31
23	1	-0.05	-0.10	-0.03	-0.11	0.03	0.14	-0.20	0.03	0.25
24	1	-0.06	0.04	0.03	-0.06	-0.07	-0.04	0.08	-0.28	-0.12
25	1	-0.10	0.07	0.05	-0.05	-0.04	0.04	-0.07	-0.11	0.14
26	1	-0.01	0.10	0.07	-0.02	-0.01	0.00	0.05	0.06	-0.15
27	1	0.11	-0.08	0.07	-0.05	-0.11	0.05	0.04	0.02	-0.01
28	1	0.01	-0.18	-0.05	0.03	-0.12	-0.05	0.02	0.01	-0.01
29	1	-0.02	0.11	0.03	0.06	-0.32	-0.03	-0.01	0.12	0.02
30	1	-0.20	0.06	-0.06	0.14	-0.12	-0.23	-0.06	0.04	0.09
31	1	-0.15	0.40	0.07	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.02
32	1	0.18	0.27	0.07	-0.03	-0.02	0.17	0.00	0.00	-0.05
33	1	-0.06	0.03	0.01	-0.09	0.32	0.04	0.01	-0.12	-0.01
34	1	-0.24	-0.01	0.08	-0.09	0.19	-0.21	0.03	-0.06	0.08

35	1	-0.02	-0.27	-0.05	-0.05	0.15	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02
36	1	0.13	-0.09	-0.14	0.00	0.09	0.09	-0.03	-0.01	-0.02

16 bh-DAC

0 1 -597.392907

C	0.51730100	-1.29266800	-0.12102000
N	-0.85504300	-1.20112900	-0.06978200
C	-1.57140300	0.00034500	0.05705000
N	-0.85461100	1.20152800	-0.06957300
C	0.51778100	1.29245000	-0.12120100
C	1.31574400	-0.00024500	0.08384600
O	1.07734900	-2.36613300	-0.27227000
O	1.07826000	2.36563800	-0.27281800
C	2.52783700	-0.00054700	-0.86672500
C	1.80578200	-0.00021800	1.55940000
C	-1.66471500	2.41272400	-0.12582200
C	-1.66568800	-2.41194800	-0.12617800
B	-2.97746900	0.00028200	0.27140400
H	2.20959800	-0.00058600	-1.91222700
H	3.12768600	0.89182100	-0.69206600
H	3.12736700	-0.89309600	-0.69189200
H	2.41146400	-0.88998700	1.73916100
H	2.41180400	0.88934800	1.73902200
H	0.97000700	-0.00000200	2.26450500
H	-2.36984500	2.41607200	0.71687500
H	-1.00846700	3.27591100	-0.04534200
H	-2.21971500	2.46098200	-1.06728000
H	-1.00990700	-3.27545500	-0.04528600
H	-2.37113600	-2.41482700	0.71628700
H	-2.22036200	-2.46010100	-1.06782900
H	-4.14427300	0.00032700	0.28914400

		A			A			A		
Frequencies --		24.2885			79.7306			95.1369		
Red. masses --		4.3938			4.6681			3.0196		
Frc consts --		0.0015			0.0175			0.0161		
IR Inten --		3.7483			0.0774			3.6350		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	0.08	0.00	0.01	-0.07	0.00	0.01	-0.02
2	7	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.12	0.01	0.00	0.13
3	6	-0.02	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
4	7	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.12	0.01	0.00	0.13
5	6	-0.01	0.01	0.08	0.00	0.01	0.07	0.00	-0.01	-0.02
6	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02
7	8	0.00	-0.02	0.20	-0.02	0.03	-0.23	-0.01	0.01	-0.12
8	8	0.00	0.02	0.20	0.02	0.03	0.23	-0.01	-0.01	-0.12
9	6	-0.13	0.00	-0.20	0.00	0.07	0.00	0.04	0.00	0.02
10	6	0.22	0.00	-0.09	0.00	-0.12	0.00	-0.03	0.00	0.00
11	6	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.02	-0.25	0.02	0.00	0.13
12	6	-0.01	0.00	0.01	0.01	-0.02	0.25	0.02	0.00	0.13
13	5	-0.05	0.00	-0.25	0.00	0.03	0.00	-0.05	0.00	-0.27
14	1	-0.28	0.00	-0.15	0.00	0.17	0.00	0.07	0.00	0.01
15	1	-0.10	0.00	-0.28	0.01	0.05	0.08	0.03	0.00	0.04
16	1	-0.10	0.00	-0.28	-0.01	0.05	-0.08	0.03	0.00	0.04
17	1	0.25	0.00	-0.18	0.01	-0.12	-0.07	-0.03	0.00	0.02
18	1	0.25	0.00	-0.18	-0.01	-0.12	0.07	-0.03	0.00	0.02
19	1	0.33	0.00	0.03	0.00	-0.19	0.00	-0.05	0.00	-0.02
20	1	-0.05	-0.03	-0.03	0.01	0.10	-0.24	-0.18	-0.16	-0.03
21	1	-0.01	0.00	0.08	-0.01	-0.01	-0.38	-0.02	0.00	0.43
22	1	0.05	0.04	-0.02	-0.03	-0.16	-0.25	0.23	0.18	0.01
23	1	-0.01	0.00	0.08	0.01	-0.01	0.38	-0.02	0.00	0.43
24	1	-0.05	0.03	-0.03	-0.01	0.10	0.24	-0.18	0.16	-0.03
25	1	0.05	-0.04	-0.02	0.03	-0.16	0.25	0.23	-0.17	0.01
26	1	-0.05	0.00	-0.33	0.00	0.04	0.00	-0.05	0.00	-0.39

		A			A			A		
Frequencies --		121.6971			122.4269			158.8296		
Red. masses --		1.0640			1.3527			2.6844		
Frc consts --		0.0093			0.0119			0.0399		
IR Inten --		0.0692			1.6698			0.0962		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.05
2	7	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.15
3	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.00	0.11
4	7	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.15
5	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.05
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.07
7	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.09
8	8	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.09
9	6	0.00	0.01	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.04	0.00	0.00
10	6	0.01	-0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.10	0.00	0.03
11	6	0.00	-0.01	-0.04	0.01	0.01	0.08	0.00	-0.01	-0.13
12	6	0.00	-0.01	0.02	0.01	-0.02	0.09	0.00	0.01	-0.13
13	5	0.00	0.03	0.02	-0.01	0.01	-0.11	-0.04	0.00	-0.08
14	1	-0.01	0.01	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.02
15	1	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.03	-0.03	0.00	-0.03
16	1	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.02	-0.03	0.00	-0.03
17	1	0.01	-0.01	-0.01	-0.04	0.00	0.01	0.12	0.00	-0.01
18	1	0.00	-0.01	0.01	-0.04	0.00	0.01	0.12	0.00	-0.01
19	1	0.01	-0.02	0.00	-0.06	0.00	-0.03	0.15	0.00	0.09
20	1	-0.32	-0.23	-0.31	0.22	0.12	0.25	0.06	0.25	-0.08
21	1	-0.06	0.00	0.41	0.05	0.00	-0.20	0.01	0.01	-0.45
22	1	0.36	0.19	-0.24	-0.23	-0.09	0.21	-0.08	-0.31	-0.10
23	1	0.04	0.00	-0.32	0.07	-0.01	-0.36	0.01	-0.01	-0.45
24	1	0.23	-0.17	0.20	0.34	-0.21	0.37	0.07	-0.25	-0.07
25	1	-0.26	0.15	0.16	-0.37	0.16	0.30	-0.08	0.31	-0.10
26	1	0.00	0.03	0.01	-0.01	0.01	-0.03	-0.04	0.00	-0.09

0 3 -597.368760

C	-0.75553600	1.14918000	-0.16532100
N	0.61858300	1.33647800	-0.05664200
C	1.55405200	0.31233300	0.06221700
N	1.07909400	-0.99065200	-0.07969200
C	-0.27057900	-1.34374400	-0.16911800
C	-1.28903800	-0.24770700	0.12135300
O	-1.48966800	2.08969000	-0.40078700
O	-0.61403600	-2.48730400	-0.39529900
C	-2.57422000	-0.49612900	-0.68352300
C	-1.59755500	-0.31221100	1.64754300
C	2.06305200	-2.08424100	-0.16213600
C	1.07454000	2.73497600	-0.14503900
B	3.01018400	0.61909000	0.30159100
H	-2.37950500	-0.45926300	-1.75760400
H	-2.97346300	-1.48044300	-0.44267400
H	-3.30934200	0.27125200	-0.44423600
H	-2.34053200	0.44748400	1.89726300
H	-1.99954500	-1.29695400	1.89265900
H	-0.70491500	-0.13894500	2.25391800
H	2.60509700	-2.17540700	0.77940500
H	1.51665600	-3.00024000	-0.36483400
H	2.77196300	-1.88841800	-0.96599500
H	0.50306100	3.34598200	0.55210900
H	2.13486500	2.76159300	0.09896300
H	0.91188600	3.11346300	-1.15525800
H	3.93044200	-0.11017200	0.43549900

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	33.4850	62.1332	80.1214
Red. masses --	4.0024	3.2255	1.7055
Frc consts --	0.0026	0.0073	0.0065

IR Inten	--	1.2759			1.4661			6.3512		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.01	0.07	0.01	-0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.01
2	7	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.06	-0.01	0.00	0.07
3	6	0.02	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
4	7	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.09	0.00	0.00	0.04
5	6	0.01	-0.01	0.07	0.00	-0.01	0.07	0.00	0.00	-0.01
6	6	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
7	8	0.00	0.04	0.19	0.02	-0.02	-0.13	0.00	-0.01	-0.07
8	8	0.01	-0.03	0.19	-0.01	-0.04	0.22	0.00	0.01	-0.05
9	6	0.09	0.02	-0.20	0.02	-0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.01
10	6	-0.20	-0.04	-0.07	-0.04	0.07	0.00	0.01	0.00	0.00
11	6	0.01	-0.01	0.03	0.01	0.02	-0.24	-0.01	-0.01	0.08
12	6	0.00	0.01	0.02	0.00	0.01	0.14	0.00	0.00	0.10
13	5	0.05	0.01	-0.24	0.00	-0.02	0.05	0.03	0.01	-0.18
14	1	0.22	0.05	-0.17	0.05	-0.08	-0.02	-0.03	0.00	0.01
15	1	0.06	0.01	-0.28	0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.02
16	1	0.06	0.01	-0.27	0.01	-0.02	-0.07	-0.01	0.00	0.02
17	1	-0.24	-0.05	-0.15	-0.05	0.08	-0.06	0.02	0.00	0.01
18	1	-0.22	-0.05	-0.15	-0.05	0.08	0.03	0.01	0.00	0.01
19	1	-0.28	-0.04	0.04	-0.06	0.10	0.02	0.02	0.00	-0.01
20	1	0.08	0.09	0.00	-0.07	-0.19	-0.22	0.14	0.18	0.01
21	1	-0.01	-0.03	0.16	0.03	0.07	-0.49	-0.03	-0.05	0.33
22	1	-0.06	-0.08	-0.04	0.08	0.22	-0.13	-0.14	-0.16	-0.07
23	1	0.12	-0.04	0.16	-0.22	0.02	-0.06	-0.32	0.05	-0.21
24	1	0.04	-0.01	-0.15	-0.07	0.04	0.45	-0.10	0.05	0.53
25	1	-0.17	0.08	0.08	0.31	-0.03	0.08	0.43	-0.10	-0.01
26	1	0.07	0.02	-0.33	-0.01	-0.03	0.03	0.05	0.02	-0.30
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	103.8632			146.9291			185.0353		
Red. masses	--	1.5761			1.3965			2.5807		
Frc consts	--	0.0100			0.0178			0.0521		

IR Inten	--	2.7261			0.4121			1.8345		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.01	0.05	0.00	-0.01	0.02	0.01	-0.01	0.06
2	7	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.14
3	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.06	0.01	0.01	0.07
4	7	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.05	0.00	0.01	0.11
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.02	0.05
6	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.08
7	8	-0.02	0.01	0.10	0.01	-0.01	-0.03	0.04	-0.04	-0.13
8	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.04	-0.09
9	6	0.02	0.02	-0.02	0.02	0.00	-0.01	0.02	0.02	0.01
10	6	-0.04	-0.05	0.00	-0.05	0.01	0.02	-0.11	-0.06	0.05
11	6	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.02	-0.11	0.00	0.02	-0.05
12	6	0.03	-0.01	-0.15	0.01	-0.01	-0.06	0.00	-0.01	-0.08
13	5	-0.01	0.00	0.06	0.00	0.00	0.06	0.05	0.01	-0.13
14	1	0.04	0.07	-0.02	0.05	-0.01	0.00	0.06	0.11	0.02
15	1	0.02	0.01	-0.07	0.00	0.00	-0.01	0.04	-0.01	-0.08
16	1	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.04	-0.01	-0.01	0.04
17	1	-0.04	-0.06	0.01	-0.07	0.00	-0.01	-0.13	-0.06	0.04
18	1	-0.04	-0.06	-0.04	-0.05	0.00	0.01	-0.14	-0.06	-0.02
19	1	-0.05	-0.07	0.03	-0.07	0.02	0.05	-0.15	-0.09	0.13
20	1	-0.07	-0.08	0.02	0.44	0.29	-0.34	-0.20	-0.32	0.04
21	1	0.02	0.03	-0.14	-0.04	-0.05	0.35	0.03	0.09	-0.47
22	1	0.07	0.07	0.06	-0.36	-0.16	-0.49	0.17	0.29	0.17
23	1	-0.28	0.14	-0.54	0.07	0.03	-0.05	0.15	0.07	-0.03
24	1	-0.07	0.05	0.28	0.03	-0.01	-0.13	0.05	0.00	-0.29
25	1	0.47	-0.25	-0.31	-0.06	-0.06	-0.07	-0.20	-0.12	-0.09
26	1	-0.02	0.00	0.12	0.01	0.01	0.05	0.06	0.00	-0.25

17 bch3

0 1 -64.627363

B -1.06629300 -0.00004200 0.00000200

C 0.46686100 -0.00001000 -0.00002600

H	0.84367700	-0.85941200	-0.57170900
H	0.84319900	0.92506700	-0.45831800
H	0.84342500	-0.06538500	1.03017300

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		557.6941			558.1539			954.1920		
Red. masses --		1.2685			1.2686			2.6085		
Frc consts --		0.2325			0.2328			1.3993		
IR Inten --		18.0807			18.0902			38.0963		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.05	0.07	0.00	0.07	0.05	0.35	0.00	0.00
2	6	0.00	0.07	-0.11	0.00	-0.11	-0.07	-0.19	0.00	0.00
3	1	0.00	-0.15	0.22	0.74	0.14	0.10	-0.52	-0.09	-0.06
4	1	0.64	-0.08	0.19	-0.37	0.18	0.17	-0.52	0.10	-0.05
5	1	-0.64	-0.14	0.14	-0.37	0.23	0.10	-0.52	-0.01	0.11

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		1304.3544			1397.9660			1398.1233		
Red. masses --		1.6214			1.0532			1.0532		
Frc consts --		1.6253			1.2127			1.2130		
IR Inten --		171.6856			27.0826			27.1190		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01
2	6	0.22	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.05	0.00	0.05	0.04
3	1	-0.50	-0.21	-0.14	0.04	-0.39	0.62	0.31	0.18	0.02
4	1	-0.50	0.23	-0.11	-0.28	0.26	0.20	-0.12	-0.24	-0.63
5	1	-0.50	-0.02	0.25	0.25	-0.43	-0.16	-0.18	-0.60	0.06

0 3 -64.567213

B	-1.07889600	0.00031600	-0.01917300
C	0.46954100	0.00030100	-0.01390900
H	0.93270200	0.90103500	-0.43364200

H	0.71384500	-0.01009200	1.06190400
H	0.93068500	-0.89432600	-0.44894000

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		667.7847			762.2376			1007.5492		
Red. masses --		1.3190			1.2929			4.6557		
Frc consts --		0.3466			0.4426			2.7846		
IR Inten --		3.9479			40.5440			4.3137		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.07	0.00	0.08	0.00	0.08	0.00	0.48	0.00	-0.03
2	6	-0.04	0.00	-0.13	0.00	-0.14	0.00	-0.35	0.00	0.06
3	1	0.24	0.04	0.28	-0.62	0.22	0.08	-0.55	0.01	-0.17
4	1	-0.82	0.01	0.09	0.03	0.33	0.00	-0.01	0.00	-0.02
5	1	0.28	-0.03	0.28	0.60	0.23	-0.10	-0.54	0.00	-0.17

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		1285.9704			1376.4138			1456.4215		
Red. masses --		1.2199			1.0323			1.0648		
Frc consts --		1.1886			1.1523			1.3307		
IR Inten --		9.1973			4.5466			12.6898		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01
2	6	0.13	0.00	0.03	0.00	0.04	0.00	0.04	0.00	-0.06
3	1	-0.45	0.12	-0.29	-0.30	-0.02	-0.41	-0.32	0.40	0.46
4	1	-0.59	0.00	0.18	0.00	-0.70	-0.01	0.22	0.00	-0.09
5	1	-0.45	-0.11	-0.29	0.30	-0.02	0.41	-0.32	-0.40	0.45

18 bch3-nh3

0 1 -121.186123

B	0.11111700	0.84336400	-0.00016900
C	1.31966700	-0.15780700	-0.00008800
H	1.25678800	-0.81655400	0.88636200

H	1.25532400	-0.82045400	-0.88348400
H	2.30339400	0.31234400	-0.00171000
N	-1.22876300	-0.14683500	0.00001400
H	-1.78222900	0.13327800	0.81011800
H	-1.78242700	0.13327300	-0.80996400
H	-1.12310100	-1.18402100	-0.00004900

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		37.1214			61.5431			335.3444		
Red. masses --		1.2192			1.0633			2.0454		
Frc consts --		0.0010			0.0024			0.1355		
IR Inten --		20.8573			1.8770			3.1742		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	-0.06	0.01	-0.16	0.00
2	6	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.04	0.18	0.04	0.00
3	1	0.23	0.44	0.29	0.01	0.17	0.17	0.42	0.03	0.00
4	1	-0.23	-0.43	0.29	-0.01	-0.17	0.17	0.42	0.03	0.00
5	1	0.00	0.00	-0.48	0.00	0.00	-0.05	0.02	0.38	0.00
6	7	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.02	-0.17	0.03	0.00
7	1	-0.17	-0.01	-0.15	0.35	-0.31	0.33	-0.08	0.24	-0.01
8	1	0.17	0.01	-0.15	-0.35	0.31	0.33	-0.08	0.23	0.01
9	1	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.46	-0.54	-0.01	0.00

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		493.6655			626.5633			708.1449		
Red. masses --		5.8267			1.1843			1.2473		
Frc consts --		0.8366			0.2739			0.3685		
IR Inten --		10.7995			29.1301			15.5057		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.35	0.41	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.10
2	6	0.09	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	-0.03
3	1	-0.08	0.00	0.00	0.54	-0.30	-0.09	-0.04	0.06	0.02

4	1	-0.08	0.00	0.00	-0.53	0.30	-0.09	0.04	-0.06	0.02
5	1	0.23	-0.30	0.00	0.00	0.00	-0.44	0.00	0.00	0.06
6	7	-0.30	-0.22	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.10
7	1	-0.29	-0.27	0.02	0.08	0.05	0.01	0.50	0.39	0.11
8	1	-0.29	-0.27	-0.02	-0.08	-0.06	0.01	-0.50	-0.39	0.11
9	1	-0.27	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.37

03 -121.162252

B		0.06528300	0.69174400	-0.00007300
C		1.41214600	-0.12755000	0.00000400
H		2.26846100	0.55442100	-0.00007100
H		1.54218900	-0.77494700	0.88530300
H		1.54210200	-0.77526700	-0.88512600
N		-1.31271200	-0.11549500	0.00000100
H		-2.08336300	0.54955200	0.00025000
H		-1.44002200	-0.71935200	-0.82359900
H		-1.43966900	-0.71936100	0.82357300

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		143.4978			177.8948			263.3142		
Red. masses --		1.2328			1.0726			2.2002		
Frc consts --		0.0150			0.0200			0.0899		
IR Inten --		13.9837			1.1544			10.3741		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.14	0.00	0.00	-0.07	-0.01	0.21	0.00
2	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.04	-0.18	-0.05	0.00
3	1	0.00	0.00	-0.62	0.00	0.00	-0.13	0.06	-0.35	0.00
4	1	0.36	0.31	0.16	0.03	0.18	0.17	-0.40	-0.11	0.00
5	1	-0.36	-0.31	0.16	-0.03	-0.18	0.17	-0.40	-0.11	0.00
6	7	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.01	0.16	-0.05	0.00
7	1	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	0.56	-0.07	-0.32	0.00

8	1	0.16	0.00	-0.07	-0.30	0.36	-0.22	0.38	-0.10	0.01
9	1	-0.16	0.00	-0.07	0.30	-0.36	-0.22	0.38	-0.10	0.00
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		644.5718			768.5024			793.1986		
Red. masses --		4.2346			1.2041			1.1664		
Frc consts --		1.0366			0.4190			0.4324		
IR Inten --		9.1446			10.5015			0.9442		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.18	0.31	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.21	-0.04	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	0.00	0.09
3	1	0.48	-0.38	0.00	0.31	-0.31	0.00	0.00	0.00	-0.16
4	1	-0.05	-0.09	-0.01	-0.35	0.00	-0.02	0.34	-0.25	-0.15
5	1	-0.05	-0.09	0.01	-0.34	0.00	0.02	-0.34	0.25	-0.15
6	7	-0.30	-0.13	0.00	0.03	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.08
7	1	-0.43	-0.28	0.00	0.42	0.38	0.00	0.00	0.00	0.15
8	1	-0.10	-0.11	0.00	-0.34	0.01	-0.02	-0.41	-0.28	0.16
9	1	-0.10	-0.11	0.00	-0.34	0.01	0.02	0.40	0.28	0.16

19 bch3-nhc

0 1 -290.863944

B	1.63709600	-0.00012600	-0.44301500
C	3.07511600	-0.00004500	0.11195100
H	3.20751100	0.87271300	0.77082400
H	3.20731000	-0.87080600	0.77346200
H	3.88479100	-0.00112500	-0.62069200
C	0.24285800	-0.00004200	-0.04896500
C	-1.95431000	0.67001900	0.00208400
C	-1.95437300	-0.66993000	0.00210400
N	-0.61944400	-1.11374700	0.10085700
H	-0.35597600	-1.99944200	-0.29734600
H	-2.77859000	1.36199000	0.03554200
H	-2.77870700	-1.36183000	0.03568600

N	-0.61938000	1.11368900	0.10079100
H	-0.35579300	1.99952700	-0.29698600

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	33.6410	80.5595	110.3441
Red. masses --	1.0921	3.5489	2.9843
Frc consts --	0.0007	0.0136	0.0214
IR Inten --	1.0276	76.3199	0.5118

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.03	0.00	0.03	0.00	-0.25	0.00	-0.15	0.00
2	6	0.00	-0.02	0.00	-0.13	0.00	0.21	0.00	0.24	0.00
3	1	0.01	-0.41	0.51	-0.35	0.00	0.25	-0.25	0.13	0.20
4	1	-0.01	-0.41	-0.51	-0.35	0.00	0.26	0.25	0.13	-0.20
5	1	0.00	0.35	0.00	0.11	0.00	0.47	0.00	0.61	0.00
6	6	0.00	0.02	0.00	0.02	0.00	-0.16	0.00	-0.17	0.00
7	6	-0.01	-0.01	-0.02	0.02	0.00	0.16	0.07	0.08	0.00
8	6	0.01	-0.01	0.02	0.02	0.00	0.16	-0.07	0.08	0.00
9	7	0.02	0.01	0.04	0.04	0.02	-0.11	-0.12	-0.07	-0.01
10	1	0.03	0.01	0.06	0.01	-0.03	-0.01	-0.22	-0.09	-0.05
11	1	-0.02	-0.02	-0.05	0.03	0.01	0.28	0.15	0.17	-0.01
12	1	0.02	-0.02	0.05	0.03	-0.01	0.28	-0.15	0.17	0.01
13	7	-0.02	0.01	-0.04	0.04	-0.02	-0.11	0.12	-0.07	0.01
14	1	-0.03	0.01	-0.06	0.01	0.03	-0.01	0.22	-0.09	0.05

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	202.9669	412.2962	412.7559
Red. masses --	3.2925	1.8377	1.7927
Frc consts --	0.0799	0.1841	0.1799
IR Inten --	58.3894	188.2218	130.5909

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.04	0.00	0.29	-0.09	0.05	0.03	0.02	0.22	-0.01
2	6	0.14	0.00	0.01	-0.13	-0.01	-0.02	0.03	-0.02	0.00

3	1	0.28	0.00	-0.02	-0.17	-0.01	-0.01	0.13	-0.01	-0.02
4	1	0.28	0.00	-0.02	-0.21	0.00	0.00	-0.04	-0.02	0.02
5	1	-0.01	0.00	-0.15	-0.10	-0.02	0.02	0.02	-0.07	-0.01
6	6	-0.02	0.00	-0.12	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	-0.09	0.00
7	6	-0.04	0.00	0.12	0.08	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.03
8	6	-0.04	0.00	0.12	0.06	0.01	-0.03	-0.05	0.00	-0.02
9	7	-0.03	-0.04	-0.15	0.04	-0.09	0.05	-0.07	0.00	-0.04
10	1	-0.14	0.06	-0.45	-0.03	0.10	-0.46	0.00	-0.32	0.73
11	1	-0.05	-0.01	0.28	0.05	-0.03	0.02	0.05	0.04	0.05
12	1	-0.05	0.01	0.28	0.02	0.05	0.00	-0.07	0.03	-0.06
13	7	-0.03	0.04	-0.15	0.07	0.08	0.07	0.04	-0.04	0.02
14	1	-0.14	-0.06	-0.45	-0.03	-0.24	-0.75	0.01	-0.24	-0.44

0 3 -290.871244

B	1.65433100	-0.68835000	-0.00009700
C	2.97477100	0.16028100	-0.00010000
H	2.80763500	1.25013400	-0.00025500
H	3.59783100	-0.05979400	0.87534300
H	3.59811000	-0.06002400	-0.87528500
C	-2.06971900	-0.38496800	-0.00021000
C	-1.72983400	0.92719400	-0.00014400
C	0.22697700	-0.28645700	0.00015000
N	-0.89417700	-1.11276100	0.00016600
H	-0.81273500	-2.11568900	-0.00024400
H	-3.04071700	-0.84866200	-0.00019700
H	-2.35340000	1.80465200	-0.00013800
N	-0.34616900	0.99012600	0.00037500
H	0.20086700	1.83328000	-0.00069900

1	2	3
A	A	A

Frequencies --	58.1965	125.8092	129.3580
Red. masses --	1.0380	3.9265	3.0608

Frc consts	--	0.0021		0.0366		0.0302
IR Inten	--	0.3817		6.2939		0.4562

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.12	0.01	-0.12	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.22	-0.19	0.20	0.00
3	1	0.00	0.00	0.56	0.00	0.00	0.35	-0.49	0.16	0.00
4	1	0.29	-0.40	-0.31	-0.17	-0.13	0.31	-0.13	0.38	0.00
5	1	-0.29	0.40	-0.31	0.18	0.13	0.31	-0.13	0.38	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.24	0.00	0.09	0.00
7	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.13	0.14	0.05	0.00
8	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.23	0.00	-0.15	0.00
9	7	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.08	-0.07	-0.04	0.00
10	1	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.16	-0.19	-0.05	0.00
11	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.46	-0.05	0.19	0.00
12	1	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.23	0.23	0.12	0.00
13	7	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.25	0.14	-0.10	0.00
14	1	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.22	0.24	-0.16	0.00

	4		5		6
	A		A		A

Frequencies	--	231.9426		387.7888		398.5337
Red. masses	--	3.6354		1.4095		3.7899
Frc consts	--	0.1152		0.1249		0.3547
IR Inten	--	2.4576		19.3051		0.1426

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.38	0.00	0.00	-0.07	0.09	0.22	0.00
2	6	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.01	0.26	0.10	0.00
3	1	0.00	0.00	-0.32	0.00	0.00	0.04	0.60	0.16	0.00
4	1	0.28	0.22	-0.23	-0.06	-0.04	0.04	0.20	-0.09	-0.01
5	1	-0.28	-0.22	-0.23	0.06	0.04	0.04	0.20	-0.09	0.01
6	6	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.03	-0.13	0.07	0.00
7	6	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	0.01	0.01	0.03	0.00
8	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.03	-0.06	-0.16	0.00
9	7	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	0.11	-0.18	-0.08	0.00

10	1	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.30	-0.35	-0.09	0.00
11	1	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.15	-0.19	0.18	0.00
12	1	0.00	0.00	0.23	0.00	0.00	0.02	0.12	0.11	0.00
13	7	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	-0.12	0.00	-0.14	0.00
14	1	0.00	0.00	0.50	0.00	0.00	0.92	0.09	-0.20	-0.01

20 bch3-py

0 1 -312.926010

B		1.91883900	-0.00111200	-0.67060500
C		2.98816800	0.00036600	0.45482700
H		2.81793500	-0.87860800	1.09980800
H		4.02690100	0.00066100	0.12841800
H		2.81699900	0.87995000	1.09872800
C		-0.19022700	-1.18752800	-0.18046500
C		-1.53506100	-1.19290800	0.09938200
C		-2.25300400	0.00063300	0.24350000
C		-1.53412900	1.19355800	0.09879700
C		-0.18926800	1.18699000	-0.18083000
N		0.52085100	-0.00060600	-0.33344500
H		-3.31649800	0.00109900	0.43719300
H		0.37258800	-2.09597100	-0.34271600
H		-2.02650100	-2.15359300	0.19926100
H		-2.02482600	2.15466700	0.19825800
H		0.37436300	2.09492900	-0.34307500

1	2	3
A	A	A

Frequencies --	27.6137	106.7023	107.4155
Red. masses --	3.0993	3.3754	1.0455
Frc consts --	0.0014	0.0226	0.0071
IR Inten --	2.9045	10.8835	1.0672

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.19	0.00	0.03	0.00	-0.05	0.00	-0.03	0.00

2	6	0.00	0.28	0.00	-0.20	0.00	0.18	0.00	0.01	0.00
3	1	0.28	0.22	-0.01	-0.36	0.02	0.16	-0.24	0.39	0.45
4	1	0.00	0.57	0.00	-0.12	-0.02	0.42	0.00	-0.39	-0.01
5	1	-0.28	0.22	0.01	-0.34	0.02	0.12	0.25	0.39	-0.45
6	6	-0.09	-0.07	-0.08	0.01	0.00	-0.16	0.00	0.00	-0.02
7	6	-0.08	0.02	-0.04	0.05	0.00	0.05	-0.01	0.00	-0.03
8	6	0.00	0.06	0.00	0.09	0.00	0.20	0.00	0.00	0.00
9	6	0.08	0.02	0.04	0.05	0.00	0.05	0.00	0.00	0.03
10	6	0.09	-0.07	0.08	0.01	0.00	-0.16	0.00	0.00	0.02
11	7	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00	0.00
12	1	0.00	0.13	0.00	0.12	0.00	0.39	0.00	-0.01	-0.01
13	1	-0.17	-0.10	-0.19	-0.01	0.00	-0.25	-0.01	0.00	-0.04
14	1	-0.16	0.05	-0.09	0.06	0.00	0.09	-0.01	0.00	-0.05
15	1	0.16	0.05	0.09	0.06	0.00	0.09	0.01	0.00	0.05
16	1	0.17	-0.10	0.19	-0.01	0.00	-0.25	0.01	0.00	0.04

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	238.6199	309.7650	422.2427
Red. masses --	3.2629	4.7050	3.3174
Frc consts --	0.1095	0.2660	0.3485
IR Inten --	48.8039	8.2095	0.6073

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	0.00	0.24	0.00	0.43	0.00	0.00	-0.21	0.00
2	6	0.23	0.00	0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
3	1	0.42	0.00	0.07	-0.11	0.04	0.00	0.19	0.01	0.06
4	1	0.15	0.00	-0.25	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.18	0.00
5	1	0.42	0.00	0.07	0.11	0.04	0.01	-0.19	0.01	-0.06
6	6	-0.08	-0.01	-0.16	-0.05	-0.14	0.12	0.06	0.06	0.18
7	6	-0.05	0.01	-0.04	-0.13	0.01	-0.11	-0.01	0.00	-0.20
8	6	-0.03	0.00	0.16	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.02	0.00
9	6	-0.05	-0.01	-0.04	0.13	0.01	0.11	0.01	0.00	0.20
10	6	-0.08	0.01	-0.16	0.05	-0.14	-0.12	-0.06	0.06	-0.18
11	7	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.17	0.00	0.00	0.07	0.00

12	1	0.00	0.00	0.32	0.00	0.15	0.00	0.00	-0.05	0.00
13	1	-0.12	-0.01	-0.30	-0.07	-0.20	0.40	0.13	0.07	0.38
14	1	-0.06	0.00	-0.12	-0.25	0.06	-0.19	-0.01	-0.02	-0.41
15	1	-0.06	0.00	-0.12	0.25	0.06	0.19	0.01	-0.02	0.41
16	1	-0.13	0.01	-0.30	0.07	-0.20	-0.40	-0.13	0.07	-0.38

0 3 -312.939861

B		1.85459700	-0.74843200	0.00004900
C		3.10162400	0.19190800	0.00013500
H		4.04328900	-0.36088400	0.00001600
H		3.10937200	0.84691700	-0.88309300
H		3.10942000	0.84661200	0.88358100
C		-0.54707500	-1.31104300	-0.00011000
C		-1.86448600	-0.95678000	0.00005800
C		-2.25503600	0.40096800	0.00016900
C		-1.23048700	1.36607700	-0.00001200
C		0.08733600	0.99964300	-0.00018700
N		0.48581800	-0.35456100	-0.00012200
H		-3.29777900	0.68675000	0.00035400
H		-0.20727200	-2.33679500	-0.00022100
H		-2.60673200	-1.74606100	0.00007700
H		-1.46732400	2.42386100	-0.00004700
H		0.89206900	1.71905900	-0.00037400

1	2	3
A	A	A

Frequencies --	98.6804	102.9341	181.0215
Red. masses --	1.0567	3.2324	3.0472
Frc consts --	0.0061	0.0202	0.0588
IR Inten --	0.1435	0.0685	0.7349

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.07	0.00
2	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.21	-0.19	0.22	0.00

3	1	0.00	0.00	0.55	0.00	0.00	0.15	-0.04	0.48	0.00
4	1	0.27	-0.42	-0.29	0.06	0.22	0.38	-0.37	0.23	0.00
5	1	-0.27	0.42	-0.29	-0.06	-0.22	0.38	-0.37	0.23	0.00
6	6	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.10	-0.06	-0.07	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.04	0.05	0.00
8	6	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.20	0.07	0.08	0.00
9	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.03	0.14	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.23	0.10	-0.12	0.00
11	7	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.18	0.00	-0.14	0.00
12	1	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.39	0.09	0.16	0.00
13	1	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.15	-0.15	-0.10	0.00
14	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.21	-0.11	0.11	0.00
15	1	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.06	0.24	0.02	0.00
16	1	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.40	0.16	-0.18	0.00

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	233.8500	401.0562	410.3905
Red. masses --	3.3763	3.9553	3.4285
Frc consts --	0.1088	0.3748	0.3402
IR Inten --	3.1066	0.8745	5.6607

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.38	0.14	0.17	0.00	0.00	0.00	-0.17
2	6	0.00	0.00	-0.10	0.29	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00
3	1	0.00	0.00	-0.38	0.16	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.08
4	1	-0.34	-0.13	-0.20	0.48	0.12	0.00	0.13	0.08	0.06
5	1	0.34	0.13	-0.20	0.48	0.12	0.00	-0.13	-0.08	0.06
6	6	0.00	0.00	-0.15	-0.14	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.11
7	6	0.00	0.00	-0.11	-0.15	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.01
8	6	0.00	0.00	0.14	-0.12	0.07	0.00	0.00	0.00	0.16
9	6	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.22
10	6	0.00	0.00	-0.11	-0.05	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.09
11	7	0.00	0.00	0.06	-0.01	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.29
12	1	0.00	0.00	0.28	-0.10	0.14	0.00	0.00	0.00	0.22

13	1	0.00	0.00	-0.31	-0.28	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.49
14	1	0.00	0.00	-0.25	-0.19	0.10	0.00	0.00	0.00	-0.21
15	1	0.00	0.00	-0.01	0.13	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.63
16	1	0.00	0.00	-0.21	-0.03	-0.17	0.00	0.00	0.00	-0.09

21 bch3-pyCN

0 1 -405.190740

B		-2.35477900	-0.61048500	-0.62737200
C		-3.30239000	-1.20213300	0.44034600
H		-3.57294600	-0.40118700	1.14848200
H		-4.21412600	-1.66540100	0.06729200
H		-2.74148000	-1.94475700	1.03218300
C		-1.04822900	1.41594900	-0.11648600
C		0.14280700	2.04665700	0.12967200
C		1.35234200	1.34382900	0.18862200
C		1.27695600	-0.04762700	-0.00507600
C		0.07344400	-0.68151300	-0.24684400
N		-1.12060800	0.03074900	-0.31985500
H		2.29933900	1.83562600	0.35177100
H		-1.98103000	1.95192100	-0.21619500
H		0.12473900	3.12033300	0.27250500
H		0.01413900	-1.74293400	-0.43729100
C		2.46168600	-0.85228900	0.04098800
N		3.42140300	-1.49338100	0.08139400

	1	2	3
	A	A	A

Frequencies --	52.4496	98.9815	114.0123
Red. masses --	3.4029	3.2916	1.1269
Frc consts --	0.0055	0.0190	0.0086
IR Inten --	1.7426	11.2146	1.9812

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.04	-0.12	-0.01	-0.02	-0.02	-0.04	0.01	-0.02	-0.01

2	6	-0.20	0.28	0.00	0.17	0.08	0.19	0.01	0.02	0.01
3	1	0.04	0.37	-0.02	0.41	0.10	0.27	-0.37	0.27	-0.42
4	1	-0.32	0.52	0.00	0.04	0.14	0.42	0.20	-0.35	0.01
5	1	-0.43	0.12	0.02	0.27	0.04	0.04	0.07	0.44	0.48
6	6	-0.03	-0.11	0.05	-0.02	-0.01	-0.10	0.00	0.00	-0.03
7	6	-0.05	-0.06	0.03	-0.05	-0.02	0.07	-0.01	-0.01	0.02
8	6	-0.03	-0.02	0.02	-0.06	-0.03	0.15	-0.01	-0.01	0.06
9	6	0.03	-0.02	0.00	-0.02	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.03
10	6	0.06	-0.06	-0.04	0.01	0.01	-0.23	0.00	0.00	0.01
11	7	0.03	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	-0.01
12	1	-0.04	0.02	0.03	-0.08	-0.04	0.31	-0.01	-0.01	0.08
13	1	-0.06	-0.15	0.10	-0.02	-0.02	-0.12	0.01	0.00	-0.08
14	1	-0.10	-0.07	0.05	-0.06	-0.03	0.14	-0.01	-0.01	0.01
15	1	0.11	-0.05	-0.11	0.03	0.04	-0.37	0.00	0.00	0.00
16	6	0.07	0.04	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
17	7	0.11	0.11	-0.04	-0.03	-0.01	0.08	0.01	0.00	-0.05

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	141.1264	156.0738	225.3052
Red. masses --	3.8551	7.7774	3.4543
Frc consts --	0.0452	0.1116	0.1033
IR Inten --	0.7767	5.3873	61.7896

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.02	-0.03	0.00	-0.20	0.25	0.02	0.00	-0.02	0.26
2	6	0.00	-0.01	0.00	-0.03	-0.04	0.02	-0.21	-0.12	0.02
3	1	-0.23	0.14	-0.26	-0.18	-0.09	0.02	-0.40	-0.20	0.03
4	1	0.11	-0.20	-0.03	0.04	-0.18	0.02	-0.12	-0.08	-0.27
5	1	0.01	0.23	0.28	0.11	0.07	0.02	-0.37	-0.20	0.07
6	6	-0.03	-0.03	0.23	0.06	0.04	0.00	0.05	0.06	-0.12
7	6	-0.01	0.00	0.07	0.12	-0.09	0.03	0.05	0.02	-0.04
8	6	0.03	0.04	-0.20	0.04	-0.23	-0.04	0.03	0.01	0.14
9	6	0.03	0.04	-0.21	-0.09	-0.21	-0.10	0.04	0.04	-0.05
10	6	0.03	0.03	-0.16	-0.16	-0.10	-0.06	0.07	0.04	-0.19

11	7	0.00	0.00	0.01	-0.09	0.05	-0.02	0.00	0.01	0.03
12	1	0.03	0.05	-0.26	0.10	-0.34	-0.04	0.02	-0.01	0.29
13	1	-0.08	-0.06	0.51	0.12	0.14	-0.01	0.08	0.08	-0.23
14	1	-0.03	-0.02	0.21	0.24	-0.09	0.07	0.05	0.03	-0.10
15	1	0.03	0.04	-0.20	-0.30	-0.09	-0.04	0.10	0.07	-0.34
16	6	0.01	0.01	-0.05	-0.01	-0.08	-0.03	0.03	0.02	-0.04
17	7	-0.05	-0.06	0.24	0.30	0.39	0.15	0.00	-0.03	0.05

0 3 -405.205689

B	2.17022200	-1.16561900	0.00006700
C	3.66810700	-0.73794000	0.00040800
H	3.90843000	-0.12927600	0.88386500
H	4.34821700	-1.59179700	0.00059100
H	3.90891700	-0.12924100	-0.88286200
C	1.14636300	1.11051700	-0.00049100
C	0.04480100	1.92146000	-0.00001400
C	-1.25492400	1.39197300	0.00044200
C	-1.37297400	-0.02847700	0.00007000
C	-0.26070800	-0.82919400	-0.00036600
N	1.03291900	-0.30062100	-0.00032300
H	-2.13328500	2.02016100	0.00087700
H	2.15545100	1.49237700	-0.00099300
H	0.19679500	2.99419300	-0.00007400
H	-0.31759900	-1.90800000	-0.00067900
C	-2.66323700	-0.64726000	0.00006800
N	-3.71329000	-1.12892100	0.00007000

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	78.2765	84.1404	127.5669
Red. masses --	1.0381	3.7475	5.7799
Frc consts --	0.0037	0.0156	0.0554
IR Inten --	0.0776	0.2456	2.7498

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.07	0.12	0.01	0.00
2	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.27	0.05	0.30	0.00
3	1	-0.08	0.50	-0.34	-0.23	0.02	0.32	-0.08	0.36	0.00
4	1	0.00	0.00	0.50	0.00	0.00	0.47	0.23	0.45	0.00
5	1	0.08	-0.50	-0.34	0.23	-0.02	0.32	-0.08	0.36	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.00	-0.11	0.00
7	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.12	0.00
8	6	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.11	0.02	-0.15	0.00
9	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.05	0.03	-0.15	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.24	0.03	-0.15	0.00
11	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.20	0.03	-0.11	0.00
12	1	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.27	0.00	-0.17	0.00
13	1	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.19	-0.01	-0.09	0.00
14	1	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.10	-0.01	-0.12	0.00
15	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.34	0.05	-0.15	0.00
16	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.04	-0.05	0.01	0.00
17	7	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.16	-0.21	0.37	0.00

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	137.6678	196.6250	244.3427
Red. masses --	4.6396	3.6741	3.9083
Frc consts --	0.0518	0.0837	0.1375
IR Inten --	0.3562	2.2454	3.3436

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.09	-0.05	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.40
2	6	0.00	0.00	-0.01	-0.14	0.22	0.00	0.00	0.00	-0.10
3	1	-0.05	0.12	-0.08	-0.31	0.29	0.00	0.39	0.02	-0.22
4	1	0.00	0.00	0.13	0.09	0.41	0.00	0.00	0.00	-0.37
5	1	0.05	-0.12	-0.08	-0.31	0.29	0.00	-0.39	-0.02	-0.22
6	6	0.00	0.00	0.29	0.07	-0.14	0.00	0.00	0.00	-0.07
7	6	0.00	0.00	0.08	0.15	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.03
8	6	0.00	0.00	-0.28	0.10	0.09	0.00	0.00	0.00	0.10

9	6	0.00	0.00	-0.23	-0.03	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.14
10	6	0.00	0.00	-0.10	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.20
11	7	0.00	0.00	0.03	-0.06	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.05
12	1	0.00	0.00	-0.43	0.16	0.18	0.00	0.00	0.00	0.25
13	1	0.00	0.00	0.61	0.10	-0.23	0.00	0.00	0.00	-0.10
14	1	0.00	0.00	0.23	0.26	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.06
15	1	0.00	0.00	-0.08	-0.21	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.33
16	6	0.00	0.00	-0.05	-0.02	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.12
17	7	0.00	0.00	0.27	0.10	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.11

22 bch3-py(NH₂)

0 1 -368.282985

B	2.45295900	0.40036300	-0.56842700
C	3.40005000	-0.29165800	0.46486400
H	2.98466200	-1.20870100	0.92141400
H	4.41208400	-0.48507600	0.10895600
H	3.49032700	0.44271500	1.28503200
C	0.41531200	-1.02167000	-0.24129800
C	-0.94406100	-1.18801300	-0.11639900
C	-1.78886900	-0.08278000	0.07464100
C	-1.16805900	1.18205500	0.11077300
C	0.17928300	1.31080500	-0.10821700
N	1.00780900	0.22516300	-0.28402700
H	1.08106200	-1.86533500	-0.35431400
H	-1.34650800	-2.19508300	-0.13008500
H	0.66129100	2.27442700	-0.19836300
H	-1.75486900	2.08108000	0.26131300
N	-3.15849400	-0.22811000	0.26291900
H	-3.72354000	0.59120300	0.09646700
H	-3.57645000	-1.06884600	-0.10670600

1	2	3
A	A	A

Frequencies -- 68.2720 114.0357 167.8417

Red. masses --	3.2097	3.3941	1.0997
Frc consts --	0.0088	0.0260	0.0183
IR Inten --	0.4335	26.1756	5.0358

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.02	-0.04	-0.01	-0.03	-0.13	-0.14	0.00	-0.05	-0.01
2	6	-0.10	0.11	0.21	0.11	0.25	-0.03	-0.01	0.00	0.04
3	1	-0.09	0.04	0.09	0.28	0.24	0.11	-0.18	0.32	0.51
4	1	0.01	0.26	0.46	0.15	0.40	0.02	-0.14	-0.42	-0.11
5	1	-0.43	0.11	0.25	-0.07	0.40	-0.14	0.43	0.33	-0.30
6	6	-0.03	-0.03	-0.20	-0.05	-0.08	0.02	0.00	0.01	-0.03
7	6	-0.02	0.00	-0.10	-0.07	-0.02	0.01	0.00	0.01	-0.04
8	6	0.02	0.01	0.03	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01
9	6	0.05	-0.01	0.00	0.05	-0.03	0.12	0.00	0.00	0.01
10	6	0.04	-0.03	-0.07	0.06	-0.08	0.14	0.00	0.01	0.01
11	7	0.01	-0.05	-0.13	0.00	-0.11	0.02	0.00	0.01	-0.01
12	1	-0.06	-0.05	-0.30	-0.09	-0.11	-0.01	0.01	0.02	-0.04
13	1	-0.05	0.01	-0.13	-0.11	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.06
14	1	0.06	-0.04	-0.07	0.09	-0.10	0.20	-0.01	0.01	0.05
15	1	0.08	0.00	0.06	0.10	-0.01	0.18	0.00	-0.01	0.04
16	7	0.04	0.02	0.18	-0.06	0.10	-0.13	0.01	-0.02	0.02
17	1	0.04	0.04	0.27	0.03	0.14	-0.18	-0.01	-0.02	0.05
18	1	-0.02	0.05	0.19	-0.07	0.15	-0.23	0.01	-0.01	0.01

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	210.4493	276.3080	285.5774
Red. masses --	3.4735	1.5677	1.8254
Frc consts --	0.0906	0.0705	0.0877
IR Inten --	6.1687	5.4367	30.0425

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.04	0.20	-0.02	0.13	0.08	-0.02	0.15	0.09
2	6	0.25	0.05	-0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.01
3	1	0.44	-0.03	-0.01	-0.05	0.04	0.03	-0.08	0.05	0.01

4	1	0.18	0.17	-0.29	-0.06	-0.07	-0.11	-0.08	-0.09	-0.12
5	1	0.40	-0.02	0.02	0.17	-0.01	-0.01	0.18	-0.02	0.00
6	6	-0.05	-0.04	-0.03	0.00	-0.04	-0.02	0.00	-0.05	-0.02
7	6	-0.08	0.00	-0.15	0.00	-0.04	0.06	-0.01	-0.04	0.01
8	6	-0.06	0.00	-0.08	0.02	-0.02	0.06	0.02	-0.03	0.05
9	6	-0.04	-0.01	-0.14	0.02	-0.03	0.04	0.03	-0.03	0.08
10	6	-0.02	-0.04	-0.04	0.00	-0.03	-0.07	0.00	-0.04	-0.06
11	7	0.01	-0.06	0.11	-0.01	-0.03	-0.06	-0.01	-0.04	-0.06
12	1	-0.08	-0.07	-0.01	0.00	-0.04	0.01	0.00	-0.05	-0.03
13	1	-0.10	0.01	-0.23	-0.01	-0.04	0.10	-0.03	-0.03	-0.06
14	1	-0.02	-0.05	-0.09	0.00	-0.04	-0.16	0.01	-0.05	-0.12
15	1	-0.03	0.02	-0.23	0.02	-0.02	0.01	0.04	-0.04	0.15
16	7	-0.04	0.04	0.15	0.00	0.03	-0.05	0.00	0.11	-0.04
17	1	-0.04	0.06	0.24	0.13	0.24	0.52	0.01	-0.02	-0.70
18	1	-0.14	0.06	0.22	-0.14	0.35	-0.61	0.05	-0.17	0.54

03 -368.297416

B	-2.39695700	0.64167600	0.00828200
C	-3.55093300	-0.41403900	0.01107900
H	-3.49146900	-1.07492700	0.88865800
H	-4.54046700	0.04802700	0.02418500
H	-3.50835700	-1.06046900	-0.87811000
C	-0.47406500	-0.94008300	-0.00976200
C	0.87159700	-1.18896500	-0.00937000
C	1.81483300	-0.14270300	0.00147600
C	1.29186800	1.17669100	-0.00548000
C	-0.04898100	1.40907300	-0.00418300
N	-1.00046700	0.37146200	-0.00163200
H	-1.20475400	-1.73411300	-0.01417000
H	1.20017300	-2.22319100	-0.02061400
H	-0.46989100	2.40419700	-0.00475600
H	1.96042300	2.03071900	-0.01553600
N	3.19328200	-0.38079300	-0.06931600

H	3.77451200	0.35467000	0.30881500
H	3.48900300	-1.28781700	0.26419200

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	71.7348	101.9819	162.7009
Red. masses --	3.3062	1.0814	3.1676
Frc consts --	0.0100	0.0066	0.0494
IR Inten --	0.3742	0.3131	0.7561

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.04	0.00
2	6	0.00	0.00	0.22	0.00	0.00	0.04	-0.21	0.23	0.00
3	1	0.24	-0.12	0.11	-0.28	0.41	0.37	-0.38	0.21	0.00
4	1	0.01	0.00	0.54	0.00	0.01	-0.48	-0.09	0.49	0.01
5	1	-0.23	0.12	0.12	0.28	-0.41	0.35	-0.38	0.23	0.00
6	6	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	-0.04	0.07	-0.12	0.00
7	6	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	-0.04	0.10	-0.04	0.00
8	6	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.04	0.01	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.02	-0.03	-0.02	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.01	-0.04	-0.10	0.00
11	7	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.14	0.00
12	1	0.00	0.00	-0.35	0.00	0.00	-0.06	0.11	-0.16	0.00
13	1	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.00	-0.06	0.16	-0.02	0.00
14	1	0.00	0.00	-0.14	0.00	0.00	0.03	-0.09	-0.12	0.00
15	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.05	-0.08	0.02	-0.01
16	7	0.01	0.00	0.23	0.00	0.00	0.02	0.07	0.14	0.00
17	1	-0.05	-0.01	0.33	-0.01	-0.01	0.06	-0.01	0.17	0.06
18	1	-0.04	-0.01	0.25	-0.01	-0.01	0.00	0.16	0.15	-0.06

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	193.2929	213.2604	290.3355
Red. masses --	3.4990	1.0453	4.3096
Frc consts --	0.0770	0.0280	0.2140

IR Inten	--	0.9189			18.2232			9.8924		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.31	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.29
2	6	0.00	0.00	-0.14	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04
3	1	-0.31	-0.13	-0.21	0.02	-0.01	-0.01	-0.23	-0.11	-0.11
4	1	0.00	0.00	-0.41	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.23
5	1	0.31	0.13	-0.21	0.02	0.00	-0.01	0.23	0.12	-0.11
6	6	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.17
7	6	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.18
8	6	0.00	0.00	-0.09	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.28
9	6	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.11
10	6	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.18
11	7	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11
12	1	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.31
13	1	0.00	0.00	-0.14	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.17
14	1	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.36
15	1	0.00	0.00	-0.38	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.04
16	7	0.01	-0.01	0.14	0.00	0.04	0.00	-0.02	0.00	-0.15
17	1	-0.06	0.02	0.19	-0.03	-0.27	0.65	0.12	0.00	-0.37
18	1	-0.05	0.02	0.26	-0.07	-0.22	-0.66	0.10	0.00	-0.26

23 bch3-nhc(CN)₂

0 1 -475.396346

B	2.79366900	-0.04395300	0.12036400
N	0.50352500	-1.14878100	-0.21709500
C	-0.80707300	-0.67965700	-0.03352000
C	-0.79199800	0.67930700	-0.03407300
N	0.52889300	1.11945000	-0.21800600
C	1.39631800	-0.02453700	-0.08431200
H	0.75193100	-2.02163300	0.22606000
H	0.79585400	1.98505000	0.22843800
C	-1.91404200	-1.55120200	0.03189000
C	-1.87935800	1.57525000	0.02973700

N	-2.79832100	-2.29319100	0.10723400
N	-2.74675800	2.33705600	0.10378300
C	4.31674700	-0.00708200	0.12291000
H	4.57711500	1.05706900	-0.00716400
H	4.77503400	-0.52463500	-0.72725700
H	4.79678700	-0.33030100	1.05090200

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		55.3912			79.4750			86.5260		
Red. masses --		3.9026			1.6291			3.5641		
Frc consts --		0.0071			0.0061			0.0157		
IR Inten --		1.1030			14.1278			2.5845		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.03	0.00	0.02	0.03	-0.02	-0.18	0.01	0.02	-0.11
2	7	0.01	-0.01	0.19	-0.01	-0.04	0.06	0.03	0.10	0.00
3	6	0.00	0.00	0.07	0.00	-0.01	0.03	0.02	0.07	0.00
4	6	0.00	0.00	0.08	0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.07	0.02
5	7	0.01	0.01	0.20	0.01	-0.02	0.05	-0.02	0.11	0.05
6	6	0.01	0.00	0.15	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.13	0.00
7	1	-0.02	0.02	0.26	-0.02	0.00	0.13	0.05	0.11	0.00
8	1	-0.02	-0.02	0.27	0.01	-0.04	0.10	-0.05	0.09	0.12
9	6	-0.01	0.00	-0.05	-0.02	0.01	0.00	0.06	0.01	0.01
10	6	-0.01	-0.01	-0.04	0.01	-0.01	-0.01	-0.07	0.00	-0.02
11	7	-0.03	0.01	-0.17	-0.05	0.04	-0.02	0.12	-0.05	0.03
12	7	-0.03	-0.01	-0.15	0.01	0.00	-0.04	-0.16	-0.09	-0.06
13	6	0.03	0.00	-0.27	0.02	0.07	0.01	0.02	-0.30	0.02
14	1	0.03	-0.04	-0.56	-0.07	0.17	0.62	0.27	-0.32	0.33
15	1	-0.16	-0.19	-0.26	0.22	0.54	-0.17	-0.01	-0.19	-0.07
16	1	0.22	0.17	-0.30	-0.10	-0.33	-0.07	-0.14	-0.63	-0.01
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		108.4602			132.4273			150.0980		

Red. masses --	8.7947	2.2891	3.6167
Frc consts --	0.0610	0.0237	0.0480
IR Inten --	5.7616	12.3241	4.1614

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.08	0.01	-0.02	-0.02	-0.03	0.27	-0.01	0.04	0.13
2	7	0.08	-0.02	-0.02	0.01	0.02	-0.12	0.02	0.00	0.21
3	6	0.09	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.05	0.01	0.01	0.10
4	6	0.09	-0.01	-0.03	0.02	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.11
5	7	0.08	0.01	-0.05	0.02	-0.01	0.03	-0.02	-0.02	-0.25
6	6	0.08	-0.01	-0.03	0.01	-0.01	0.03	0.00	0.03	0.02
7	1	0.09	0.00	0.02	0.01	-0.05	-0.27	0.03	0.08	0.35
8	1	0.08	-0.01	-0.02	0.03	0.01	-0.02	-0.01	0.12	-0.51
9	6	-0.02	0.14	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.02
10	6	-0.02	-0.15	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02
11	7	-0.27	0.44	0.02	-0.01	0.04	0.08	0.00	0.00	-0.16
12	7	-0.25	-0.42	0.07	-0.03	-0.04	-0.06	-0.01	-0.02	0.16
13	6	0.08	0.02	0.06	-0.02	0.01	-0.10	-0.01	-0.05	-0.06
14	1	0.11	-0.04	-0.31	-0.12	0.09	0.34	0.03	-0.02	0.30
15	1	0.10	-0.27	0.24	-0.18	0.40	-0.43	-0.11	0.19	-0.26
16	1	0.04	0.30	0.18	0.22	-0.35	-0.34	0.07	-0.35	-0.20

0 3 -475.396103

B	-2.83353600	-0.71342800	-0.00021500
N	-0.72083200	0.83513200	0.00009400
C	0.65162500	0.67875500	-0.00006200
C	0.89984500	-0.67400900	-0.00008200
N	-0.32143800	-1.31042200	-0.00008800
C	-1.38585100	-0.40348500	-0.00003100
H	-1.19578300	1.72309800	-0.00071500
H	-0.46078300	-2.30909900	-0.00003700
C	1.56317100	1.75446900	-0.00003500
C	2.13702400	-1.35245800	-0.00001700
N	2.28458100	2.65828200	0.00005000

N	3.13806700	-1.93035000	0.00015700
C	-4.10892400	0.18773600	0.00015900
H	-4.73787700	-0.01554400	0.87487500
H	-4.73816900	-0.01525400	-0.87442800
H	-3.90369800	1.26939400	0.00028800

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		57.2938			72.1051			91.7224		
Red. masses --		1.0264			5.4388			3.8837		
Frc consts --		0.0020			0.0167			0.0193		
IR Inten --		0.0475			1.9497			3.3784		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.01	0.00
2	7	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.23	0.02	0.11	0.00
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.12	0.03	0.07	0.00
4	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.12	-0.01	0.06	0.00
5	7	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.23	-0.02	0.10	0.00
6	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.18	-0.01	0.12	0.00
7	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.14	0.05	0.12	0.00
8	1	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.11	-0.05	0.10	0.00
9	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.10	0.01	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.04	0.02	0.00
11	7	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.12	0.22	-0.09	0.00
12	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.27	-0.07	-0.04	0.00
13	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.32	-0.19	-0.29	0.00
14	1	0.31	0.38	0.33	-0.06	0.20	-0.32	-0.14	-0.46	0.00
15	1	-0.31	-0.38	0.33	0.06	-0.20	-0.32	-0.14	-0.46	0.00
16	1	0.00	0.00	-0.54	0.00	0.00	-0.55	-0.46	-0.25	0.00

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		108.0089			141.1720			193.9109		
Red. masses --		12.1521			6.8472			5.7118		

Frc consts		--	0.0835			0.0804			0.1265		
IR Inten		--	3.2917			1.7128			8.1511		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	5	0.11	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.28	0.00	0.00	-0.27	
2	7	0.11	0.06	0.00	0.00	0.00	0.37	0.00	0.00	-0.20	
3	6	0.12	0.06	0.00	0.00	0.00	0.24	0.00	0.00	0.17	
4	6	0.11	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.33	
5	7	0.09	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	0.10	
6	6	0.10	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.20	
7	1	0.12	0.06	0.00	0.00	0.00	0.34	0.00	0.00	-0.35	
8	1	0.09	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.45	0.00	0.00	0.21	
9	6	-0.02	0.18	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.08	
10	6	-0.01	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.16	
11	7	-0.33	0.43	0.00	0.00	0.00	-0.33	0.00	0.00	-0.09	
12	7	-0.26	-0.60	0.00	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	-0.24	
13	6	0.03	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.13	
14	1	0.05	-0.18	0.00	0.19	-0.12	0.18	0.22	-0.20	0.25	
15	1	0.05	-0.18	0.00	-0.19	0.12	0.18	-0.22	0.20	0.25	
16	1	-0.08	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	0.34	

24 bch3-nhcCN

0 1 -383.134273

B	-2.34508000	-0.30097300	0.18103500
N	-0.46388500	1.41522800	-0.09668600
C	0.90983700	1.35909800	0.04171100
C	1.30672000	0.06943700	0.00678000
N	0.15573700	-0.76304000	-0.18371200
C	-0.99785900	0.08654300	-0.02967200
H	-0.98458800	2.20151900	0.25635800
H	0.15220500	-1.61953900	0.35228100
C	2.61512200	-0.44864900	0.01351600
N	3.68357900	-0.89655500	0.04284700
C	-3.82119200	-0.65534300	0.01112300

H	-4.32303500	-1.06869900	0.89018300
H	-4.00656400	-1.30708000	-0.85178200
H	-4.33055000	0.29222000	-0.23102600
H	1.51413900	2.25050300	0.08092700

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		44.8169			68.6142			93.8672		
Red. masses --		1.5429			4.0037			3.7841		
Frc consts --		0.0018			0.0111			0.0196		
IR Inten --		16.9224			7.5265			11.3635		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.02	-0.16	-0.04	-0.01	-0.14	0.00	0.08	-0.22
2	7	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	-0.04	0.05	0.05	0.13	0.03
3	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.06	0.05	0.07	-0.01
4	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.06	0.00	0.05	0.02
5	7	0.02	-0.02	-0.04	0.01	-0.09	0.32	-0.03	0.07	0.11
6	6	0.01	-0.02	-0.06	0.00	-0.05	0.12	-0.01	0.15	0.02
7	1	-0.01	-0.03	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.10	0.14	0.09
8	1	0.01	0.00	-0.02	0.03	0.10	0.62	-0.06	0.17	0.28
9	6	0.01	0.01	0.03	0.03	0.02	-0.06	-0.04	-0.04	-0.01
10	7	0.01	0.02	0.06	0.06	0.09	-0.18	-0.09	-0.18	-0.05
11	6	-0.04	0.02	0.11	-0.06	0.09	-0.15	0.05	-0.26	0.03
12	1	0.22	-0.29	0.11	-0.04	-0.05	-0.21	0.30	-0.35	0.13
13	1	-0.36	0.39	-0.10	-0.18	0.30	-0.29	0.08	-0.35	0.09
14	1	-0.06	0.16	0.70	0.01	0.20	0.12	-0.23	-0.41	0.07
15	1	-0.01	-0.01	0.05	-0.01	-0.01	-0.23	0.09	0.04	-0.06

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		108.9916			179.7235			184.0406		
Red. masses --		1.8022			6.4859			5.1972		
Frc consts --		0.0126			0.1234			0.1037		
IR Inten --		30.5349			0.4919			2.5565		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.02	-0.02	0.20	0.03	0.00	0.05	0.07	-0.19	-0.07
2	7	-0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.03	-0.29	-0.13	-0.05	0.04
3	6	0.00	0.03	-0.06	-0.04	0.02	0.22	-0.11	0.16	-0.03
4	6	0.00	0.03	-0.02	-0.01	0.02	0.40	0.07	0.21	-0.05
5	7	-0.01	0.04	0.01	0.04	0.04	0.02	0.18	0.04	0.03
6	6	0.00	0.03	0.04	0.01	-0.02	-0.15	0.06	-0.14	0.02
7	1	-0.02	0.05	-0.13	-0.15	0.02	-0.61	-0.22	-0.14	0.12
8	1	0.00	0.00	-0.06	-0.08	-0.08	-0.17	0.34	0.07	0.08
9	6	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.16	0.04	0.14	-0.02
10	7	-0.04	-0.07	0.02	-0.03	-0.06	-0.31	-0.15	-0.30	0.02
11	6	0.06	-0.05	-0.09	0.03	0.00	0.02	0.00	0.10	0.01
12	1	0.02	-0.49	-0.32	0.02	0.01	0.02	-0.10	0.36	0.08
13	1	0.09	0.40	-0.44	0.00	0.03	0.01	-0.18	0.02	0.12
14	1	0.07	0.09	0.42	0.06	0.03	0.06	0.24	0.20	-0.15
15	1	-0.01	0.04	-0.10	-0.07	0.04	0.27	-0.25	0.25	-0.03

0 3 -383.137927

B	2.52070700	0.21075200	-0.00011900
N	0.34777300	1.59852800	0.00003500
C	-1.00160100	1.41686300	0.00000000
C	-1.23574900	0.06958600	-0.00002000
N	0.01622400	-0.55385500	0.00000800
C	1.04953600	0.38755100	-0.00001600
H	0.82685400	2.48507200	-0.00003300
H	0.16491200	-1.54874100	-0.00005200
C	-2.46031600	-0.62408600	-0.00000200
N	-3.45737700	-1.21363000	0.00001200
C	3.43185500	-1.06078500	-0.00000900
H	2.87911000	-2.01318100	-0.00473000
H	4.08904300	-1.08126100	0.87756800
H	4.09614000	-1.07672700	-0.87227000
H	-1.70828800	2.22900600	0.00000700

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	15.7203	94.1098	99.9267
Red. masses --	1.0199	3.9916	5.9436
Frc consts --	0.0001	0.0208	0.0350
IR Inten --	0.0591	6.0900	0.1451

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.08
2	7	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.03
3	6	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.14
4	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.06	0.00	0.00	0.00	0.13
5	7	0.00	0.00	0.00	0.04	0.10	0.00	0.00	0.00	0.47
6	6	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.12	0.00	0.00	0.00	0.18
7	1	0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.12	0.00	0.00	0.00	-0.30
8	1	0.00	0.00	0.00	0.07	0.11	0.00	0.00	0.00	0.36
9	6	0.00	0.00	0.01	0.09	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.03
10	7	0.00	0.00	0.02	0.18	-0.20	0.00	0.00	0.00	-0.23
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.29	-0.20	0.00	0.00	0.00	-0.22
12	1	0.00	0.00	-0.55	-0.52	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.31
13	1	-0.42	-0.27	0.32	-0.29	-0.36	0.00	0.02	-0.09	-0.23
14	1	0.42	0.26	0.32	-0.29	-0.37	0.00	-0.02	0.10	-0.23
15	1	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.39

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	161.4981	181.6493	234.5809
Red. masses --	4.8778	5.4778	2.5833
Frc consts --	0.0750	0.1065	0.0838
IR Inten --	7.5623	3.3516	17.4290

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.31	-0.08	-0.18	0.00	0.00	0.00	0.22
2	7	0.00	0.00	0.10	0.08	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.16
3	6	0.00	0.00	-0.22	0.05	0.18	0.00	0.00	0.00	0.06

4	6	0.00	0.00	-0.26	-0.13	0.21	0.00	0.00	0.00	0.17
5	7	0.00	0.00	-0.03	-0.21	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.13
6	6	0.00	0.00	0.19	-0.07	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.02
7	1	0.00	0.00	0.10	0.21	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.17
8	1	0.00	0.00	0.09	-0.37	0.02	0.00	0.00	0.00	0.81
9	6	0.00	0.00	-0.08	-0.08	0.13	0.00	0.00	0.00	0.07
10	7	0.00	0.00	0.23	0.17	-0.30	0.00	0.00	0.00	-0.09
11	6	0.00	0.00	-0.16	0.18	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05
12	1	0.00	0.00	-0.37	0.41	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.21
13	1	0.17	-0.28	-0.29	0.18	0.18	0.00	0.11	-0.19	-0.14
14	1	-0.17	0.28	-0.29	0.18	0.18	0.00	-0.11	0.19	-0.14
15	1	0.00	0.00	-0.33	0.18	0.29	0.00	0.00	0.00	0.00

25 bch3-nhc(OMe)₂

0 1 -519.904495

B	-2.73225500	-0.05715600	0.11135000
N	-0.60432200	1.17223500	-0.49539200
C	0.73690400	0.67412100	-0.35406300
C	0.76099800	-0.66509900	-0.35077100
N	-0.56134600	-1.21166300	-0.48824600
C	-1.40560400	-0.03425000	-0.33574500
H	-0.72382800	1.62145500	-1.40635000
H	-0.66580700	-1.67314000	-1.39492700
O	1.77919000	1.53328200	-0.32520700
O	1.83360800	-1.48576800	-0.31778300
C	1.85130100	-2.43139700	0.76383600
H	2.73660300	-3.04724100	0.61121300
H	1.92396900	-1.90850300	1.72309800
H	0.95367900	-3.05360600	0.75509400
C	1.76396600	2.48164400	0.75396300
H	1.85977000	1.96435400	1.71423300
H	2.62435000	3.13083900	0.59704000
H	0.84289600	3.06860800	0.74646900

C	-4.19447500	-0.02763700	0.54236600
H	-4.37822400	-0.56485800	1.47826300
H	-4.42855400	1.02828600	0.74754700
H	-4.90482500	-0.36881300	-0.21655300

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		58.0124			61.4518			71.0630		
Red. masses --		2.8152			3.2662			2.2784		
Frc consts --		0.0056			0.0073			0.0068		
IR Inten --		1.3235			0.0140			4.5623		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.06	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.01	-0.04
2	7	-0.02	0.00	0.13	-0.04	-0.09	-0.02	-0.02	-0.01	-0.05
3	6	-0.01	0.00	0.02	-0.03	-0.04	0.01	-0.02	-0.01	-0.06
4	6	-0.01	0.00	0.02	0.03	-0.04	-0.01	-0.02	0.00	-0.06
5	7	-0.02	0.00	0.13	0.05	-0.09	0.01	-0.02	-0.01	-0.05
6	6	-0.02	0.00	0.12	0.00	-0.13	0.00	-0.02	-0.01	-0.05
7	1	-0.08	0.05	0.16	-0.05	-0.14	-0.04	-0.03	0.01	-0.04
8	1	-0.07	-0.06	0.16	0.06	-0.12	0.02	-0.02	-0.02	-0.04
9	8	-0.01	0.00	-0.07	-0.07	0.01	0.04	-0.02	0.00	-0.03
10	8	-0.01	0.00	-0.07	0.07	0.02	-0.03	-0.02	0.00	-0.03
11	6	0.13	0.05	-0.03	0.13	-0.01	-0.05	0.07	0.18	0.13
12	1	0.10	0.03	-0.13	0.17	0.05	-0.08	0.02	0.10	0.12
13	1	0.28	0.10	-0.07	0.11	-0.03	-0.04	0.21	0.33	0.03
14	1	0.12	0.07	0.12	0.17	-0.06	-0.06	0.03	0.22	0.34
15	6	0.13	-0.06	-0.01	-0.16	0.01	0.05	0.05	-0.16	0.11
16	1	0.27	-0.10	-0.06	-0.17	0.00	0.05	0.16	-0.30	0.03
17	1	0.10	-0.03	-0.10	-0.19	0.05	0.09	0.01	-0.10	0.13
18	1	0.12	-0.07	0.14	-0.19	-0.04	0.01	0.03	-0.19	0.29
19	6	-0.12	0.01	-0.19	0.01	0.30	0.01	0.01	0.02	0.05
20	1	-0.26	0.21	-0.10	-0.10	0.45	0.07	0.05	-0.22	-0.08
21	1	-0.20	0.05	-0.48	0.22	0.38	-0.12	0.10	-0.03	0.36

22	1	0.01	-0.17	-0.23	-0.05	0.36	0.04	-0.07	0.26	0.02
		4				5			6	
		A				A			A	
Frequencies --		78.4246				91.4744			133.7733	
Red. masses --		1.2367				1.9615			1.1030	
Frc consts --		0.0045				0.0097			0.0116	
IR Inten --		0.4454				9.0912			0.6572	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.03	0.01	-0.04	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.01
2	7	0.00	-0.01	0.05	0.03	0.01	0.06	0.00	0.00	-0.03
3	6	0.00	-0.01	0.03	0.02	-0.03	0.04	0.01	0.01	0.01
4	6	0.00	-0.01	0.02	-0.01	-0.03	-0.04	0.01	0.01	0.03
5	7	0.00	-0.01	0.04	-0.03	0.01	-0.08	0.01	0.00	0.01
6	6	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.01
7	1	0.00	0.01	0.06	0.04	0.07	0.09	0.02	-0.03	-0.04
8	1	0.00	-0.01	0.04	-0.04	0.07	-0.11	0.03	0.00	0.01
9	8	0.01	-0.01	0.00	0.05	-0.07	0.09	-0.01	0.03	0.00
10	8	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	-0.08	-0.08	0.00	-0.01	0.02
11	6	0.03	-0.02	-0.02	0.06	0.08	0.05	-0.02	-0.05	-0.01
12	1	0.02	-0.03	-0.06	-0.10	-0.12	-0.09	-0.27	-0.35	-0.28
13	1	0.06	-0.04	-0.02	0.42	0.21	-0.05	0.43	-0.09	-0.02
14	1	0.03	-0.02	0.00	-0.07	0.25	0.37	-0.24	0.27	0.22
15	6	0.00	0.06	-0.06	-0.08	0.08	-0.04	-0.02	0.02	0.01
16	1	-0.04	0.11	-0.02	-0.40	0.20	0.05	0.31	0.04	-0.02
17	1	0.02	0.03	-0.08	0.07	-0.08	0.08	-0.21	0.24	-0.17
18	1	0.01	0.07	-0.11	0.02	0.22	-0.35	-0.17	-0.21	0.20
19	6	-0.03	0.02	-0.04	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
20	1	-0.06	-0.46	-0.32	0.01	0.09	0.06	0.03	0.00	0.01
21	1	0.12	-0.07	0.55	-0.04	0.01	-0.13	0.01	0.00	0.00
22	1	-0.09	0.49	-0.19	0.03	-0.12	0.03	0.01	-0.01	0.01

0 3 -519.903920

B 2.91467800 -0.80466600 0.13350900

N	0.39820400	-1.33115800	-0.08024200
C	-0.78536100	-0.64491800	-0.34236000
C	-0.49029600	0.68065500	-0.35960900
N	0.87640400	0.80562800	-0.10362500
C	1.48237500	-0.45567600	-0.00085900
H	0.53405000	-2.31841000	-0.23373900
H	1.40328000	1.63514600	-0.32710200
O	-1.95778600	-1.27551600	-0.55030300
O	-1.27540700	1.75132200	-0.59358700
C	-1.73505300	2.45321500	0.57667500
H	-2.30644700	3.30549900	0.21249800
H	-2.37797100	1.80767900	1.18185300
H	-0.89267700	2.80311800	1.18040300
C	-2.57612000	-1.84123500	0.62003500
H	-2.80249700	-1.05819700	1.34986400
H	-3.49865800	-2.30665000	0.27742700
H	-1.93226600	-2.59548700	1.08139700
C	4.20200400	0.08747700	0.22243200
H	4.00688800	1.16742800	0.11856000
H	4.71706400	-0.04542500	1.18192500
H	4.93384400	-0.17621000	-0.55032500

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		24.9501			46.8333			50.1347		
Red. masses --		2.4125			1.0206			2.3637		
Frc consts --		0.0009			0.0013			0.0035		
IR Inten --		2.9056			0.1780			2.8876		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.01	0.03
2	7	-0.02	0.03	0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.02	0.01
3	6	0.00	0.06	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.02
4	6	0.04	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00

5	7	0.04	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.02
6	6	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.01	0.01
7	1	-0.04	0.02	0.06	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.01	0.03
8	1	0.06	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.04
9	8	-0.03	0.10	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.05	0.03
10	8	0.08	0.08	-0.03	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.02	-0.02
11	6	-0.21	-0.11	-0.03	0.01	0.00	0.02	0.12	0.13	-0.04
12	1	-0.04	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.02	0.04	0.08	-0.06
13	1	-0.43	-0.18	-0.35	0.02	0.00	0.02	0.22	0.18	0.12
14	1	-0.36	-0.29	0.28	0.02	0.00	0.00	0.19	0.23	-0.19
15	6	0.08	-0.07	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.12	-0.24	-0.03
16	1	0.22	-0.18	0.19	0.02	-0.02	0.01	0.29	-0.43	0.23
17	1	0.01	0.05	0.05	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.09	0.00
18	1	0.08	-0.19	-0.19	0.01	-0.02	-0.02	0.14	-0.41	-0.34
19	6	0.03	-0.08	-0.03	-0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.03
20	1	0.07	-0.08	-0.06	0.05	-0.04	-0.55	-0.02	-0.02	0.09
21	1	0.03	-0.07	-0.03	-0.34	0.43	0.24	0.01	-0.08	0.01
22	1	0.02	-0.14	-0.02	0.25	-0.35	0.37	-0.05	0.01	-0.01

4

5

6

A

A

A

Frequencies --

77.3324

101.1858

128.8526

Red. masses --

3.7828

2.3719

1.1367

Frc consts --

0.0133

0.0143

0.0111

IR Inten --

1.0505

1.4868

0.2544

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.00	-0.01
2	7	0.00	0.00	0.18	-0.03	-0.06	0.01	-0.01	0.01	-0.01
3	6	0.01	0.00	0.08	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00
4	6	0.01	0.00	0.09	0.04	-0.03	-0.01	-0.02	0.00	0.01
5	7	0.00	0.00	0.17	0.04	-0.08	-0.01	-0.02	0.01	0.00
6	6	0.00	0.00	0.16	-0.01	-0.09	0.01	-0.01	0.01	-0.01
7	1	0.02	0.01	0.08	-0.07	-0.07	0.01	-0.01	0.01	-0.02
8	1	0.01	-0.01	0.16	0.07	-0.10	0.00	-0.02	0.01	-0.01

9	8	0.04	0.00	-0.07	-0.04	0.04	0.01	0.00	-0.04	0.00
10	8	0.03	-0.01	0.00	0.10	0.02	0.00	0.01	0.02	0.00
11	6	-0.02	0.07	-0.07	0.08	-0.03	0.01	0.03	0.05	0.00
12	1	-0.02	0.03	-0.16	0.31	0.14	0.04	0.39	0.29	-0.01
13	1	-0.04	0.10	-0.05	-0.15	0.03	-0.16	-0.30	0.20	-0.20
14	1	-0.05	0.12	-0.06	0.07	-0.28	0.18	0.04	-0.31	0.19
15	6	-0.10	-0.06	-0.17	-0.03	0.01	0.00	0.03	-0.05	0.01
16	1	-0.23	-0.10	-0.18	0.16	-0.04	0.11	-0.31	-0.01	-0.14
17	1	-0.04	-0.08	-0.32	-0.14	0.20	0.02	0.22	-0.39	-0.04
18	1	-0.14	-0.06	-0.11	-0.12	-0.15	-0.14	0.20	0.22	0.21
19	6	0.03	0.01	-0.27	-0.14	0.21	-0.02	0.00	-0.01	0.01
20	1	0.02	0.00	-0.41	-0.36	0.18	0.00	0.01	-0.01	0.01
21	1	0.15	0.15	-0.31	-0.08	0.31	-0.04	-0.02	-0.03	0.01
22	1	-0.07	-0.10	-0.32	-0.12	0.37	-0.05	0.00	-0.02	0.02

26 bch3-nhcOMe

0 1 -405.384381

B	2.35720300	-0.29961800	0.03997300
N	-0.10467300	-0.52737000	-0.54164900
C	-1.18328900	0.32905400	-0.14980800
C	-0.74678200	1.52145600	0.26618300
N	0.68323900	1.59573700	0.17063200
C	1.07765600	0.23570100	-0.16795700
H	-0.16554900	-0.75912200	-1.53433600
H	0.98537900	2.29019800	-0.51099700
O	-2.45726800	-0.10313600	-0.27797100
C	-2.77807500	-1.31363100	0.42918300
H	-2.67418100	-1.15909800	1.50781200
H	-3.81574300	-1.53664200	0.18524900
H	-2.13217500	-2.13592700	0.11520800
C	3.74541200	-0.91126400	0.20032900
H	4.15127800	-0.79764200	1.21089700
H	3.61823900	-1.99417000	0.04703000

H	4.48921600	-0.57352700	-0.52790000
H	-1.32383800	2.34264900	0.66048100

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		58.3223			74.0956			79.9966		
Red. masses --		2.7034			1.9755			1.3645		
Frc consts --		0.0054			0.0064			0.0051		
IR Inten --		1.3564			0.4612			3.7994		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.05	0.00	0.03	-0.01	0.03	0.06	-0.01	-0.02	0.05
2	7	0.01	-0.07	0.12	0.05	0.04	0.00	-0.03	-0.02	-0.01
3	6	-0.01	-0.03	-0.03	0.01	0.01	-0.03	0.00	0.01	0.02
4	6	-0.02	-0.02	-0.04	-0.05	0.03	-0.05	0.03	0.00	0.00
5	7	-0.01	-0.06	0.09	-0.05	0.08	0.01	0.03	-0.02	-0.07
6	6	0.01	-0.06	0.10	0.01	0.09	0.04	-0.01	-0.04	-0.03
7	1	0.06	-0.19	0.15	0.09	0.05	0.00	-0.06	-0.02	-0.01
8	1	0.08	-0.05	0.14	-0.03	0.09	0.04	0.00	-0.07	-0.13
9	8	0.00	-0.01	-0.13	0.03	-0.07	-0.04	-0.02	0.04	0.06
10	6	-0.13	0.12	0.03	0.08	-0.02	0.07	0.00	-0.02	-0.04
11	1	-0.33	0.32	0.02	-0.02	0.11	0.06	0.17	-0.16	-0.03
12	1	-0.09	0.07	-0.12	0.12	-0.15	0.00	-0.06	0.09	0.09
13	1	-0.08	0.06	0.30	0.19	0.01	0.21	-0.12	-0.03	-0.23
14	6	0.11	0.10	-0.14	-0.08	-0.15	-0.04	0.02	0.06	0.04
15	1	0.15	-0.12	-0.13	-0.12	-0.62	0.03	-0.13	-0.38	0.15
16	1	0.20	0.13	-0.41	-0.20	-0.07	-0.53	0.15	0.12	-0.52
17	1	0.05	0.34	-0.09	-0.01	0.06	0.14	0.09	0.47	0.29
18	1	-0.03	0.01	-0.13	-0.09	0.02	-0.08	0.06	0.01	0.01

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		91.6582			134.7122			187.8186		
Red. masses --		2.6210			1.3032			3.2101		
Frc consts --		0.0130			0.0139			0.0667		

IR Inten	--	6.7098			4.1863			8.4964		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	0.02	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.15	0.21
2	7	0.01	-0.03	0.22	0.01	0.01	-0.04	-0.08	0.03	-0.06
3	6	0.00	0.02	0.05	-0.01	0.00	-0.07	-0.05	0.09	-0.09
4	6	-0.02	0.08	-0.09	-0.03	-0.01	-0.02	0.00	0.06	-0.07
5	7	-0.01	0.06	-0.05	-0.02	-0.02	0.07	0.02	-0.06	0.04
6	6	0.01	0.03	0.11	0.00	0.00	0.02	-0.06	-0.09	0.07
7	1	0.03	-0.20	0.26	0.05	0.00	-0.04	-0.02	0.08	-0.07
8	1	0.02	-0.01	-0.11	0.03	0.03	0.14	0.16	-0.08	0.08
9	8	0.00	0.02	0.03	0.00	-0.02	-0.06	-0.04	0.04	0.01
10	6	0.01	-0.09	-0.15	0.03	0.04	0.07	0.21	-0.03	0.02
11	1	0.26	-0.34	-0.14	0.57	-0.01	0.02	0.15	0.03	0.02
12	1	-0.07	0.10	0.02	-0.15	0.32	0.55	0.28	-0.29	-0.01
13	1	-0.16	-0.10	-0.46	-0.34	-0.12	-0.25	0.43	0.14	0.06
14	6	0.00	-0.06	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	-0.07
15	1	0.18	0.02	-0.19	0.01	0.02	-0.01	0.25	0.21	-0.18
16	1	-0.12	-0.07	0.04	0.00	0.00	0.03	0.20	0.02	0.05
17	1	-0.10	-0.20	-0.27	0.00	-0.02	-0.01	-0.23	0.15	-0.28
18	1	-0.03	0.13	-0.22	-0.05	-0.03	-0.01	0.05	0.09	-0.06

0 3 -405.388672

B	2.39427800	-0.89070000	-0.06135300
N	-0.17548000	-0.73963500	-0.27415500
C	-1.15891600	0.23734200	-0.25847100
C	-0.56037100	1.42518600	0.00565500
N	0.79971500	1.16468600	0.13515000
C	1.08970900	-0.18808500	-0.06100100
H	-0.29821400	-1.68997200	-0.58484600
H	1.51307300	1.85894900	0.27277800
O	-2.45426600	-0.04215800	-0.50891000
C	-3.16562300	-0.68774600	0.56417000
H	-3.17144700	-0.05045700	1.45299100

H	-4.18232000	-0.83554300	0.20440100
H	-2.71796900	-1.65534700	0.80877600
C	3.85848700	-0.36886300	0.15665000
H	3.93047200	0.72254600	0.29501700
H	4.32251800	-0.82657700	1.03905800
H	4.50940400	-0.62008200	-0.68936900
H	-0.99214000	2.40489000	0.11025500

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		44.5814			51.3789			80.0921		
Red. masses --		2.0765			1.1802			3.8167		
Frc consts --		0.0024			0.0018			0.0144		
IR Inten --		3.0908			1.3203			3.3536		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.04	-0.02	0.04	-0.01	-0.01	0.04	0.01	-0.01	0.07
2	7	-0.03	0.04	0.06	-0.01	0.01	0.03	-0.01	-0.05	0.25
3	6	-0.01	0.06	0.03	0.00	0.02	0.00	0.02	-0.01	0.05
4	6	0.02	0.06	-0.05	0.01	0.02	-0.04	0.02	0.00	-0.02
5	7	0.02	0.04	-0.07	0.01	0.02	-0.05	0.01	-0.02	0.11
6	6	-0.01	0.02	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00	-0.03	0.18
7	1	-0.05	0.02	0.10	-0.02	0.00	0.07	0.01	-0.03	0.18
8	1	0.03	0.03	-0.10	0.01	0.02	-0.07	0.02	0.00	-0.05
9	8	-0.02	0.09	0.05	-0.01	0.03	0.02	0.04	0.01	-0.08
10	6	0.07	-0.20	-0.06	0.02	-0.06	-0.01	-0.11	0.02	-0.17
11	1	0.17	-0.45	0.12	0.06	-0.13	0.04	-0.19	0.01	-0.16
12	1	0.03	-0.07	-0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.07	0.06	-0.29
13	1	0.07	-0.28	-0.37	0.02	-0.08	-0.11	-0.17	0.00	-0.13
14	6	-0.01	-0.06	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.04	0.06	-0.26
15	1	0.06	-0.03	-0.35	-0.04	-0.09	0.54	0.03	0.07	-0.37
16	1	-0.14	0.19	0.20	0.22	-0.43	-0.32	0.24	0.15	-0.33
17	1	0.05	-0.39	0.15	-0.17	0.44	-0.26	-0.14	0.01	-0.38
18	1	0.04	0.07	-0.09	0.01	0.03	-0.08	0.03	0.02	-0.14

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		114.7725			149.6714			174.2774		
Red. masses --		2.3782			1.2580			4.0862		
Frc consts --		0.0185			0.0166			0.0731		
IR Inten --		1.2008			0.7154			7.1179		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.02	0.07	0.01	0.02	0.05	0.00	0.07	0.04	-0.04
2	7	0.03	0.06	0.01	0.03	0.00	0.00	0.05	0.00	0.01
3	6	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.03	-0.02	0.00	-0.05	0.22
4	6	-0.08	0.04	0.00	-0.04	-0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.11
5	7	-0.06	0.11	0.03	-0.04	0.03	0.02	0.05	0.05	-0.24
6	6	0.01	0.12	0.03	0.01	0.04	0.01	0.07	0.04	-0.13
7	1	0.09	0.06	0.01	0.06	-0.01	0.02	0.02	-0.06	0.22
8	1	-0.10	0.15	0.02	-0.06	0.06	0.00	0.00	0.03	0.09
9	8	0.01	-0.09	-0.03	0.00	-0.05	-0.02	0.01	-0.01	0.10
10	6	0.02	-0.03	0.01	-0.03	0.04	0.02	-0.28	-0.01	-0.11
11	1	-0.27	0.16	-0.14	0.46	-0.14	0.15	-0.49	-0.04	-0.08
12	1	0.11	-0.37	-0.10	-0.17	0.56	0.22	-0.19	0.06	-0.38
13	1	0.23	0.14	0.29	-0.39	-0.21	-0.29	-0.41	-0.05	-0.03
14	6	0.08	-0.21	-0.04	0.05	-0.05	0.00	0.08	-0.02	0.06
15	1	0.32	-0.23	-0.03	0.13	-0.05	0.00	0.12	-0.03	0.09
16	1	0.02	-0.33	-0.06	0.02	-0.09	-0.01	0.00	-0.07	0.07
17	1	-0.01	-0.35	-0.07	0.02	-0.09	-0.01	0.13	-0.02	0.09
18	1	-0.13	0.02	-0.01	-0.08	-0.03	-0.01	0.00	-0.03	0.07

27 bch3-nhc(NH₂)

0 1 -346.221708

B	2.06189700	-0.07073300	-0.03262100
N	-0.00645900	1.45562200	0.18193900
C	-1.38584900	1.14609700	-0.08193900
C	-1.57023800	-0.17783000	-0.05582800
N	-0.32359200	-0.85409200	0.09765700

C	0.68243000	0.18718800	0.09350400
H	0.37086200	2.14908500	-0.44989300
H	-0.31658800	-1.42568900	0.93738300
C	3.54213900	-0.44251100	-0.09644900
H	3.55345400	-1.53351500	-0.25335700
H	4.10487600	-0.26032300	0.82549600
H	4.08854500	-0.01328000	-0.94292900
H	-2.11328000	1.93536600	-0.18211400
N	-2.71820400	-0.97322600	-0.01386500
H	-3.57606500	-0.44442100	-0.09741400
H	-2.69439700	-1.72933900	-0.68991600

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		52.9004			86.2619			106.5097		
Red. masses --		3.2179			1.4841			2.6957		
Frc consts --		0.0053			0.0065			0.0180		
IR Inten --		4.0282			6.6655			2.1996		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.02	0.01	0.06	0.01	-0.03	0.18	0.00	0.09	-0.01
2	7	-0.05	0.04	0.09	0.02	-0.01	-0.06	-0.07	0.09	-0.04
3	6	0.01	-0.01	-0.12	0.01	0.00	-0.02	-0.07	0.01	0.05
4	6	0.03	-0.01	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.01
5	7	0.03	0.03	0.24	-0.02	-0.02	-0.02	0.08	0.07	-0.09
6	6	0.00	0.07	0.14	0.00	-0.03	0.01	0.01	0.14	-0.05
7	1	0.02	0.08	0.17	0.02	-0.07	-0.13	-0.14	0.10	-0.06
8	1	-0.06	0.23	0.38	-0.02	-0.05	-0.05	0.15	0.01	-0.13
9	6	-0.06	-0.08	-0.18	0.02	0.05	-0.03	-0.07	-0.21	0.07
10	1	-0.16	-0.07	-0.32	0.06	0.14	-0.65	-0.33	-0.17	-0.25
11	1	0.10	-0.22	-0.25	0.08	-0.42	0.02	-0.12	-0.60	0.18
12	1	-0.17	-0.03	-0.22	-0.05	0.52	0.16	0.13	-0.11	0.24
13	1	0.00	-0.03	-0.29	0.01	0.01	-0.01	-0.13	-0.04	0.13
14	7	0.05	-0.04	-0.13	-0.02	0.02	0.03	0.09	-0.10	0.05

15	1	0.05	-0.08	-0.31	-0.01	0.04	0.04	0.04	-0.17	0.10
16	1	0.18	-0.11	-0.04	-0.05	0.01	0.04	0.12	-0.08	0.03
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		155.4378			245.5835			308.8026		
Red. masses --		2.0893			2.0305			1.4894		
Frc consts --		0.0297			0.0722			0.0837		
IR Inten --		5.5786			25.3260			24.9721		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.02	0.00	0.28	0.01	0.04	0.01	0.02	0.04	-0.01
2	7	-0.01	0.03	-0.05	-0.05	-0.02	0.11	0.00	0.01	-0.08
3	6	-0.02	0.01	0.04	0.02	-0.03	-0.17	-0.01	-0.03	0.06
4	6	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.03	-0.13	0.00	-0.03	0.08
5	7	0.01	0.01	-0.10	0.03	-0.01	-0.06	0.02	0.00	0.08
6	6	0.00	0.03	0.02	0.01	0.02	0.04	0.01	0.01	0.00
7	1	-0.05	-0.03	-0.14	0.07	0.14	0.36	-0.08	-0.05	-0.18
8	1	0.02	-0.09	-0.18	-0.03	-0.05	-0.08	0.07	-0.03	0.06
9	6	-0.01	-0.03	-0.08	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
10	1	-0.10	-0.10	0.37	-0.07	-0.01	0.00	-0.05	-0.01	-0.01
11	1	0.29	0.29	-0.33	0.02	-0.03	-0.01	0.03	-0.05	0.00
12	1	-0.26	-0.37	-0.42	0.00	-0.04	-0.01	0.04	-0.04	0.00
13	1	-0.04	-0.01	0.10	0.01	-0.05	-0.22	-0.02	-0.05	-0.04
14	7	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.11	-0.03	-0.01	-0.10
15	1	0.01	-0.03	0.05	0.00	0.12	0.68	0.00	0.14	0.48
16	1	0.01	0.01	-0.03	-0.40	0.19	-0.09	-0.30	0.44	-0.61

0 3 -346.227229

B	-2.19670800	0.45796600	-0.00785700
N	0.15985500	1.50586400	0.01106500
C	1.48962500	1.09255500	0.00870800
C	1.48137800	-0.26694100	-0.00127100
N	0.15801100	-0.67118000	0.03071100
C	-0.71617700	0.42990600	0.01275900

H	-0.16824700	2.45607000	-0.02472700
H	-0.14317000	-1.60925600	-0.17599800
C	-3.26472600	-0.69264300	-0.00885700
H	-2.83143500	-1.70457300	0.05356900
H	-3.88388100	-0.67103300	-0.91423300
H	-3.96126100	-0.60018500	0.83325200
H	2.31560700	1.78132200	0.03750000
N	2.50306400	-1.21875800	-0.08361200
H	3.40697700	-0.80819400	-0.27499000
H	2.56184100	-1.82272200	0.72974300

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		43.4534			108.8458			112.9489		
Red. masses --		1.0216			3.4931			3.0177		
Frc consts --		0.0011			0.0244			0.0227		
IR Inten --		0.2082			6.9134			2.3421		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.02	0.00	0.03	0.03	-0.02	0.06	-0.01
2	7	0.00	0.00	0.01	0.02	0.04	0.06	0.04	0.07	-0.02
3	6	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.16	0.02	-0.01	0.06
4	6	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.00	-0.02	-0.06	-0.01	0.00
5	7	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.04	0.26	-0.08	0.08	-0.11
6	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.06	0.18	-0.01	0.12	-0.07
7	1	0.00	0.00	0.04	0.04	0.03	-0.30	0.11	0.10	0.12
8	1	0.00	0.00	-0.03	-0.09	0.04	0.33	-0.14	0.10	-0.12
9	6	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.08	-0.18	0.22	-0.17	0.07
10	1	-0.02	0.03	0.57	0.20	-0.04	-0.25	0.46	-0.06	0.09
11	1	0.39	-0.34	-0.27	0.21	-0.04	-0.25	0.17	-0.35	0.10
12	1	-0.36	0.31	-0.33	0.00	-0.24	-0.25	0.24	-0.30	0.10
13	1	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.02	-0.34	0.06	-0.06	0.14
14	7	0.00	0.00	-0.02	-0.08	-0.05	-0.09	-0.13	-0.08	0.03
15	1	0.00	0.00	-0.02	-0.10	-0.11	-0.32	-0.07	-0.14	0.19

16	1	0.00	-0.01	-0.03	0.06	0.06	-0.02	-0.29	-0.17	-0.02
			4			5			6	
			A			A			A	
Frequencies --		191.3674			206.1075			270.0950		
Red. masses --		1.2695			2.6525			4.1157		
Frc consts --		0.0274			0.0664			0.1769		
IR Inten --		29.8764			6.5815			6.4279		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	-0.01	-0.08	0.00	-0.01	0.32	0.01	-0.03	-0.12
2	7	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.01	0.01	0.33
3	6	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.09	0.00	0.03	-0.20
4	6	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.06	0.01	0.03	-0.23
5	7	0.01	-0.01	0.09	0.01	0.01	-0.11	0.03	0.01	-0.11
6	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.04	0.01	-0.01	0.05
7	1	-0.01	-0.01	-0.04	-0.01	0.00	0.04	-0.03	-0.02	-0.55
8	1	0.01	0.02	-0.06	-0.02	-0.03	0.12	0.03	0.03	-0.20
9	6	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.08	-0.02	0.00	0.04
10	1	-0.02	0.00	0.05	-0.04	-0.02	-0.26	-0.05	-0.01	0.14
11	1	-0.05	-0.03	0.05	0.19	0.24	-0.22	-0.10	-0.10	0.09
12	1	0.04	0.07	0.05	-0.20	-0.21	-0.22	0.06	0.14	0.09
13	1	0.00	0.01	-0.04	0.00	0.01	-0.10	-0.01	0.03	-0.07
14	7	0.01	0.03	-0.07	0.02	0.01	0.10	-0.02	-0.04	0.15
15	1	0.11	0.12	0.61	0.10	0.04	0.57	0.06	-0.13	0.31
16	1	-0.41	-0.46	-0.41	-0.33	-0.18	-0.02	-0.26	0.15	0.32

28 bch3-CAAC

0 1 -589.202048

B	-0.54359400	1.87046100	0.10383100
N	1.49448600	0.56342000	-0.57302100
C	2.11547300	-0.59475200	0.12280200
C	0.93612900	-1.59467000	0.11480900
C	-0.38766800	-0.76933800	0.02334700
C	0.14067800	0.66757200	-0.14225900

C	3.31288000	-1.12584600	-0.67420100
C	2.23491900	1.80376200	-0.66705400
C	2.54826700	-0.25221100	1.56332200
C	-1.26795300	-0.96251600	1.27743400
C	-2.62659200	-0.26107500	1.17213700
C	-3.40261400	-0.71145900	-0.07202000
C	-2.56367100	-0.53190000	-1.34424000
C	-1.19682500	-1.21452500	-1.22434800
H	0.95222000	-2.23268800	1.00217500
H	1.02012600	-2.24923500	-0.75669300
H	3.66886200	-2.06520300	-0.24119300
H	4.15364700	-0.42621000	-0.66337000
H	3.02851700	-1.30814400	-1.71337000
H	1.75223600	2.44910700	-1.40868700
H	3.25506400	1.61768700	-1.00638100
H	2.28069700	2.35745600	0.28869500
H	1.71658600	0.17372000	2.13004600
H	2.89417700	-1.15035900	2.08308900
H	3.36916500	0.47083900	1.57027900
H	-1.44102300	-2.03904700	1.40998100
H	-0.72829800	-0.61435500	2.16274600
H	-3.21333900	-0.44618500	2.07824500
H	-2.47403700	0.82823300	1.13873500
H	-4.34533400	-0.16011900	-0.15392100
H	-3.66967900	-1.77063400	0.03989000
H	-3.10128600	-0.92677600	-2.21279000
H	-2.41183300	0.53785700	-1.53487600
H	-0.59772100	-1.02460900	-2.12015000
H	-1.34401300	-2.30226500	-1.16415500
C	-1.24025700	3.23528000	0.18435200
H	-0.47160400	3.97582000	-0.08586500
H	-1.59773000	3.51276500	1.18037700
H	-2.05542200	3.36617000	-0.53530400

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		33.4376			75.1098			100.6874		
Red. masses --		3.0897			3.0170			2.7061		
Frc consts --		0.0020			0.0100			0.0162		
IR Inten --		0.0729			1.0933			0.2642		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.02	0.00	0.11	-0.05	-0.01	0.00	-0.03	-0.06	0.03
2	7	-0.04	-0.02	-0.02	0.01	0.03	0.08	0.01	-0.03	-0.03
3	6	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.01
4	6	-0.01	0.01	0.16	0.00	0.00	0.07	0.02	-0.02	-0.01
5	6	-0.01	0.00	0.07	0.01	0.01	0.04	0.02	-0.03	0.00
6	6	-0.01	0.00	0.06	0.01	0.01	0.06	0.02	-0.02	0.00
7	6	-0.07	-0.04	-0.07	-0.07	-0.03	-0.15	0.05	-0.01	0.06
8	6	-0.04	-0.03	-0.12	0.01	0.03	0.16	0.00	-0.04	-0.11
9	6	0.12	0.09	-0.06	0.17	-0.09	-0.04	-0.04	0.03	0.01
10	6	-0.08	0.02	0.01	-0.02	0.01	0.02	0.02	-0.03	-0.01
11	6	-0.08	0.01	-0.08	-0.01	0.02	0.00	0.06	0.06	0.01
12	6	0.00	-0.01	-0.13	0.01	0.04	-0.02	0.04	0.17	-0.01
13	6	0.08	-0.03	-0.08	0.04	0.04	0.00	0.06	0.11	-0.01
14	6	0.07	-0.03	0.02	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
15	1	0.01	0.16	0.27	0.00	0.06	0.11	0.02	-0.04	-0.02
16	1	-0.03	-0.13	0.27	-0.04	-0.06	0.11	0.03	-0.01	-0.02
17	1	-0.03	-0.01	-0.04	-0.03	-0.04	-0.21	0.03	0.00	0.09
18	1	-0.07	-0.04	-0.19	-0.06	-0.04	-0.24	0.04	-0.01	0.09
19	1	-0.16	-0.12	-0.03	-0.19	-0.01	-0.12	0.09	-0.03	0.05
20	1	-0.09	-0.06	-0.12	0.04	0.06	0.16	-0.03	-0.07	-0.11
21	1	-0.06	-0.04	-0.17	0.02	0.05	0.19	-0.01	-0.05	-0.14
22	1	0.02	0.01	-0.14	-0.03	-0.01	0.18	0.04	0.00	-0.13
23	1	0.17	0.13	-0.02	0.24	-0.08	0.05	-0.07	0.02	-0.02
24	1	0.15	0.12	-0.03	0.18	-0.12	-0.10	-0.03	0.05	0.04
25	1	0.13	0.09	-0.16	0.20	-0.12	-0.09	-0.06	0.05	0.02

26	1	-0.09	0.02	0.02	-0.03	0.01	0.01	-0.04	-0.02	-0.04
27	1	-0.13	0.03	0.04	-0.04	0.00	0.04	0.04	-0.09	0.01
28	1	-0.14	0.02	-0.12	-0.04	0.01	-0.02	0.04	0.06	0.00
29	1	-0.08	0.01	-0.09	0.00	0.02	0.02	0.13	0.05	0.07
30	1	0.01	-0.01	-0.19	0.02	0.06	-0.04	0.09	0.27	-0.01
31	1	0.00	-0.01	-0.12	-0.01	0.05	-0.04	-0.08	0.20	-0.04
32	1	0.13	-0.05	-0.10	0.06	0.05	-0.02	0.03	0.15	-0.01
33	1	0.09	-0.03	-0.09	0.06	0.04	0.00	0.14	0.10	-0.01
34	1	0.13	-0.04	0.06	0.05	0.02	0.04	0.02	-0.03	0.00
35	1	0.07	-0.02	0.03	0.01	0.02	0.02	-0.06	0.02	0.00
36	6	0.04	0.01	0.17	-0.15	-0.05	-0.18	-0.20	-0.15	0.06
37	1	0.04	0.00	0.13	-0.20	-0.01	-0.22	-0.38	-0.05	-0.18
38	1	0.11	0.00	0.19	-0.23	0.03	-0.23	-0.06	-0.11	0.10
39	1	0.00	0.03	0.22	-0.12	-0.19	-0.24	-0.36	-0.35	0.20

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	118.2862	123.9870	130.3537
Red. masses --	2.7737	2.6006	1.1152
Frc consts --	0.0229	0.0236	0.0112
IR Inten --	0.2736	3.1822	0.3496

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

13	6	-0.04	0.05	0.03	-0.04	-0.12	-0.02	0.02	0.04	0.01
14	6	0.02	0.15	-0.03	-0.02	-0.07	0.01	0.00	0.01	0.00
15	1	-0.06	0.04	0.01	-0.03	0.03	0.00	0.01	0.00	0.01
16	1	-0.06	0.04	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01
17	1	-0.09	-0.12	0.05	-0.02	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.01
18	1	0.04	-0.16	0.06	0.01	-0.07	-0.03	0.00	0.00	0.01
19	1	0.00	-0.07	0.03	-0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.01
20	1	0.13	-0.05	-0.09	0.13	0.06	0.10	-0.04	-0.02	-0.03
21	1	0.10	-0.14	-0.15	0.10	0.02	0.16	-0.02	-0.02	-0.10
22	1	0.23	-0.01	-0.12	0.01	-0.05	0.13	0.05	0.00	-0.06
23	1	0.02	0.03	0.00	0.04	0.03	-0.02	0.00	0.01	0.00
24	1	-0.02	-0.02	0.03	-0.04	-0.03	0.00	0.02	0.02	0.01
25	1	0.04	-0.04	0.00	0.06	-0.07	-0.01	0.00	0.02	-0.01
26	1	0.11	0.03	0.02	0.02	0.16	0.10	0.00	-0.02	-0.01
27	1	-0.03	0.11	0.00	0.03	0.22	-0.05	0.00	-0.04	0.01
28	1	-0.06	-0.23	0.02	0.04	0.23	-0.02	0.00	-0.04	0.01
29	1	-0.23	-0.09	0.06	0.00	0.13	-0.18	0.01	-0.02	0.05
30	1	-0.11	-0.30	0.04	-0.02	-0.05	-0.02	0.02	0.04	0.00
31	1	0.14	-0.21	-0.07	0.02	-0.01	0.14	-0.01	0.03	-0.03
32	1	0.01	0.10	-0.02	-0.05	-0.23	0.03	0.02	0.08	-0.01
33	1	-0.13	0.09	0.15	-0.09	-0.14	-0.14	0.04	0.05	0.04
34	1	0.01	0.26	-0.01	-0.04	-0.12	-0.02	0.01	0.02	0.01
35	1	0.08	0.13	-0.12	0.02	-0.07	0.10	-0.01	0.02	-0.01
36	6	-0.11	-0.01	0.00	-0.10	-0.06	0.15	-0.03	-0.01	-0.01
37	1	-0.23	0.08	-0.07	-0.13	0.06	0.40	0.15	0.02	0.59
38	1	-0.08	-0.04	0.02	-0.19	-0.33	0.19	-0.47	-0.27	-0.10
39	1	-0.18	-0.14	0.05	-0.06	0.06	0.12	0.31	0.23	-0.35

0 3 -589.168306

B	0.51119800	2.18280200	0.05841700
N	-1.55010900	0.78478400	0.11513300
C	-2.15824800	-0.54930100	-0.09026100
C	-0.96255600	-1.34183800	-0.64820100

C	0.33166700	-0.58554400	-0.24658900
C	-0.18193500	0.85941700	-0.03181000
C	-2.68888500	-1.12429600	1.23893300
C	-2.39440100	1.93335500	0.39439400
C	-3.30724300	-0.48085800	-1.11102400
C	1.36790400	-0.76474300	-1.38734600
C	2.81458500	-0.36803700	-1.06568700
C	3.30665500	-0.98992300	0.24747400
C	2.33903400	-0.69056500	1.39842900
C	0.92160000	-1.17339800	1.06981700
H	-1.03272900	-1.36536200	-1.73982300
H	-0.96092700	-2.37775300	-0.30050700
H	-3.10439600	-2.12200700	1.07190100
H	-3.48603400	-0.50128200	1.65291300
H	-1.89695600	-1.20448100	1.98445100
H	-1.76476900	2.74024000	0.76974200
H	-3.14958100	1.67605600	1.14192200
H	-2.90232300	2.28698800	-0.50964800
H	-2.97858800	0.00018500	-2.03569000
H	-3.64091400	-1.49354400	-1.35395600
H	-4.16950400	0.06677800	-0.72216700
H	1.36031800	-1.83171300	-1.65042300
H	1.01726700	-0.22743400	-2.27474700
H	3.45911300	-0.68215400	-1.89416700
H	2.90026700	0.71773300	-1.00719000
H	4.31010200	-0.62186000	0.48524700
H	3.39425200	-2.07839700	0.12755900
H	2.68154400	-1.17926000	2.31692300
H	2.32576800	0.38410400	1.60590600
H	0.25297900	-0.95775300	1.90754700
H	0.94755600	-2.26641600	0.96181400
C	1.92219900	2.85558300	-0.01481600
H	1.91460700	3.85408500	0.43486100

H	2.22315900	3.00138600	-1.06206300
H	2.73230800	2.29525500	0.47169600

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		34.6074			75.4385			90.7644		
Red. masses --		2.7392			1.5458			1.8053		
Frc consts --		0.0019			0.0052			0.0088		
IR Inten --		0.3405			0.1806			0.3159		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.02	0.03	-0.09	0.00	-0.02	0.01	0.04	-0.05	0.00
2	7	0.02	-0.02	0.11	0.01	-0.02	0.05	0.01	-0.01	0.01
3	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02
4	6	0.01	0.03	-0.05	-0.01	-0.04	0.07	-0.02	-0.04	0.03
5	6	0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.03	0.03	-0.01	-0.04	0.00
6	6	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.03	0.02	0.02	-0.03	-0.01
7	6	-0.02	-0.11	-0.06	-0.09	0.01	-0.02	-0.09	0.01	-0.04
8	6	0.02	-0.04	0.18	0.02	0.01	-0.03	0.04	-0.02	0.11
9	6	0.03	0.10	-0.02	0.05	0.04	-0.06	0.03	0.04	-0.07
10	6	0.04	0.01	0.01	-0.03	-0.04	0.00	-0.02	-0.07	0.00
11	6	0.04	-0.03	0.05	-0.04	0.02	-0.04	-0.03	0.01	-0.03
12	6	-0.01	-0.03	0.07	0.02	0.06	-0.04	0.01	0.12	0.01
13	6	-0.04	0.01	0.04	0.04	0.03	-0.02	-0.02	0.08	0.00
14	6	-0.04	0.01	0.00	0.04	-0.01	0.02	0.01	-0.01	0.00
15	1	0.01	0.09	-0.05	0.00	-0.12	0.07	-0.01	-0.10	0.03
16	1	0.02	0.01	-0.11	-0.02	-0.02	0.14	-0.03	-0.02	0.09
17	1	-0.04	-0.08	-0.16	-0.12	0.03	-0.04	-0.08	0.01	-0.06
18	1	-0.01	-0.13	-0.02	-0.08	0.04	-0.04	-0.11	0.01	-0.09
19	1	-0.03	-0.19	-0.06	-0.12	-0.02	0.01	-0.13	0.01	0.00
20	1	-0.02	-0.12	0.42	-0.06	-0.13	0.41	0.15	0.08	-0.27
21	1	-0.10	-0.15	0.02	-0.30	-0.10	-0.40	0.34	0.08	0.45
22	1	0.17	0.15	0.17	0.42	0.27	-0.15	-0.31	-0.22	0.24
23	1	0.05	0.17	0.03	0.13	0.02	-0.04	0.08	0.05	-0.04

24	1	0.01	0.12	-0.11	0.01	0.06	-0.06	0.03	0.05	-0.10
25	1	0.03	0.08	0.01	0.05	0.09	-0.11	0.03	0.05	-0.09
26	1	0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.05	0.03	0.02	-0.09	0.06
27	1	0.07	0.03	0.01	-0.07	-0.07	0.00	-0.04	-0.13	-0.03
28	1	0.05	-0.05	0.07	-0.05	0.02	-0.05	-0.02	-0.02	-0.01
29	1	0.06	-0.03	0.05	-0.07	0.02	-0.07	-0.08	0.02	-0.11
30	1	-0.01	-0.04	0.10	0.01	0.10	-0.07	-0.03	0.21	0.00
31	1	-0.03	-0.03	0.09	0.06	0.06	-0.03	0.10	0.12	0.06
32	1	-0.08	0.02	0.06	0.08	0.05	-0.03	0.01	0.12	0.01
33	1	-0.04	0.01	0.01	0.01	0.03	-0.03	-0.09	0.08	-0.02
34	1	-0.06	0.02	-0.02	0.05	-0.03	0.03	-0.01	-0.05	0.00
35	1	-0.04	0.01	0.01	0.07	-0.01	0.02	0.07	-0.01	0.00
36	6	-0.03	0.03	-0.22	-0.01	0.00	0.03	0.03	-0.02	-0.01
37	1	-0.03	0.11	-0.40	-0.01	-0.03	0.09	0.03	-0.06	0.08
38	1	-0.01	-0.17	-0.24	-0.04	0.08	0.03	-0.03	0.07	-0.01
39	1	-0.04	0.11	-0.10	0.02	-0.02	-0.03	0.07	-0.05	-0.10

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 104.6056 129.4862 148.7046

Red. masses -- 2.5879 1.3336 2.2627

Frc consts -- 0.0167 0.0132 0.0295

IR Inten -- 0.3835 0.2025 1.0983

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

11	6	-0.02	0.04	0.02	0.02	-0.09	-0.01	0.02	-0.06	-0.05
12	6	-0.02	0.16	0.08	-0.01	-0.05	0.02	-0.01	0.02	0.00
13	6	-0.12	0.05	0.03	-0.01	0.05	-0.01	0.00	0.13	-0.02
14	6	-0.05	-0.08	-0.07	-0.02	0.06	0.01	-0.01	0.13	0.02
15	1	-0.07	0.10	-0.09	0.01	0.03	-0.02	0.01	0.00	-0.01
16	1	-0.05	-0.02	-0.17	0.02	0.01	-0.04	0.04	0.02	0.00
17	1	0.07	0.00	0.07	0.04	-0.02	-0.01	0.06	-0.05	-0.02
18	1	0.15	0.00	0.12	0.03	-0.03	0.01	0.00	-0.07	-0.01
19	1	0.16	-0.03	-0.02	0.04	-0.03	-0.02	0.02	-0.01	-0.02
20	1	0.04	-0.07	0.19	-0.02	-0.04	0.12	-0.07	-0.07	0.21
21	1	-0.08	-0.04	-0.19	-0.03	-0.07	0.00	-0.09	-0.12	-0.02
22	1	0.24	0.17	-0.07	0.03	0.06	0.05	0.01	0.09	0.08
23	1	-0.16	0.01	0.08	-0.02	0.00	0.01	-0.02	-0.04	-0.01
24	1	-0.13	0.03	0.15	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.04	0.00
25	1	-0.04	0.04	0.19	0.00	-0.01	0.02	-0.02	-0.04	-0.01
26	1	0.08	-0.08	0.04	-0.03	-0.04	0.02	-0.05	0.00	0.00
27	1	0.03	-0.13	-0.06	0.03	-0.05	-0.02	0.01	-0.01	-0.03
28	1	0.04	0.04	0.07	0.01	-0.15	0.00	-0.01	-0.17	-0.03
29	1	-0.10	0.05	-0.05	0.07	-0.08	-0.07	0.09	-0.06	-0.14
30	1	-0.08	0.32	0.13	0.00	-0.08	0.01	0.00	-0.01	-0.03
31	1	0.15	0.17	0.12	-0.06	-0.06	0.07	-0.06	0.00	0.08
32	1	-0.12	0.06	0.04	-0.03	0.09	0.03	-0.01	0.20	0.01
33	1	-0.25	0.04	0.05	0.02	0.06	-0.07	0.02	0.15	-0.10
34	1	-0.11	-0.19	-0.09	-0.01	0.12	0.00	0.00	0.22	0.01
35	1	0.05	-0.07	-0.13	-0.04	0.05	0.07	-0.03	0.12	0.11
36	6	0.04	-0.03	0.03	-0.02	0.04	0.04	0.10	-0.18	0.09
37	1	0.02	-0.05	0.08	0.05	-0.16	0.50	0.16	-0.08	-0.12
38	1	0.06	0.03	0.05	-0.25	0.54	0.04	0.33	-0.45	0.12
39	1	0.04	-0.04	0.02	0.10	-0.16	-0.40	-0.08	-0.19	0.37

28 bch3-DAC

0 1 -636.712139

C 0.89018200 -1.28512300 -0.18569900

N	-0.48098000	-1.19449200	-0.25064100
C	-1.19047300	0.01013700	-0.03585200
N	-0.46449800	1.20618500	-0.24667300
C	0.90690300	1.27976000	-0.18381800
C	1.63358300	-0.00773100	0.22716200
O	1.47819200	-2.33477500	-0.39486500
O	1.50795000	2.32221900	-0.39283500
C	3.04818300	-0.01651600	-0.36888300
C	1.71181600	-0.00958900	1.78089100
C	-1.24483400	2.42142300	-0.44087800
C	-1.27408200	-2.40115700	-0.44376000
B	-2.57047300	0.02682700	0.29964700
H	3.01552500	-0.01609200	-1.46049300
H	3.58843100	0.87251300	-0.04522700
H	3.57760400	-0.91211600	-0.04548400
H	2.24531200	-0.90099500	2.11747600
H	2.25615400	0.87467100	2.11897600
H	0.71977100	-0.00383100	2.24030200
H	-1.91977600	2.57734700	0.41158800
H	-0.55944600	3.26339800	-0.50344400
H	-1.83217900	2.35376500	-1.36065600
H	-0.59561700	-3.24494600	-0.54419500
H	-1.92350700	-2.57117700	0.42543100
H	-1.88828300	-2.31050700	-1.34392100
C	-4.08755100	0.01094000	0.45915100
H	-4.45016500	0.24944000	1.46258000
H	-4.41962600	-1.01325500	0.23106900
H	-4.59499100	0.65338000	-0.26931200

1	2	3
A	A	A

Frequencies --	28.3714	60.3077	72.5500
Red. masses --	3.4640	1.0860	4.2624

Frc consts -- 0.0016 0.0023 0.0132
 IR Inten -- 1.8995 0.6209 4.6049

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	0.04	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.07
2	7	-0.01	0.00	0.06	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.12
3	6	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.09
4	7	-0.01	0.00	0.06	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.11
5	6	-0.01	0.01	0.04	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.02	0.05
6	6	0.03	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
7	8	-0.02	-0.03	0.09	-0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.05	0.24
8	8	-0.02	0.03	0.09	0.01	0.01	0.03	-0.02	0.04	0.20
9	6	-0.04	0.00	-0.20	0.00	-0.01	-0.01	-0.06	0.00	-0.11
10	6	0.20	0.00	-0.05	0.01	-0.01	0.00	0.11	0.01	-0.01
11	6	-0.01	0.01	0.12	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.14
12	6	-0.01	-0.01	0.12	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.17
13	5	-0.04	0.00	-0.11	-0.01	0.02	-0.03	0.02	-0.01	0.00
14	1	-0.16	0.00	-0.20	-0.01	-0.01	-0.01	-0.14	-0.01	-0.11
15	1	0.00	0.00	-0.26	0.00	-0.01	-0.01	-0.03	0.00	-0.16
16	1	0.00	0.00	-0.26	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	0.00	-0.15
17	1	0.23	0.00	-0.11	0.00	-0.01	0.00	0.13	0.01	-0.04
18	1	0.23	0.00	-0.11	0.01	-0.01	0.00	0.13	0.02	-0.06
19	1	0.25	0.00	0.06	0.01	0.00	0.00	0.14	0.01	0.07
20	1	-0.05	-0.07	0.10	0.02	0.02	0.00	0.06	0.09	-0.11
21	1	-0.02	0.02	0.21	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.02	-0.26
22	1	0.03	0.07	0.09	0.00	0.01	0.00	-0.08	-0.08	-0.09
23	1	-0.02	-0.02	0.20	0.00	0.02	-0.10	0.01	0.02	-0.26
24	1	-0.04	0.07	0.11	0.06	-0.05	0.02	0.04	-0.08	-0.16
25	1	0.02	-0.07	0.09	-0.07	0.05	0.03	-0.04	0.08	-0.14
26	6	-0.06	0.00	-0.23	0.00	-0.03	0.02	0.03	0.00	0.16
27	1	-0.14	0.04	-0.27	0.04	0.41	-0.07	0.15	-0.22	0.26
28	1	-0.03	-0.01	-0.21	0.17	-0.22	0.61	-0.07	0.09	-0.09
29	1	-0.01	-0.04	-0.30	-0.16	-0.50	-0.27	0.01	0.23	0.38

		A			A			A		
Frequencies --		77.7790			110.0878			131.8474		
Red. masses --		4.2941			2.9864			2.7664		
Frc consts --		0.0153			0.0213			0.0283		
IR Inten --		0.2000			0.1136			1.2075		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.01	-0.07	-0.04	0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.05
2	7	0.00	-0.04	0.08	-0.03	0.06	0.01	-0.01	0.00	0.11
3	6	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.09	0.00	-0.01	0.00	0.13
4	7	-0.01	-0.04	-0.10	0.03	0.06	-0.01	-0.01	0.00	0.12
5	6	-0.02	0.01	0.08	0.03	0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.05
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.06
7	8	0.03	0.04	-0.19	-0.07	0.01	-0.04	-0.01	0.03	-0.06
8	8	-0.03	0.05	0.23	0.07	0.01	0.04	-0.01	-0.03	-0.06
9	6	0.00	0.06	-0.01	0.00	-0.03	0.00	-0.02	0.00	-0.03
10	6	0.01	-0.11	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.12	0.00	0.05
11	6	-0.02	-0.06	-0.22	0.07	0.08	-0.11	0.00	-0.05	-0.17
12	6	0.01	-0.06	0.20	-0.07	0.08	0.11	0.00	0.04	-0.16
13	5	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.02	0.00	0.10
14	1	-0.01	0.14	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.09	0.00	-0.03
15	1	-0.02	0.05	0.05	0.03	-0.06	0.02	0.00	0.00	-0.06
16	1	0.01	0.05	-0.07	-0.03	-0.06	-0.03	0.00	0.00	-0.07
17	1	0.02	-0.13	-0.06	-0.02	-0.06	-0.02	0.15	0.00	0.01
18	1	0.00	-0.13	0.06	0.03	-0.06	0.02	0.14	-0.01	0.01
19	1	0.01	-0.15	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.15	-0.01	0.12
20	1	0.03	0.07	-0.21	0.03	0.14	-0.16	-0.27	-0.04	-0.38
21	1	-0.02	-0.08	-0.38	0.10	0.05	-0.12	-0.02	-0.02	0.00
22	1	-0.07	-0.21	-0.18	0.12	0.04	-0.14	0.27	-0.11	-0.35
23	1	0.02	-0.08	0.35	-0.10	0.06	0.07	0.00	0.04	-0.13
24	1	-0.02	0.07	0.20	0.00	0.11	0.17	-0.17	-0.04	-0.31
25	1	0.05	-0.20	0.16	-0.15	0.07	0.16	0.16	0.16	-0.27
26	6	0.00	0.14	0.02	0.00	-0.30	-0.01	-0.03	0.00	-0.03
27	1	0.03	0.25	0.00	-0.07	-0.57	0.03	-0.13	0.08	-0.09

28	1	-0.07	0.14	0.11	0.18	-0.30	-0.25	0.01	-0.02	0.03
29	1	0.04	0.11	-0.03	-0.09	-0.23	0.12	0.02	-0.07	-0.14

0 3 -636.679173

C	0.58763500	-1.34867100	-0.19244000
N	-0.74527300	-0.94735100	-0.26012600
C	-1.19337700	0.36748400	-0.07679200
N	-0.21201400	1.35860000	-0.18123700
C	1.15513200	1.11376400	-0.17758600
C	1.59766800	-0.28745100	0.22806300
O	0.91160200	-2.50348900	-0.39906800
O	1.94755800	2.00988000	-0.40439700
C	2.97492700	-0.60253600	-0.37153100
C	1.67560800	-0.31528800	1.78367100
C	-0.60208800	2.76894100	-0.34710800
C	-1.73069400	-2.00305800	-0.53873100
B	-2.62541600	0.74547300	0.21736100
H	2.94203500	-0.58784000	-1.46288500
H	3.69658200	0.14499000	-0.04389500
H	3.29753200	-1.59343400	-0.05383300
H	2.00018400	-1.30456900	2.11205400
H	2.40258700	0.42526800	2.12299500
H	0.71130100	-0.09315400	2.24731600
H	-1.67136800	2.84630200	-0.15935800
H	-0.04249700	3.38641200	0.35413600
H	-0.37097600	3.09760600	-1.36190600
H	-1.21917400	-2.80282100	-1.06766700
H	-2.14669900	-2.40757300	0.38594400
H	-2.52998900	-1.59994700	-1.15514300
C	-3.97702000	0.02261000	0.49992300
H	-3.88602100	-0.94016900	1.01920200
H	-4.50591400	-0.17380400	-0.44360100
H	-4.64952300	0.65073400	1.09228200

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		35.1098			58.2415			69.9408		
Red. masses --		3.1057			2.5184			2.3836		
Frc consts --		0.0023			0.0050			0.0069		
IR Inten --		0.5130			4.1675			1.8093		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.01	0.04	-0.02	-0.01	0.07	-0.01	0.00	-0.02
2	7	0.00	-0.01	0.05	0.00	0.02	-0.07	-0.01	-0.01	0.00
3	6	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.05	-0.01	0.00	-0.05
4	7	-0.01	-0.01	0.04	-0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.10
5	6	-0.01	0.01	0.03	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.05
6	6	0.03	0.00	-0.04	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
7	8	-0.01	-0.02	0.09	-0.05	-0.04	0.21	0.00	0.00	-0.03
8	8	-0.02	0.03	0.08	0.00	0.01	0.04	0.00	0.05	0.20
9	6	-0.03	0.02	-0.18	-0.04	-0.02	-0.08	-0.01	0.02	-0.03
10	6	0.18	-0.03	-0.05	0.09	0.03	-0.01	0.01	-0.06	-0.01
11	6	-0.01	0.00	0.09	0.00	0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.16
12	6	-0.01	-0.02	0.13	0.03	0.02	-0.18	-0.02	-0.02	0.05
13	5	-0.03	0.00	-0.09	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.02
14	1	-0.14	0.03	-0.18	-0.10	-0.04	-0.07	-0.03	0.05	-0.03
15	1	0.00	0.02	-0.24	-0.01	-0.02	-0.13	-0.02	0.02	-0.02
16	1	0.01	0.01	-0.23	-0.04	-0.02	-0.08	0.00	0.02	-0.06
17	1	0.22	-0.03	-0.10	0.10	0.04	-0.01	0.02	-0.07	-0.04
18	1	0.20	-0.03	-0.11	0.11	0.03	-0.06	0.01	-0.06	0.01
19	1	0.22	-0.05	0.05	0.11	0.05	0.05	0.01	-0.07	0.01
20	1	-0.02	-0.02	0.02	-0.01	0.01	-0.05	-0.08	-0.07	-0.62
21	1	-0.06	-0.03	0.16	-0.04	-0.01	0.07	-0.34	-0.02	0.14
22	1	0.06	0.06	0.12	0.06	0.06	0.04	0.46	0.07	-0.03
23	1	0.01	-0.11	0.29	-0.02	0.19	-0.48	-0.02	-0.04	0.08
24	1	-0.10	0.13	0.16	0.22	-0.28	-0.21	-0.01	0.02	0.07
25	1	0.05	-0.09	0.01	-0.11	0.13	0.08	-0.02	-0.04	0.03

26	6	-0.08	0.05	-0.21	0.03	-0.04	0.05	0.03	0.01	0.11
27	1	-0.16	0.09	-0.12	0.08	-0.18	-0.21	0.09	0.07	0.21
28	1	0.05	-0.03	-0.27	-0.14	0.22	0.09	-0.01	-0.12	0.16
29	1	-0.15	0.10	-0.35	0.15	-0.16	0.31	0.04	0.05	0.07
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		84.8193			99.2588			143.6268		
Red. masses --		1.2730			1.3870			1.2952		
Frc consts --		0.0054			0.0081			0.0157		
IR Inten --		0.5069			1.1460			1.3787		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01
2	7	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00
3	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.03
4	7	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01
5	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.05	-0.01	0.00	0.01
6	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
7	8	0.02	0.01	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.02
8	8	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.09	-0.02	0.00	-0.01
9	6	0.01	0.02	0.01	-0.01	0.01	-0.03	0.00	0.01	-0.01
10	6	-0.01	-0.02	0.00	0.04	-0.05	0.01	0.03	0.00	0.01
11	6	-0.01	-0.02	-0.03	-0.02	-0.01	-0.12	-0.02	-0.02	-0.04
12	6	0.02	-0.04	0.08	0.00	0.01	-0.01	-0.02	0.03	-0.09
13	5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	-0.03	0.05
14	1	0.02	0.03	0.01	-0.04	0.05	-0.03	-0.02	0.00	-0.01
15	1	0.01	0.02	0.03	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.03	-0.02
16	1	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.07	0.02	0.02	0.00
17	1	0.00	-0.02	-0.01	0.05	-0.06	-0.03	0.05	0.01	0.01
18	1	-0.02	-0.01	0.02	0.04	-0.06	0.01	0.03	0.01	0.00
19	1	-0.02	-0.03	-0.01	0.05	-0.07	0.04	0.04	0.00	0.03
20	1	-0.01	-0.02	-0.04	0.06	0.07	0.35	-0.03	-0.04	-0.09
21	1	-0.02	0.00	-0.03	0.34	0.10	-0.52	-0.07	0.01	-0.02
22	1	0.00	-0.03	-0.03	-0.51	-0.23	-0.30	0.03	-0.05	-0.03

23	1	-0.03	0.04	-0.08	0.00	0.01	-0.01	0.10	-0.16	0.31
24	1	0.20	-0.15	0.11	0.00	0.00	-0.01	-0.42	0.33	-0.14
25	1	-0.11	-0.02	0.26	0.00	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.50
26	6	-0.04	0.06	-0.04	0.01	0.00	0.01	-0.03	0.05	0.03
27	1	-0.13	-0.18	-0.47	0.02	0.02	0.04	-0.12	-0.06	-0.16
28	1	-0.24	0.58	-0.03	0.01	-0.04	0.02	-0.11	0.30	0.02
29	1	0.17	-0.06	0.34	0.00	0.01	0.00	0.08	0.02	0.19

30 bnh2

0 1 -80.743870

B		0.00000000	0.00000000	-0.96298000
N		0.00000000	0.00000000	0.41339600
H		0.00000000	0.85393500	0.96056400
H		0.00000000	-0.85393500	0.96056400

		1		2		3
		B1		B2		A1
Frequencies --		425.7672		623.0264		1253.6969
Red. masses --		1.2908		1.2755		2.9559
Frc consts --		0.1379		0.2917		2.7373
IR Inten --		193.4548		6.9198		45.0931

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.05	0.00	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	0.00	0.37
2	7	-0.14	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.00	-0.21
3	1	0.70	0.00	0.00	0.00	0.31	-0.63	0.00	0.23	-0.60
4	1	0.70	0.00	0.00	0.00	0.31	0.63	0.00	-0.23	-0.60

		4		5		6
		A1		A1		B2
Frequencies --		1568.9223		3523.3999		3628.3476
Red. masses --		1.4130		1.0496		1.0972
Frc consts --		2.0493		7.6773		8.5105
IR Inten --		206.6104		42.3013		85.7340

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

1	5	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	7	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.08	0.00
3	1	0.00	0.44	-0.54	0.00	0.60	0.38	0.00	-0.59	-0.39
4	1	0.00	-0.44	-0.54	0.00	-0.60	0.38	0.00	-0.59	0.39

0 3 -80.671278

B		0.00000000	0.00000000	-0.96327200
N		0.00000000	0.00000000	0.40936600
H		0.00000000	0.84319000	0.97539700
H		0.00000000	-0.84319000	0.97539700

		1			2			3		
		B1			B2			A1		
Frequencies --		629.8542			992.3256			1354.9546		
Red. masses --		1.2981			1.2761			6.2108		
Frc consts --		0.3034			0.7404			6.7181		
IR Inten --		185.3629			31.1001			28.4058		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.05	0.00	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	0.00	0.58
2	7	-0.14	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.00	-0.38
3	1	0.70	0.00	0.00	0.00	0.31	-0.63	0.00	0.09	-0.50
4	1	0.70	0.00	0.00	0.00	0.31	0.63	0.00	-0.09	-0.50
		4			5			6		
		A1			A1			B2		
Frequencies --		1617.6462			3453.5994			3492.6591		
Red. masses --		1.1382			1.0426			1.0994		
Frc consts --		1.7549			7.3266			7.9020		
IR Inten --		13.6522			2.3976			26.3946		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	7	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.08	0.00
3	1	0.00	0.41	-0.57	0.00	0.60	0.37	0.00	-0.58	-0.39
4	1	0.00	-0.41	-0.57	0.00	-0.60	0.37	0.00	-0.58	0.39

31 bnh2-nh3

0 1 -137.299208

B	-0.19291500	-0.77345300	-0.00002900
N	-1.23330000	0.16456200	0.00005800
H	-2.19570700	-0.13446900	-0.00008400
H	-1.13511900	1.18316900	-0.00013700
N	1.19163000	0.12115100	0.00002800
H	1.73093700	-0.17241000	0.81479000
H	1.12523900	1.16404100	-0.00046600
H	1.73090700	-0.17305900	-0.81455800

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		147.9751			389.8359			506.6018		
Red. masses --		1.1922			2.1782			1.1307		
Frc consts --		0.0154			0.1950			0.1710		
IR Inten --		13.5125			4.1235			61.5558		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.12	0.02	-0.15	0.00	0.00	0.00	-0.05
2	7	0.00	0.00	0.06	0.19	0.04	0.00	0.00	0.00	0.09
3	1	0.00	0.00	0.10	0.09	0.36	0.00	0.00	0.00	0.09
4	1	0.00	0.00	0.12	0.50	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.91
5	7	0.00	0.00	-0.01	-0.19	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01
6	1	-0.35	0.35	0.36	-0.07	0.25	0.01	-0.17	-0.16	0.05
7	1	0.00	0.00	-0.47	-0.61	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.21
8	1	0.35	-0.34	0.36	-0.07	0.25	-0.01	0.17	0.15	0.05
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		531.7714			574.8280			807.4497		
Red. masses --		5.1558			1.1383			1.2399		
Frc consts --		0.8590			0.2216			0.4763		
IR Inten --		30.4873			56.1338			21.0586		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.35	0.38	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00
2	7	0.05	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.03	0.06	0.00
3	1	0.17	-0.39	0.00	0.00	0.00	-0.92	0.06	-0.24	0.00
4	1	-0.30	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.36	0.10	0.00
5	7	-0.26	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.01	0.07	-0.09	0.00
6	1	-0.26	-0.25	-0.01	0.18	0.13	-0.06	0.26	0.34	0.03
7	1	-0.25	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.62	-0.15	0.00
8	1	-0.26	-0.25	0.01	-0.18	-0.13	-0.06	0.25	0.34	-0.03

0 3 -137.246844

B	-0.14025200	0.64706700	0.00035600
N	-1.33621500	-0.16429100	-0.00002600
H	-1.91787900	-0.21328700	0.82808900
H	-1.91730800	-0.21191900	-0.82865500
N	1.28767800	-0.11582500	-0.00003000
H	2.03248600	0.57859400	-0.00228400
H	1.42050500	-0.71527000	-0.82335900
H	1.42321700	-0.71263900	0.82481600

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	130.0101	307.1199	307.9271
Red. masses --	1.1744	1.0898	2.9063
Frc consts --	0.0117	0.0606	0.1624
IR Inten --	4.4114	4.5275	9.0047

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.11	0.00	0.01	0.08	0.01	0.25	-0.01
2	7	0.00	0.00	-0.06	0.01	-0.01	0.02	0.22	-0.11	0.00
3	1	-0.02	-0.16	-0.08	-0.37	0.52	-0.22	0.25	-0.23	0.02
4	1	0.02	0.16	-0.08	0.39	-0.53	-0.22	0.15	-0.10	0.04
5	7	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.03	-0.19	-0.03	0.00
6	1	0.00	0.00	-0.60	0.01	-0.02	-0.08	0.14	-0.38	0.01

7	1	-0.34	-0.35	0.20	-0.12	0.07	-0.08	-0.49	-0.11	0.02
8	1	0.34	0.35	0.20	0.07	-0.08	-0.08	-0.51	-0.10	0.00
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		493.6574			629.3161			834.6964		
Red. masses --		1.2720			4.5532			1.1871		
Frc consts --		0.1826			1.0624			0.4873		
IR Inten --		157.3937			2.6853			10.1080		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.05	0.03	0.00	-0.26	0.32	0.00	0.00	0.00	0.05
2	7	-0.03	0.12	0.00	-0.12	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.04
3	1	0.13	-0.68	0.05	-0.21	0.23	-0.03	-0.24	-0.14	-0.14
4	1	0.13	-0.68	-0.05	-0.21	0.23	0.04	0.24	0.14	-0.14
5	7	0.04	-0.03	0.00	0.31	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.10
6	1	0.07	-0.06	0.00	0.56	-0.37	0.00	0.00	0.00	0.15
7	1	0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.11	0.01	0.49	-0.33	0.20
8	1	0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.12	-0.01	-0.49	0.33	0.20

32 bnh2-nhc

0 1 -306.970298

B	1.69287800	-0.00027500	-0.52859000
N	2.88758800	0.00004200	0.17488200
H	2.95914100	0.00044500	1.18819500
H	3.78871300	-0.00004200	-0.27759100
C	0.28145900	-0.00024200	-0.06883000
C	-1.91361600	-0.67273000	0.02940900
C	-1.91332200	0.67314100	0.02935600
N	-0.57879900	1.09379700	0.05849900
H	-0.28930300	2.02217200	-0.19407000
H	-2.73381400	-1.36829000	0.06796000
H	-2.73320600	1.36908700	0.06768800
N	-0.57918700	-1.09398300	0.05901000
H	-0.29026000	-2.02200300	-0.19558500

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	101.0769	102.1732	278.8429
Red. masses --	4.2863	3.9630	4.1478
Frc consts --	0.0258	0.0244	0.1900
IR Inten --	89.8990	10.0709	53.0103

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.06	0.00	-0.16	0.00	-0.21	0.00	0.05	0.00	0.33
2	7	-0.14	0.00	0.21	0.00	0.29	0.00	0.24	0.00	-0.01
3	1	-0.44	0.00	0.23	0.00	0.51	0.00	0.58	0.00	-0.03
4	1	0.00	0.00	0.48	0.00	0.41	0.00	0.09	0.00	-0.31
5	6	0.01	0.00	-0.21	0.00	-0.19	0.00	-0.03	0.00	-0.08
6	6	0.03	0.00	0.20	-0.08	0.08	-0.02	-0.07	0.00	0.10
7	6	0.03	0.00	0.20	0.08	0.08	0.02	-0.07	0.00	0.10
8	7	0.03	-0.02	-0.17	0.13	-0.09	0.05	-0.07	0.02	-0.16
9	1	0.02	0.03	0.03	0.26	-0.10	0.15	-0.13	0.01	-0.24
10	1	0.04	-0.01	0.34	-0.17	0.18	-0.04	-0.07	0.01	0.24
11	1	0.04	0.01	0.34	0.17	0.18	0.04	-0.07	-0.01	0.24
12	7	0.03	0.02	-0.17	-0.13	-0.09	-0.05	-0.07	-0.02	-0.16
13	1	0.02	-0.04	0.02	-0.26	-0.10	-0.15	-0.13	-0.01	-0.25

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	329.7951	386.0578	423.6530
Red. masses --	1.6694	1.3527	1.8653
Frc consts --	0.1070	0.1188	0.1972
IR Inten --	108.6691	242.1326	18.2210

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.20	0.00	0.05	0.00	-0.04	0.00	-0.16	0.00
2	7	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
3	1	0.00	-0.48	0.00	0.09	-0.01	-0.01	0.00	0.37	0.00
4	1	0.00	0.32	0.00	0.04	0.00	-0.03	0.00	-0.10	0.00
5	6	0.00	-0.09	0.00	0.01	0.00	0.07	0.00	0.04	0.00

6	6	-0.04	0.02	0.02	-0.03	-0.01	0.01	0.03	-0.02	0.00
7	6	0.04	0.02	-0.02	-0.03	0.01	0.01	-0.03	-0.02	0.00
8	7	0.05	-0.03	0.03	-0.03	-0.05	-0.06	-0.01	0.06	0.13
9	1	0.05	-0.18	-0.52	0.06	0.11	0.67	-0.13	-0.09	-0.58
10	1	-0.07	0.06	0.05	-0.02	-0.02	-0.11	0.07	-0.07	0.03
11	1	0.07	0.06	-0.05	-0.02	0.03	-0.11	-0.07	-0.07	-0.03
12	7	-0.05	-0.04	-0.03	-0.04	0.05	-0.05	0.01	0.07	-0.13
13	1	-0.05	-0.18	0.50	0.06	-0.11	0.67	0.13	-0.09	0.60

0 3 -306.955675

B		-1.69707300	-0.64501800	-0.03666600
N		-2.86535200	0.16172500	-0.01572200
H		-2.88145200	1.13238100	0.27021900
H		-3.78708600	-0.24103800	-0.05248200
C		-0.26163600	-0.26216400	0.00255900
C		2.03168700	-0.41436600	-0.00959900
C		1.72730500	0.90293400	-0.01807900
N		0.33780700	1.01662900	0.04677300
H		-0.15729100	1.83890800	-0.25689900
H		2.99248400	-0.89967200	0.00237800
H		2.37715400	1.76130600	-0.01841700
N		0.84327900	-1.12179700	0.02826800
H		0.74727400	-2.12112200	-0.02598600

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		112.4070			132.1208			209.1994		
Red. masses --		3.3132			3.5892			1.4149		
Frc consts --		0.0247			0.0369			0.0365		
IR Inten --		20.7337			1.9272			17.8296		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.01	-0.04	-0.07	-0.01	-0.10	-0.02	0.01	0.02	-0.12
2	7	0.07	0.08	0.16	0.18	0.20	-0.08	-0.02	-0.03	0.00

3	1	0.20	-0.03	0.54	0.40	0.08	0.35	-0.11	-0.29	0.88
4	1	0.02	0.17	0.22	0.08	0.43	-0.19	0.01	-0.11	-0.19
5	6	0.00	-0.06	-0.20	0.00	-0.15	0.09	0.00	0.04	0.01
6	6	0.00	0.03	0.20	0.00	0.08	-0.09	-0.01	-0.02	-0.02
7	6	-0.04	0.02	0.11	-0.14	0.05	-0.07	0.03	-0.02	-0.05
8	7	-0.06	-0.03	-0.19	-0.14	-0.09	0.09	0.03	0.04	0.03
9	1	-0.04	-0.07	-0.33	-0.24	-0.19	-0.02	0.06	-0.02	-0.18
10	1	0.02	0.06	0.39	0.05	0.18	-0.17	-0.02	-0.05	-0.02
11	1	-0.07	0.04	0.20	-0.22	0.11	-0.12	0.06	-0.04	-0.08
12	7	0.02	-0.01	-0.10	0.07	-0.05	0.09	-0.03	0.01	0.09
13	1	0.07	-0.03	0.25	0.17	-0.05	-0.12	-0.06	0.02	-0.04
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		284.0108			320.6927			343.9005		
Red. masses --		2.4303			1.2851			1.2957		
Frc consts --		0.1155			0.0779			0.0903		
IR Inten --		153.8800			16.4872			49.4829		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.01	0.21	0.00	0.00	0.04	0.02	-0.02	-0.06
2	7	-0.02	0.03	-0.20	-0.02	0.02	-0.05	0.03	-0.01	-0.04
3	1	-0.09	-0.21	0.63	0.02	-0.03	0.13	0.18	0.01	-0.10
4	1	0.03	-0.15	0.29	0.01	-0.10	0.56	0.03	-0.08	0.78
5	6	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.02	-0.01
6	6	0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.01
7	6	0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.02
8	7	0.02	-0.02	-0.04	0.01	-0.02	-0.06	-0.02	0.05	0.11
9	1	-0.04	0.05	0.26	-0.03	0.08	0.28	0.08	-0.11	-0.51
10	1	0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.03	0.00
11	1	0.00	0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.11	0.03	-0.03	-0.05
12	7	0.00	0.01	-0.15	0.01	-0.01	0.09	-0.02	0.00	-0.01
13	1	0.00	-0.02	0.51	0.01	0.03	-0.73	-0.04	0.00	0.19

0 1 -329.033314

B	1.96375600	-0.00059700	-0.62622700
N	2.88072800	0.00021200	0.41564400
H	3.87555700	0.00017500	0.26029200
H	2.62409800	0.00066300	1.40173800
C	-0.16637600	1.18149100	-0.14558500
C	-1.52235900	1.19509500	0.08205300
C	-2.24405900	0.00036700	0.19252700
C	-1.52294800	-1.19469600	0.08238200
C	-0.16693600	-1.18179100	-0.14536900
N	0.54011300	-0.00039600	-0.28086200
H	-3.31497500	0.00064500	0.34311300
H	0.41099700	2.08575200	-0.27767000
H	-2.01657800	2.15530600	0.17049600
H	-2.01759000	-2.15466000	0.17111500
H	0.40989400	-2.08640300	-0.27746900

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		59.7014			119.3354			275.0516		
Red. masses --		3.7548			3.7988			3.4848		
Frc consts --		0.0079			0.0319			0.1553		
IR Inten --		10.5160			12.8149			50.1356		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.21	0.00	0.04	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.22
2	7	0.00	0.30	0.00	-0.19	0.00	0.18	0.25	0.00	0.02
3	1	0.00	0.38	0.00	-0.15	0.00	0.42	0.20	0.00	-0.27
4	1	0.00	0.59	0.00	-0.42	0.00	0.12	0.53	0.00	0.09
5	6	0.10	-0.09	0.08	0.01	0.00	-0.18	-0.08	0.01	-0.15
6	6	0.10	0.01	0.06	0.05	0.00	0.05	-0.06	-0.01	-0.05
7	6	0.00	0.07	0.00	0.08	0.00	0.22	-0.05	0.00	0.17
8	6	-0.10	0.01	-0.06	0.05	0.00	0.05	-0.06	0.01	-0.05
9	6	-0.10	-0.09	-0.08	0.01	0.00	-0.18	-0.08	-0.01	-0.15

10	7	0.00	-0.14	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.01	0.00	0.06
11	1	0.00	0.15	0.00	0.11	0.00	0.43	-0.03	0.00	0.35
12	1	0.18	-0.13	0.18	0.00	0.00	-0.27	-0.13	0.02	-0.29
13	1	0.17	0.05	0.11	0.06	0.00	0.10	-0.07	0.00	-0.14
14	1	-0.17	0.05	-0.11	0.06	0.00	0.10	-0.07	0.00	-0.14
15	1	-0.18	-0.13	-0.18	0.00	0.00	-0.27	-0.13	-0.02	-0.29

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	314.0101	413.9127	486.5328
Red. masses --	2.9274	2.8973	3.7685
Frc consts --	0.1701	0.2925	0.5256
IR Inten --	19.4051	4.3935	18.5569

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.32	0.00	0.00	0.11	0.00	-0.12	0.00	-0.05
2	7	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.00	-0.07
3	1	0.00	0.38	0.00	0.00	0.13	0.00	-0.14	0.00	-0.04
4	1	0.00	-0.63	0.00	0.00	-0.34	0.00	-0.18	0.00	-0.08
5	6	0.04	-0.10	-0.08	0.04	-0.03	0.18	0.04	0.04	0.01
6	6	0.09	0.01	0.05	-0.02	0.01	-0.21	0.04	0.05	-0.13
7	6	0.00	0.05	0.00	0.00	0.02	0.00	0.16	0.00	0.14
8	6	-0.09	0.01	-0.05	0.02	0.01	0.21	0.04	-0.05	-0.13
9	6	-0.04	-0.10	0.08	-0.04	-0.03	-0.18	0.04	-0.04	0.01
10	7	0.00	-0.13	0.00	0.00	-0.04	0.00	-0.03	0.00	0.31
11	1	0.00	0.12	0.00	0.00	0.02	0.00	0.16	0.00	0.13
12	1	0.08	-0.15	-0.25	0.10	-0.04	0.41	0.05	-0.01	-0.33
13	1	0.18	0.05	0.08	-0.03	0.02	-0.41	-0.08	0.02	-0.47
14	1	-0.18	0.05	-0.08	0.03	0.02	0.41	-0.08	-0.02	-0.47
15	1	-0.08	-0.15	0.25	-0.10	-0.04	-0.41	0.06	0.01	-0.33

0 3 -329.033170

B	1.90051200	-0.67503300	-0.00024600
N	3.00422100	0.18371900	0.00006200
H	2.96120000	1.19495000	0.00091600

H	3.94575200	-0.17202800	0.00008600
C	-0.48626400	-1.30517100	0.00006700
C	-1.81255900	-0.99508900	0.00008100
C	-2.25140800	0.35264800	-0.00000700
C	-1.25624000	1.35086500	-0.00000100
C	0.07215500	1.02971800	-0.00003000
N	0.51358600	-0.31296400	-0.00014900
H	-3.30272200	0.60390500	-0.00009500
H	-0.11536000	-2.32024600	0.00017200
H	-2.52750500	-1.80928000	0.00023200
H	-1.52757300	2.40054400	0.00003900
H	0.84489400	1.78420300	-0.00017100

1	2	3
A	A	A

Frequencies --	77.7401	196.7190	196.7483
Red. masses --	3.3096	2.6446	2.5330
Frc consts --	0.0118	0.0603	0.0578
IR Inten --	2.7534	6.5912	7.3547

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.06	0.02	-0.03	-0.19	0.02	-0.03	0.21
2	7	0.00	0.00	0.21	-0.12	0.15	0.03	-0.11	0.14	-0.03
3	1	0.00	0.00	0.56	-0.30	0.14	0.65	-0.27	0.13	-0.69
4	1	0.00	0.00	0.24	-0.05	0.32	-0.23	-0.05	0.29	0.24
5	6	0.00	0.00	-0.10	-0.05	-0.06	0.09	-0.04	-0.05	-0.10
6	6	0.00	0.00	0.10	-0.03	0.03	0.03	-0.03	0.03	-0.04
7	6	0.00	0.00	0.20	0.05	0.05	-0.08	0.04	0.05	0.09
8	6	0.00	0.00	-0.02	0.10	0.00	-0.02	0.09	0.00	0.02
9	6	0.00	0.00	-0.22	0.07	-0.09	0.06	0.07	-0.08	-0.06
10	7	0.00	0.00	-0.18	0.00	-0.11	0.01	0.00	-0.10	-0.01
11	1	0.00	0.00	0.39	0.06	0.11	-0.16	0.05	0.10	0.17
12	1	0.00	0.00	-0.17	-0.11	-0.08	0.17	-0.10	-0.07	-0.18
13	1	0.00	0.00	0.18	-0.08	0.07	0.09	-0.08	0.07	-0.09
14	1	0.00	0.00	-0.05	0.17	0.02	-0.03	0.15	0.01	0.03

15	1	0.00	0.00	-0.46	0.11	-0.13	0.06	0.10	-0.11	-0.06
			4			5			6	
			A			A			A	
Frequencies --		308.4859			404.4249			415.0029		
Red. masses --		2.1699			1.6033			4.7525		
Frc consts --		0.1217			0.1545			0.4822		
IR Inten --		0.1378			150.0056			0.6143		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.09	0.18	0.19	0.00
2	7	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.15	0.32	0.10	0.00
3	1	0.00	0.00	0.62	0.00	0.00	-0.57	0.60	0.12	0.00
4	1	0.00	0.00	-0.37	0.00	0.00	-0.73	0.23	-0.15	0.00
5	6	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.06	-0.15	-0.05	0.00
6	6	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.04	-0.17	0.08	0.00
7	6	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	0.04	-0.16	0.07	0.00
8	6	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.09	-0.03	-0.05	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.04	-0.06	-0.17	0.00
10	7	0.00	0.00	0.23	0.00	0.00	0.06	0.02	-0.13	0.00
11	1	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	0.06	-0.14	0.14	0.00
12	1	0.00	0.00	-0.23	0.00	0.00	-0.18	-0.30	-0.10	0.00
13	1	0.00	0.00	-0.33	0.00	0.00	0.03	-0.19	0.09	0.00
14	1	0.00	0.00	-0.26	0.00	0.00	-0.20	0.12	-0.01	0.00
15	1	0.00	0.00	-0.36	0.00	0.00	0.10	-0.06	-0.17	0.00

34 bph

0 1 -256.350963

B	0.00000000	0.00000000	-2.67317600
C	0.00000000	0.00000000	-1.13965900
C	0.00000000	1.21506400	-0.42662800
C	0.00000000	1.21322900	0.96369500
C	0.00000000	0.00000000	1.65515500
C	0.00000000	-1.21322900	0.96369500
C	0.00000000	-1.21506400	-0.42662800

H	0.00000000	2.15667000	-0.96681800
H	0.00000000	2.14905100	1.51103100
H	0.00000000	0.00000000	2.73967500
H	0.00000000	-2.14905100	1.51103100
H	0.00000000	-2.15667000	-0.96681800

	1	2	3
	B1	B2	A2
Frequencies --	175.4599	197.6652	387.5977
Red. masses --	6.1840	6.9871	2.7845
Frc consts --	0.1122	0.1608	0.2465
IR Inten --	8.5117	24.6654	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.49	0.00	0.00	0.00	0.61	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.29	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.24	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.13	0.20	0.00	0.00
4	6	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.20	0.00	0.00
5	6	0.24	0.00	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.13	0.20	0.00	0.00
7	6	-0.24	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.13	-0.20	0.00	0.00
8	1	-0.30	0.00	0.00	0.00	-0.25	-0.25	0.47	0.00	0.00
9	1	0.13	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.25	-0.45	0.00	0.00
10	1	0.54	0.00	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	0.13	0.00	0.00	0.00	0.07	0.25	0.45	0.00	0.00
12	1	-0.30	0.00	0.00	0.00	-0.25	0.25	-0.47	0.00	0.00

	4	5	6							
	B1	A1	B2							
Frequencies --	437.7194	515.8372	627.7680							
Red. masses --	3.5233	7.9889	6.4449							
Frc consts --	0.3977	1.2524	1.4965							
IR Inten --	0.2294	9.3126	0.1925							
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.54	0.00	-0.03	0.00

2	6	0.33	0.00	0.00	0.00	0.00	0.30	0.00	-0.15	0.00
3	6	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.17	-0.06	0.00	-0.23	0.23
4	6	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.16	-0.12	0.00	0.24	0.25
5	6	0.24	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.36	0.00	0.16	0.00
6	6	-0.15	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.12	0.00	0.24	-0.25
7	6	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.06	0.00	-0.23	-0.23
8	1	-0.31	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.31	0.00	-0.31	0.09
9	1	-0.39	0.00	0.00	0.00	0.04	0.08	0.00	0.33	0.09
10	1	0.53	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.36	0.00	-0.25	0.00
11	1	-0.39	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.08	0.00	0.33	-0.09
12	1	-0.31	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.31	0.00	-0.31	-0.09

03 -256.301719

B	0.00000000	0.00000000	-2.64518900
C	0.00000000	0.00000000	-1.16424400
C	0.00000000	1.22178900	-0.42706100
C	0.00000000	1.20670900	0.95821200
C	0.00000000	0.00000000	1.66619200
C	0.00000000	-1.20670900	0.95821200
C	0.00000000	-1.22178900	-0.42706100
H	0.00000000	2.17099500	-0.95076900
H	0.00000000	2.14874300	1.49623000
H	0.00000000	0.00000000	2.74952800
H	0.00000000	-2.14874300	1.49623000
H	0.00000000	-2.17099500	-0.95076900

	1	2	3
	B1	B2	A2
Frequencies --	201.1874	255.0440	326.8267
Red. masses --	5.2220	7.1490	2.7939
Frc consts --	0.1245	0.2740	0.1758
IR Inten --	1.7792	0.0830	0.0000
Atom AN	X Y Z	X Y Z	X Y Z

1	5	0.43	0.00	0.00	0.00	0.62	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.15	0.00	0.00	0.00	-0.27	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.25	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.12	0.19	0.00	0.00
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.14	-0.21	0.00	0.00
5	6	0.26	0.00	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.14	0.21	0.00	0.00
7	6	-0.25	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.12	-0.19	0.00	0.00
8	1	-0.38	0.00	0.00	0.00	-0.24	-0.23	0.51	0.00	0.00
9	1	0.03	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.26	-0.40	0.00	0.00
10	1	0.56	0.00	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	0.03	0.00	0.00	0.00	0.07	0.26	0.40	0.00	0.00
12	1	-0.38	0.00	0.00	0.00	-0.24	0.23	-0.51	0.00	0.00

4

5

6

B1

A1

B2

Frequencies --	468.6386	526.6144	625.0740
Red. masses --	3.3027	7.9964	6.4498
Frc consts --	0.4274	1.3066	1.4848
IR Inten --	15.4203	0.0193	0.0165

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.49	0.00	-0.03	0.00
2	6	0.34	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.00	-0.15	0.00
3	6	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.21	-0.05	0.00	-0.22	0.23
4	6	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.18	-0.12	0.00	0.24	0.25
5	6	0.20	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.37	0.00	0.15	0.00
6	6	-0.14	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.12	0.00	0.24	-0.25
7	6	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.21	-0.05	0.00	-0.22	-0.23
8	1	-0.35	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.29	0.00	-0.31	0.08
9	1	-0.47	0.00	0.00	0.00	0.05	0.11	0.00	0.33	0.09
10	1	0.32	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.37	0.00	-0.26	0.00
11	1	-0.47	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.11	0.00	0.33	-0.09
12	1	-0.35	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.29	0.00	-0.31	-0.08

0 1 -312.913848

B	1.93565400	-0.78788900	-0.52337000
C	0.46512200	-0.34647200	-0.23780300
C	-0.53028400	-1.32691800	-0.04736000
C	-1.85753600	-0.97798300	0.17995300
C	-2.24206200	0.36451500	0.16160600
C	-1.28595800	1.35552100	-0.06070700
C	0.04993100	1.00337100	-0.23516300
H	-0.24235000	-2.37241100	-0.08474500
H	-2.60047200	-1.75071800	0.34640300
H	0.76919200	1.80117400	-0.41321200
H	-1.58285500	2.39884300	-0.09057300
N	2.89212400	0.22925300	0.33320700
H	3.16090500	-0.34228700	1.14086200
H	3.75572400	0.40497100	-0.17368600
H	2.50335300	1.12732600	0.68873700
H	-3.28192000	0.63557300	0.30745600

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		67.1004			155.9774			169.9279		
Red. masses --		3.1450			1.8940			1.6441		
Frc consts --		0.0083			0.0271			0.0280		
IR Inten --		27.3704			35.2668			5.7753		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.02	-0.10	0.18	0.02	-0.11	0.12	-0.02	0.02	-0.01
2	6	-0.01	-0.04	0.15	0.00	-0.03	-0.07	0.01	0.08	0.05
3	6	-0.05	-0.02	0.01	-0.02	-0.02	-0.10	0.04	0.04	0.04
4	6	-0.07	0.00	-0.13	0.00	0.01	-0.03	0.02	-0.02	-0.01
5	6	-0.03	0.01	-0.11	0.04	0.02	0.09	-0.04	-0.04	-0.05
6	6	0.02	0.00	0.05	0.05	0.00	0.06	-0.07	0.00	0.00
7	6	0.02	-0.03	0.17	0.02	-0.03	-0.05	-0.05	0.06	0.05
8	1	-0.07	-0.02	-0.01	-0.04	-0.02	-0.14	0.09	0.05	0.04

9	1	-0.11	0.01	-0.25	-0.02	0.02	-0.03	0.04	-0.06	-0.05
10	1	0.06	-0.03	0.28	0.03	-0.03	-0.07	-0.08	0.09	0.07
11	1	0.05	0.01	0.07	0.08	0.01	0.13	-0.12	-0.01	-0.01
12	7	0.09	0.11	-0.18	-0.08	0.10	-0.02	0.09	-0.09	-0.05
13	1	0.43	0.21	-0.22	-0.40	0.40	0.31	-0.37	0.05	0.21
14	1	-0.09	0.14	-0.48	0.10	-0.22	0.18	0.31	-0.53	0.17
15	1	0.13	0.11	-0.15	-0.06	0.29	-0.49	0.30	0.14	-0.41
16	1	-0.04	0.03	-0.21	0.06	0.04	0.19	-0.06	-0.08	-0.12

4 5 6
A A A

Frequencies -- 221.9653 355.9889 403.4853
Red. masses -- 3.3997 3.9481 2.8352
Frc consts -- 0.0987 0.2948 0.2719
IR Inten -- 14.8008 8.3477 0.9225

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.02	-0.14	0.25	0.09	0.19	-0.06	0.01	-0.02	0.00
2	6	-0.02	0.11	-0.11	-0.02	-0.12	0.06	0.01	0.02	-0.02
3	6	0.03	0.07	-0.13	-0.14	-0.06	-0.04	0.05	0.02	0.21
4	6	0.03	-0.02	0.01	-0.14	0.03	-0.05	-0.02	-0.01	-0.19
5	6	-0.03	-0.04	0.11	-0.07	0.06	0.12	-0.02	-0.01	-0.02
6	6	-0.10	0.01	-0.02	-0.01	-0.04	-0.03	0.02	0.01	0.21
7	6	-0.09	0.10	-0.13	-0.05	-0.13	-0.11	-0.03	0.01	-0.19
8	1	0.10	0.09	-0.19	-0.26	-0.10	-0.03	0.10	0.03	0.47
9	1	0.09	-0.07	0.06	-0.19	0.06	-0.10	-0.05	-0.03	-0.41
10	1	-0.13	0.13	-0.14	-0.03	-0.17	-0.21	-0.08	0.00	-0.43
11	1	-0.17	-0.01	0.01	0.08	-0.01	-0.04	0.05	0.03	0.46
12	7	0.14	-0.07	0.04	0.26	0.08	0.08	-0.01	-0.02	0.00
13	1	0.54	-0.10	-0.12	0.08	0.01	0.10	0.04	-0.04	-0.03
14	1	-0.09	-0.01	-0.33	0.33	-0.13	0.11	-0.03	0.05	-0.01
15	1	0.24	-0.09	0.23	0.49	0.19	0.07	-0.07	-0.06	0.04
16	1	-0.02	-0.09	0.27	-0.02	0.13	0.29	-0.02	-0.01	-0.04

B	1.87835800	-0.87764300	-0.00005800
C	0.44694100	-0.41494900	-0.00014200
C	0.08251700	0.96642100	-0.00014800
C	-1.24451300	1.37964400	-0.00001800
C	-2.28054000	0.44321300	0.00010100
C	-1.95814600	-0.92254100	0.00007500
C	-0.63899500	-1.34032100	-0.00008000
H	0.85038800	1.73883000	-0.00022000
H	-1.47533500	2.44065700	0.00002900
H	-0.41604500	-2.40233600	-0.00002700
H	-2.75309400	-1.66172600	0.00021700
N	3.04281600	0.20765000	0.00013600
H	3.01228600	0.81994300	-0.82381900
H	3.01268700	0.81941800	0.82447000
H	3.94911500	-0.25517300	-0.00023200
H	-3.31508700	0.76624000	0.00019300

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	94.6830	113.6630	158.9391
Red. masses --	2.3125	1.2022	3.3106
Frc consts --	0.0122	0.0092	0.0493
IR Inten --	15.4539	7.2954	18.8329

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	-0.06	0.03	-0.07	0.00
2	6	0.00	0.00	0.14	0.00	0.00	-0.04	0.01	-0.16	0.00
3	6	0.00	0.00	0.16	0.00	0.00	-0.06	0.11	-0.13	0.00
4	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.16	-0.01	0.00
5	6	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.02	0.08	0.08	0.00
6	6	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.04	-0.03	0.05	0.00
7	6	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.01	-0.06	-0.07	0.00
8	1	0.00	0.00	0.29	0.00	0.00	-0.09	0.16	-0.18	0.00
9	1	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.06	0.25	0.01	0.00

10	1	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.03	-0.16	-0.09	0.00
11	1	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	0.09	-0.09	0.12	0.00
12	7	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00	0.07	-0.21	0.20	0.00
13	1	-0.37	0.11	-0.06	-0.29	0.39	0.37	-0.39	0.19	0.00
14	1	0.37	-0.11	-0.06	0.29	-0.39	0.37	-0.39	0.19	0.00
15	1	0.00	0.00	-0.62	0.00	0.00	-0.46	-0.09	0.45	0.00
16	1	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	0.05	0.11	0.16	0.00
			4			5			6	
			A			A			A	
Frequencies --		232.1518			354.9957			406.5417		
Red. masses --		4.0405			4.0409			2.9213		
Frc consts --		0.1283			0.3000			0.2845		
IR Inten --		7.7488			2.7383			0.0542		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.41	-0.11	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.01
2	6	0.00	0.00	-0.06	0.05	0.15	0.00	0.00	0.00	-0.01
3	6	0.00	0.00	-0.18	0.04	0.16	0.00	0.00	0.00	0.21
4	6	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.21
5	6	0.00	0.00	0.20	0.09	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	-0.05	0.16	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.21
7	6	0.00	0.00	-0.21	0.16	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.21
8	1	0.00	0.00	-0.23	-0.01	0.21	0.00	0.00	0.00	0.47
9	1	0.00	0.00	0.06	-0.13	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.44
10	1	0.00	0.00	-0.33	0.30	0.10	0.00	0.00	0.00	-0.46
11	1	0.00	0.00	-0.08	0.20	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.44
12	7	0.00	0.00	-0.03	-0.28	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1	-0.31	-0.15	-0.12	-0.46	-0.14	0.01	-0.01	-0.02	-0.02
14	1	0.31	0.15	-0.12	-0.46	-0.14	-0.01	0.01	0.02	-0.02
15	1	0.00	0.00	-0.29	-0.16	0.11	0.00	0.00	0.00	0.01
16	1	0.00	0.00	0.44	0.06	-0.15	0.00	0.00	0.00	-0.01

B	0.31185600	-0.51495800	-0.43418500
C	-1.16017400	-0.24012200	-0.19051600
C	-2.15297400	-1.21884200	-0.43412600
C	-3.49995800	-0.95734200	-0.20971200
C	-3.90359900	0.31264000	0.20731000
C	-2.95178000	1.31002700	0.42985600
C	-1.60042600	1.02877100	0.26322600
H	-1.84457700	-2.18880600	-0.80769600
H	-4.24025600	-1.73039100	-0.38483000
H	-4.95652500	0.52470500	0.35867900
H	-3.26557700	2.29417300	0.76113100
H	-0.86200600	1.79130100	0.48583100
C	3.85943500	0.48417100	-0.42441800
C	3.83710800	-0.35555200	0.62147000
C	1.66721500	-0.12234500	-0.09702700
N	2.52950000	0.73710600	-0.81339300
H	2.31379800	0.97004300	-1.76787600
H	4.68685700	1.00065500	-0.88008000
H	4.64162000	-0.71159600	1.24197000
N	2.49384400	-0.64289100	0.92157100
H	2.23489300	-1.48323200	1.41016900

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		30.3754			42.3283			51.1205		
Red. masses --		4.6040			4.7045			4.1811		
Frc consts --		0.0025			0.0050			0.0064		
IR Inten --		6.2823			21.9479			2.9497		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.24	0.06	0.00	0.03	0.25	0.00	0.12	-0.11
2	6	-0.02	0.12	0.03	-0.02	0.01	0.14	0.00	0.09	-0.08
3	6	0.07	0.01	0.11	0.01	0.03	-0.05	0.04	0.05	-0.10
4	6	0.05	-0.10	0.10	-0.02	0.03	-0.21	0.04	-0.05	0.00

5	6	-0.07	-0.10	-0.03	-0.06	0.00	-0.16	-0.01	-0.10	0.12
6	6	-0.17	0.01	-0.12	-0.09	-0.03	0.05	-0.05	-0.06	0.14
7	6	-0.14	0.12	-0.09	-0.07	-0.02	0.18	-0.05	0.03	0.02
8	1	0.16	0.01	0.18	0.05	0.06	-0.08	0.08	0.09	-0.18
9	1	0.13	-0.19	0.17	0.00	0.05	-0.37	0.07	-0.07	-0.02
10	1	-0.09	-0.19	-0.05	-0.08	-0.01	-0.27	-0.01	-0.17	0.21
11	1	-0.26	0.01	-0.22	-0.12	-0.05	0.09	-0.09	-0.10	0.23
12	1	-0.21	0.21	-0.14	-0.09	-0.04	0.32	-0.08	0.06	0.02
13	6	0.07	-0.08	0.00	0.02	-0.11	-0.19	0.09	-0.17	0.00
14	6	0.05	-0.20	-0.10	0.09	-0.01	-0.11	-0.07	-0.02	0.12
15	6	0.03	0.08	0.03	0.03	0.03	0.11	0.00	0.09	-0.08
16	7	0.08	0.10	0.09	-0.02	-0.05	-0.05	0.14	-0.09	-0.13
17	1	0.07	0.17	0.11	-0.09	-0.19	-0.07	0.24	-0.23	-0.19
18	1	0.10	-0.10	0.03	0.00	-0.20	-0.33	0.17	-0.32	-0.01
19	1	0.04	-0.34	-0.18	0.15	0.02	-0.16	-0.15	-0.02	0.23
20	7	0.03	-0.11	-0.05	0.11	0.11	0.10	-0.12	0.16	0.07
21	1	-0.01	-0.15	-0.16	0.15	0.11	0.12	-0.25	0.26	0.18

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	164.3662	169.0435	276.3863
Red. masses --	4.5944	5.0151	5.5549
Frc consts --	0.0731	0.0844	0.2500
IR Inten --	1.0855	10.9833	2.7523

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.03	0.12	-0.03	0.09	-0.01	-0.04	-0.04	-0.06
2	6	-0.02	0.14	-0.17	-0.02	0.04	0.15	0.10	0.17	0.07
3	6	0.01	0.11	-0.17	0.00	0.02	0.11	0.25	0.07	0.06
4	6	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.24	-0.06	-0.01
5	6	-0.03	-0.07	0.16	-0.08	0.02	-0.11	0.15	-0.07	-0.11
6	6	-0.07	0.01	0.03	-0.11	0.01	0.01	0.04	0.02	0.00
7	6	-0.07	0.12	-0.16	-0.08	0.02	0.15	0.07	0.14	0.12
8	1	0.04	0.15	-0.23	0.03	0.02	0.13	0.41	0.13	0.04
9	1	0.05	-0.05	0.06	0.00	0.00	-0.09	0.30	-0.12	-0.05

10	1	-0.02	-0.17	0.36	-0.10	0.02	-0.26	0.11	-0.13	-0.25
11	1	-0.11	-0.03	0.10	-0.14	0.01	-0.03	-0.10	-0.01	-0.03
12	1	-0.11	0.18	-0.22	-0.12	0.04	0.21	0.02	0.18	0.16
13	6	-0.04	0.06	-0.01	0.07	0.14	0.13	-0.19	-0.01	-0.03
14	6	0.10	0.11	0.02	0.03	0.13	0.13	-0.15	0.00	-0.02
15	6	0.03	-0.18	0.10	0.07	-0.13	-0.17	-0.10	-0.07	0.01
16	7	-0.08	-0.14	0.00	0.11	-0.16	-0.17	-0.19	-0.06	-0.02
17	1	-0.12	-0.24	-0.02	0.23	-0.23	-0.21	-0.23	-0.12	-0.03
18	1	-0.12	0.15	-0.06	0.06	0.28	0.28	-0.21	0.00	-0.04
19	1	0.16	0.26	0.03	-0.02	0.26	0.27	-0.13	0.05	-0.02
20	7	0.14	-0.10	0.06	0.04	-0.15	-0.16	-0.13	-0.05	0.00
21	1	0.29	-0.16	0.02	0.06	-0.11	-0.08	-0.12	-0.06	0.00

0 3 -482.605651

B	0.32663700	-0.99839600	-0.42895800
C	-1.09810900	-0.47576200	-0.22224400
C	-1.47596900	0.83005600	-0.62625800
C	-2.77048500	1.30844800	-0.44742900
C	-3.74417900	0.50040700	0.14229000
C	-3.40569700	-0.79444500	0.54241500
C	-2.11354700	-1.27350900	0.35776000
H	-0.74182400	1.46937800	-1.10853400
H	-3.02435200	2.31226800	-0.77312900
H	-4.75373200	0.87106300	0.28099500
H	-4.15671200	-1.43308300	0.99610500
H	-1.87229400	-2.28571700	0.66559700
C	3.92171500	-0.06924600	-0.02130400
C	3.32951300	0.97613300	0.60732900
C	1.65579200	-0.39398700	-0.16223900
N	2.91048900	-0.88989200	-0.48705100
H	3.02793400	-1.75535700	-0.98735400
H	4.96419400	-0.28823200	-0.17272200
H	3.76630800	1.82726200	1.10060500

N	1.96235800	0.78346000	0.51554600
H	1.25316000	1.37085200	0.92183200

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	34.8585	51.9295	69.7561
Red. masses --	4.0606	4.8955	4.0938
Frc consts --	0.0029	0.0078	0.0117
IR Inten --	1.1277	1.5066	1.6828

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.08	0.14	0.01	-0.16	-0.14	0.00	0.10	-0.12
2	6	0.00	-0.04	0.08	0.03	-0.10	-0.10	-0.01	0.07	-0.11
3	6	0.09	0.02	0.21	0.10	-0.07	-0.06	-0.09	0.06	-0.04
4	6	0.09	0.05	0.15	0.16	0.04	0.06	-0.10	0.00	0.07
5	6	0.00	0.02	-0.05	0.15	0.12	0.14	-0.03	-0.06	0.12
6	6	-0.08	-0.05	-0.18	0.07	0.08	0.08	0.06	-0.06	0.04
7	6	-0.08	-0.07	-0.12	0.01	-0.03	-0.04	0.06	0.00	-0.07
8	1	0.15	0.05	0.34	0.12	-0.13	-0.12	-0.16	0.12	-0.07
9	1	0.16	0.10	0.25	0.22	0.07	0.10	-0.17	0.00	0.13
10	1	0.01	0.04	-0.10	0.19	0.21	0.24	-0.03	-0.10	0.21
11	1	-0.15	-0.08	-0.34	0.05	0.14	0.14	0.12	-0.11	0.07
12	1	-0.15	-0.12	-0.23	-0.05	-0.05	-0.07	0.13	0.00	-0.13
13	6	0.00	0.01	-0.03	-0.08	0.11	0.11	0.02	-0.15	0.20
14	6	0.00	0.10	-0.18	-0.22	0.07	0.03	0.04	-0.02	-0.01
15	6	0.00	-0.02	0.05	-0.04	-0.08	-0.08	0.01	0.06	-0.08
16	7	-0.01	-0.06	0.11	0.03	0.01	0.04	0.01	-0.10	0.14
17	1	-0.01	-0.13	0.23	0.15	0.01	0.07	-0.01	-0.20	0.31
18	1	-0.01	0.00	-0.01	-0.05	0.19	0.21	0.02	-0.28	0.38
19	1	0.00	0.18	-0.31	-0.34	0.12	0.05	0.06	0.00	-0.05
20	7	0.00	0.08	-0.13	-0.20	-0.04	-0.08	0.03	0.12	-0.19
21	1	0.00	0.13	-0.19	-0.28	-0.10	-0.15	0.04	0.22	-0.33

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	169.5968	200.4155	288.0401
Red. masses --	5.5893	4.8453	5.4660
Frc consts --	0.0947	0.1147	0.2672
IR Inten --	2.3814	1.5252	2.0914

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.04	0.01	-0.01	0.00	-0.13	-0.04	0.04	-0.03
2	6	0.03	-0.01	0.19	0.08	0.19	0.07	0.07	0.04	-0.02
3	6	0.08	-0.01	0.17	0.00	0.19	0.13	0.14	0.05	0.02
4	6	0.05	-0.02	-0.02	-0.08	0.03	0.01	0.13	-0.01	-0.02
5	6	-0.02	-0.03	-0.16	-0.06	-0.10	-0.13	0.16	-0.10	-0.08
6	6	-0.03	0.01	-0.01	0.08	-0.03	-0.01	0.18	-0.07	0.00
7	6	0.00	0.02	0.18	0.15	0.13	0.10	0.18	-0.02	0.03
8	1	0.13	-0.02	0.23	-0.05	0.27	0.17	0.17	0.05	0.05
9	1	0.08	-0.04	-0.08	-0.17	0.00	0.00	0.06	-0.02	0.00
10	1	-0.06	-0.07	-0.35	-0.13	-0.24	-0.28	0.13	-0.15	-0.14
11	1	-0.08	0.02	-0.07	0.12	-0.11	-0.05	0.18	-0.06	0.01
12	1	-0.03	0.04	0.26	0.24	0.16	0.13	0.27	0.01	0.04
13	6	-0.01	-0.08	0.17	-0.01	0.07	-0.03	-0.19	-0.12	-0.07
14	6	-0.05	-0.10	0.16	-0.13	0.03	-0.08	-0.04	-0.04	-0.04
15	6	0.00	0.09	-0.24	0.03	-0.19	-0.01	-0.18	0.13	0.09
16	7	0.01	0.10	-0.21	0.08	-0.12	0.08	-0.29	-0.01	0.03
17	1	0.04	0.00	-0.03	0.19	-0.06	0.00	-0.46	-0.02	0.00
18	1	0.00	-0.15	0.35	0.01	0.19	-0.03	-0.23	-0.22	-0.14
19	1	-0.07	-0.18	0.33	-0.23	0.11	-0.13	0.10	-0.09	-0.09
20	7	-0.05	0.08	-0.22	-0.10	-0.17	0.00	-0.07	0.10	0.08
21	1	-0.07	-0.04	-0.07	-0.18	-0.18	-0.13	0.01	0.19	0.10

37 bph-py

0 1 -504.655986

B	0.00153700	-1.30040100	0.00924600
C	1.34107000	-0.53958200	0.00103000
C	2.56318400	-1.24114000	0.04927900
C	3.78130500	-0.56919700	0.04162800

C	3.80328800	0.82496200	-0.01952000
C	2.60916000	1.54662900	-0.07044200
C	1.39368800	0.87066200	-0.05830700
H	2.53488700	-2.32416500	0.09253700
H	4.71165200	-1.12473500	0.08099900
H	4.75220300	1.35071600	-0.02774800
H	2.63187100	2.63009800	-0.11749700
H	0.46896300	1.43762600	-0.09543000
C	-1.95387000	-0.36741600	-1.17763500
C	-3.19980600	0.21048900	-1.18211200
C	-3.84361100	0.56393300	0.01045200
C	-3.14806800	0.31605600	1.20045800
C	-1.89903800	-0.25522300	1.19231900
N	-1.26850000	-0.62726900	0.00688000
H	-4.83592700	0.99264300	0.01295500
H	-1.46071500	-0.69267400	-2.08271500
H	-3.67472600	0.37785800	-2.14179700
H	-3.58038200	0.57038700	2.16119000
H	-1.35982800	-0.48589900	2.10020800

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		16.8062			37.6415			59.0811		
Red. masses --		4.3750			3.6662			4.9295		
Frc consts --		0.0007			0.0031			0.0101		
IR Inten --		2.1422			0.0107			3.8674		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.25	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.18	0.00
2	6	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.10	0.00
3	6	0.00	0.00	0.09	0.00	-0.01	-0.15	-0.02	0.00	0.00
4	6	-0.01	0.01	0.23	0.00	0.00	-0.13	0.04	-0.10	0.00
5	6	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	0.06	0.16	-0.11	0.00
6	6	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.01	0.21	0.21	-0.01	0.00

7	6	0.00	0.00	-0.15	-0.01	0.00	0.16	0.16	0.10	0.00
8	1	-0.01	0.00	0.12	0.01	-0.01	-0.27	-0.11	0.00	-0.01
9	1	-0.01	0.01	0.38	0.00	-0.01	-0.25	-0.01	-0.18	-0.01
10	1	0.00	0.01	0.25	-0.01	0.01	0.09	0.20	-0.18	0.00
11	1	0.01	0.00	-0.10	-0.01	0.01	0.35	0.31	-0.01	0.01
12	1	0.01	-0.01	-0.28	-0.01	0.01	0.26	0.20	0.17	0.01
13	6	-0.14	-0.05	-0.05	-0.07	-0.17	-0.01	-0.05	0.07	0.00
14	6	-0.13	-0.03	0.07	-0.07	-0.16	-0.01	-0.14	-0.11	0.00
15	6	0.00	0.00	0.13	0.01	0.01	-0.02	-0.19	-0.22	0.01
16	6	0.13	0.03	0.06	0.07	0.16	-0.03	-0.14	-0.10	0.00
17	6	0.14	0.04	-0.07	0.08	0.16	-0.03	-0.05	0.09	0.00
18	7	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.14	-0.01
19	1	0.00	0.00	0.23	0.01	0.01	-0.02	-0.26	-0.37	0.01
20	1	-0.26	-0.11	-0.10	-0.14	-0.31	0.00	-0.02	0.14	-0.01
21	1	-0.24	-0.05	0.12	-0.13	-0.29	-0.01	-0.16	-0.18	0.01
22	1	0.24	0.05	0.10	0.13	0.29	-0.04	-0.16	-0.15	0.00
23	1	0.26	0.11	-0.12	0.14	0.30	-0.03	-0.01	0.17	0.00

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 157.1121 168.5244 269.3506

Red. masses -- 4.6939 4.2922 5.0751

Frc consts -- 0.0683 0.0718 0.2169

IR Inten -- 0.2462 1.8751 5.3513

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.01	-0.10	0.01	0.08	-0.03	-0.01	0.00	0.01
2	6	0.00	-0.01	0.28	0.00	0.13	0.03	0.16	-0.19	0.01
3	6	0.00	0.00	0.22	-0.04	0.07	0.03	0.27	-0.05	0.00
4	6	0.00	0.00	-0.04	0.01	-0.02	0.00	0.20	0.11	0.00
5	6	-0.01	0.00	-0.23	0.10	-0.02	-0.03	0.07	0.12	0.00
6	6	-0.02	-0.01	-0.03	0.14	0.05	0.00	-0.01	-0.04	0.00
7	6	-0.02	-0.01	0.25	0.09	0.13	0.03	0.07	-0.19	0.00
8	1	0.02	0.00	0.28	-0.11	0.07	0.03	0.44	-0.06	0.01
9	1	0.01	0.01	-0.16	-0.03	-0.08	-0.02	0.26	0.21	-0.01

10	1	-0.01	-0.01	-0.53	0.13	-0.08	-0.07	0.02	0.22	0.01
11	1	-0.03	-0.01	-0.13	0.21	0.05	-0.02	-0.17	-0.04	0.00
12	1	-0.02	-0.02	0.36	0.12	0.19	0.04	0.02	-0.28	0.00
13	6	-0.05	0.04	-0.10	-0.13	-0.22	-0.01	-0.15	0.00	0.01
14	6	-0.06	0.04	-0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.14	0.04	0.02
15	6	-0.01	-0.03	0.04	0.07	0.21	-0.01	-0.13	0.12	0.00
16	6	0.07	-0.04	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.13	0.04	-0.02
17	6	0.09	0.01	-0.10	-0.11	-0.23	0.01	-0.14	-0.01	-0.02
18	7	0.01	0.01	-0.14	-0.07	-0.13	-0.01	-0.04	0.03	-0.01
19	1	-0.02	-0.05	0.11	0.16	0.43	-0.01	-0.11	0.19	0.00
20	1	-0.11	0.05	-0.13	-0.21	-0.36	0.00	-0.21	-0.02	-0.01
21	1	-0.11	0.08	0.03	-0.04	-0.01	0.00	-0.14	0.00	0.01
22	1	0.13	-0.07	0.03	-0.01	-0.02	0.00	-0.11	0.00	0.00
23	1	0.17	0.04	-0.14	-0.18	-0.36	0.01	-0.20	-0.05	0.01

0 3 -504.668886

B	-0.06849500	-1.06363800	0.36159300
C	1.34036200	-0.48737200	0.17433800
C	1.74055000	0.70986300	0.81086100
C	3.03792400	1.19699400	0.68566700
C	3.97436800	0.51012900	-0.08803600
C	3.60475700	-0.67543500	-0.72480500
C	2.31349400	-1.17325900	-0.58399500
H	1.02817200	1.25845600	1.41918300
H	3.31987900	2.11536200	1.18964600
H	4.98422300	0.89191500	-0.18849400
H	4.32887100	-1.21698100	-1.32391900
H	2.04759500	-2.10848900	-1.06553800
C	-2.52340300	-1.15673000	0.50950200
C	-3.76216400	-0.62089100	0.30271300
C	-3.91742000	0.64791600	-0.29375800
C	-2.74498200	1.33007500	-0.67310500
C	-1.50930000	0.78473700	-0.46315200

N	-1.34494900	-0.47849000	0.14449200
H	-4.89638400	1.07623700	-0.45861800
H	-2.36215900	-2.12409400	0.96299400
H	-4.62620000	-1.19758200	0.61062100
H	-2.79976800	2.30338000	-1.14677500
H	-0.59224100	1.27325200	-0.75589700

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		32.4911			61.5981			67.1516		
Red. masses --		4.0379			4.0591			4.6772		
Frc consts --		0.0025			0.0091			0.0124		
IR Inten --		0.2788			0.0882			0.5539		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.04	0.16	0.00	-0.09	-0.09	0.01	0.15	-0.10
2	6	0.00	0.02	0.09	-0.01	-0.07	-0.08	0.02	0.11	-0.10
3	6	0.08	-0.07	0.20	-0.10	-0.08	0.00	0.09	0.05	-0.03
4	6	0.08	-0.08	0.12	-0.11	-0.01	0.09	0.15	-0.08	0.10
5	6	-0.02	0.00	-0.07	-0.05	0.07	0.10	0.14	-0.14	0.15
6	6	-0.11	0.09	-0.18	0.04	0.09	0.01	0.07	-0.06	0.05
7	6	-0.10	0.10	-0.11	0.05	0.02	-0.07	0.00	0.06	-0.08
8	1	0.16	-0.14	0.34	-0.15	-0.14	0.00	0.10	0.09	-0.05
9	1	0.15	-0.15	0.20	-0.18	-0.02	0.15	0.21	-0.14	0.17
10	1	-0.02	0.00	-0.13	-0.06	0.12	0.16	0.19	-0.25	0.26
11	1	-0.18	0.16	-0.34	0.09	0.16	0.02	0.06	-0.11	0.07
12	1	-0.17	0.17	-0.21	0.12	0.04	-0.14	-0.05	0.11	-0.14
13	6	-0.01	0.04	0.10	0.00	0.05	0.09	0.04	0.03	0.06
14	6	0.00	0.02	-0.01	0.02	0.13	0.20	-0.01	-0.06	0.11
15	6	0.02	-0.05	-0.15	0.05	0.10	0.11	-0.13	-0.10	0.05
16	6	0.03	-0.07	-0.15	0.06	-0.04	-0.10	-0.20	-0.05	-0.06
17	6	0.02	-0.04	-0.04	0.04	-0.12	-0.20	-0.14	0.05	-0.11
18	7	0.00	0.01	0.08	0.01	-0.07	-0.08	-0.03	0.09	-0.06
19	1	0.02	-0.07	-0.24	0.07	0.17	0.20	-0.17	-0.17	0.08

20	1	-0.02	0.09	0.21	-0.03	0.07	0.16	0.13	0.07	0.10
21	1	-0.01	0.04	0.01	0.01	0.23	0.35	0.05	-0.09	0.20
22	1	0.05	-0.11	-0.24	0.08	-0.08	-0.20	-0.29	-0.08	-0.11
23	1	0.04	-0.06	-0.03	0.05	-0.22	-0.35	-0.19	0.09	-0.19
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		138.6792			206.4397			273.3057		
Red. masses --		4.4185			4.5809			5.6530		
Frc consts --		0.0501			0.1150			0.2488		
IR Inten --		0.3255			0.7492			1.7105		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.06	0.12	0.01	-0.02	0.10	-0.02	-0.05	-0.01
2	6	0.00	0.07	0.16	-0.08	0.17	-0.11	0.08	-0.03	-0.01
3	6	0.09	0.07	0.11	-0.04	0.18	-0.15	0.15	-0.04	0.00
4	6	0.10	0.03	-0.01	0.03	0.03	-0.01	0.14	0.02	-0.02
5	6	0.01	-0.01	-0.08	0.06	-0.12	0.15	0.17	0.11	-0.06
6	6	-0.07	-0.02	-0.01	-0.05	-0.01	0.01	0.19	0.07	0.00
7	6	-0.07	0.02	0.11	-0.12	0.15	-0.13	0.19	0.02	0.02
8	1	0.15	0.11	0.15	-0.04	0.26	-0.22	0.18	-0.04	0.04
9	1	0.17	0.03	-0.05	0.09	-0.01	0.02	0.08	0.03	-0.01
10	1	0.01	-0.03	-0.18	0.14	-0.29	0.33	0.15	0.17	-0.11
11	1	-0.14	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	0.05	0.18	0.07	0.00
12	1	-0.14	0.02	0.16	-0.19	0.19	-0.18	0.27	0.00	0.01
13	6	-0.01	-0.11	-0.21	-0.08	-0.09	0.01	-0.26	-0.02	0.02
14	6	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.04	-0.22	0.10	-0.03
15	6	0.00	0.09	0.21	0.09	0.04	0.00	-0.13	0.10	-0.05
16	6	-0.01	0.00	0.01	0.15	-0.04	0.03	-0.04	-0.02	0.01
17	6	-0.02	-0.10	-0.21	0.08	-0.14	0.06	-0.10	-0.13	0.07
18	7	-0.01	-0.07	-0.15	-0.03	-0.13	0.08	-0.14	-0.14	0.06
19	1	0.01	0.19	0.43	0.13	0.12	-0.02	-0.09	0.18	-0.10
20	1	-0.01	-0.17	-0.34	-0.16	-0.11	-0.01	-0.40	-0.03	0.04
21	1	0.00	-0.01	0.01	-0.09	0.07	-0.11	-0.27	0.17	-0.05
22	1	-0.02	0.01	0.03	0.24	-0.03	0.03	0.09	-0.01	0.01

23 1 -0.02 -0.16 -0.33 0.13 -0.23 0.07 -0.07 -0.17 0.10

38 bph-pyCN

0 1 -596.921454

B	-0.60795200	0.61277500	-1.15148400
C	-1.91037500	0.16323000	-0.48782500
C	-1.94126100	-0.22964500	0.86977700
C	-3.12575100	-0.63920200	1.47104100
C	-4.30670700	-0.66555000	0.72655100
C	-4.30472100	-0.28289600	-0.61586500
C	-3.11899800	0.12748900	-1.21477000
H	-1.02585800	-0.21215700	1.45208500
H	-3.13444200	-0.93881600	2.51317900
H	-5.23124900	-0.98583300	1.19475300
H	-5.22549100	-0.30630200	-1.18750100
H	-3.10696900	0.42716700	-2.25651200
C	1.54776900	-0.40716700	-0.54621500
C	2.82404400	-0.31250100	-0.02617400
C	3.29860300	0.87653800	0.55777500
C	2.40068100	1.95097600	0.59154600
C	1.13850500	1.85626000	0.06797300
N	0.67270100	0.67747200	-0.53413300
H	4.30485400	0.94998500	0.94145200
H	1.19025100	-1.30617800	-1.02597200
H	2.69219600	2.89564500	1.03464400
H	0.45310200	2.69104600	0.04487900
C	3.66317500	-1.47204900	-0.09485800
N	4.34638300	-2.40194700	-0.14405600

	1	2	3
	A	A	A

Frequencies --	21.8251	32.1299	51.9772
Red. masses --	5.7961	4.4667	4.8427

Frc consts	--	0.0016			0.0027			0.0077			
IR Inten	--	1.3910			0.7379			4.1124			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	5	0.02	-0.23	-0.06	0.01	-0.04	0.03	0.00	0.03	-0.18	
2	6	-0.02	-0.08	-0.03	-0.01	-0.02	0.01	0.04	0.02	-0.10	
3	6	-0.01	-0.12	-0.04	-0.08	0.20	0.07	0.15	0.07	-0.08	
4	6	-0.04	0.00	-0.01	-0.11	0.26	0.06	0.20	0.07	0.02	
5	6	-0.08	0.20	0.04	-0.05	0.08	-0.01	0.15	0.02	0.11	
6	6	-0.08	0.25	0.06	0.02	-0.15	-0.08	0.04	-0.04	0.09	
7	6	-0.05	0.10	0.02	0.04	-0.18	-0.06	-0.01	-0.04	-0.01	
8	1	0.01	-0.26	-0.07	-0.12	0.32	0.13	0.19	0.11	-0.15	
9	1	-0.04	-0.04	-0.02	-0.16	0.43	0.11	0.28	0.12	0.04	
10	1	-0.10	0.31	0.07	-0.07	0.12	-0.02	0.19	0.02	0.19	
11	1	-0.11	0.40	0.10	0.06	-0.29	-0.14	0.00	-0.08	0.16	
12	1	-0.05	0.12	0.03	0.10	-0.34	-0.11	-0.09	-0.08	-0.02	
13	6	0.09	-0.08	-0.05	0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.04	-0.16	
14	6	0.06	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.02	-0.07	-0.01	0.02	
15	6	-0.04	0.03	0.03	0.00	-0.03	0.04	-0.15	-0.07	0.19	
16	6	-0.13	-0.04	0.03	-0.02	-0.06	0.10	-0.14	-0.06	0.15	
17	6	-0.11	-0.13	0.01	-0.02	-0.06	0.11	-0.08	-0.02	-0.02	
18	7	0.00	-0.15	-0.03	0.00	-0.04	0.04	-0.01	0.02	-0.13	
19	1	-0.06	0.10	0.06	0.01	-0.02	0.03	-0.20	-0.10	0.33	
20	1	0.18	-0.09	-0.10	0.05	0.00	-0.06	0.06	0.08	-0.29	
21	1	-0.21	-0.03	0.06	-0.04	-0.07	0.15	-0.19	-0.10	0.25	
22	1	-0.19	-0.19	0.04	-0.05	-0.08	0.16	-0.08	-0.02	-0.03	
23	6	0.16	0.07	0.00	0.06	0.02	-0.10	-0.06	-0.01	0.02	
24	7	0.24	0.13	0.00	0.10	0.04	-0.17	-0.06	-0.01	0.03	
		4			5			6			
		A			A			A			
Frequencies	--	131.6598			138.7558			154.5911			
Red. masses	--	6.5982			5.3674			4.4796			
Frc consts	--	0.0674			0.0609			0.0631			
IR Inten	--	3.3978			0.9936			3.4398			

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.06	0.12	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.03	0.10
2	6	-0.09	0.27	0.07	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.05	0.12
3	6	-0.06	0.21	0.05	0.01	-0.02	-0.01	-0.09	-0.07	0.12
4	6	-0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.14	-0.04	0.05
5	6	0.02	-0.20	-0.04	0.01	0.01	0.00	-0.10	0.00	-0.02
6	6	-0.03	-0.06	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.02
7	6	-0.08	0.18	0.06	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.03	0.06
8	1	-0.08	0.30	0.07	0.01	-0.02	-0.01	-0.12	-0.10	0.18
9	1	0.02	-0.10	-0.03	0.01	-0.01	-0.01	-0.21	-0.04	0.04
10	1	0.07	-0.44	-0.10	0.00	0.02	0.01	-0.14	0.03	-0.07
11	1	-0.01	-0.18	-0.02	0.00	0.03	0.01	0.03	0.03	-0.08
12	1	-0.11	0.25	0.08	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.02	0.06
13	6	-0.04	-0.08	-0.09	-0.08	-0.07	0.20	0.13	0.10	-0.27
14	6	-0.05	-0.11	-0.06	-0.09	-0.08	0.24	0.04	0.03	-0.04
15	6	-0.04	-0.14	-0.01	-0.08	-0.07	0.21	-0.03	-0.05	0.18
16	6	0.01	-0.11	-0.03	0.02	0.03	-0.07	0.03	0.01	0.01
17	6	0.03	-0.06	-0.07	0.09	0.09	-0.24	0.10	0.09	-0.18
18	7	-0.02	-0.04	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.06	0.05	-0.11
19	1	-0.04	-0.19	0.01	-0.10	-0.09	0.27	-0.11	-0.11	0.38
20	1	-0.07	-0.05	-0.12	-0.09	-0.09	0.26	0.20	0.16	-0.42
21	1	0.04	-0.12	-0.02	0.08	0.09	-0.23	0.02	0.01	0.02
22	1	0.06	-0.03	-0.09	0.21	0.18	-0.55	0.15	0.12	-0.28
23	6	0.06	-0.04	0.01	-0.02	-0.01	0.05	0.02	0.01	-0.02
24	7	0.32	0.14	0.17	0.10	0.10	-0.30	-0.04	-0.04	0.05

0 3 -596.933969

B	-0.56400900	-1.47768400	0.06737700
C	-1.83264100	-0.62000500	0.04290400
C	-2.87019800	-0.89186700	-0.87434700
C	-4.04093800	-0.14132100	-0.88271400
C	-4.22444100	0.88329700	0.04675600
C	-3.22476000	1.15613300	0.98080800

C	-2.04374600	0.42068500	0.97587500
H	-2.75112700	-1.70230200	-1.58563800
H	-4.81738600	-0.36136300	-1.60709600
H	-5.14202400	1.46075500	0.04723900
H	-3.36487500	1.94613800	1.71052900
H	-1.28012500	0.64808500	1.71319600
C	1.22218100	0.23029000	-0.11406900
C	2.55003600	0.58149200	-0.11531300
C	3.56756900	-0.39265200	0.06191600
C	3.15027600	-1.72661500	0.22642400
C	1.82752400	-2.06323300	0.22763200
N	0.80981400	-1.09801800	0.06782500
H	4.61021800	-0.11135300	0.06138000
H	0.43275300	0.95054100	-0.26505000
H	3.88056400	-2.51559200	0.35694000
H	1.46929800	-3.07460800	0.35160200
C	2.89213800	1.95864000	-0.30710800
N	3.18229500	3.06645600	-0.45819300

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		26.4842			50.9915			56.6521		
Red. masses --		4.1220			6.4919			4.5431		
Frc consts --		0.0017			0.0099			0.0086		
IR Inten --		0.5321			0.7210			0.9002		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.02	0.07	0.00	-0.15	0.05	0.00	-0.03	-0.20
2	6	0.01	-0.02	0.04	0.03	-0.09	0.05	0.01	-0.01	-0.14
3	6	0.11	0.14	-0.13	0.01	-0.04	0.06	-0.07	0.05	-0.07
4	6	0.13	0.17	-0.15	0.10	0.09	0.00	-0.07	0.06	0.08
5	6	0.04	0.04	-0.02	0.21	0.19	-0.08	0.02	0.00	0.16
6	6	-0.06	-0.13	0.14	0.23	0.13	-0.09	0.11	-0.06	0.09
7	6	-0.08	-0.15	0.17	0.14	-0.01	-0.02	0.10	-0.06	-0.07

8	1	0.18	0.25	-0.24	-0.08	-0.11	0.12	-0.14	0.09	-0.13
9	1	0.21	0.30	-0.28	0.08	0.13	0.01	-0.13	0.11	0.14
10	1	0.05	0.06	-0.04	0.29	0.30	-0.14	0.02	0.00	0.28
11	1	-0.13	-0.24	0.25	0.32	0.20	-0.15	0.18	-0.10	0.14
12	1	-0.16	-0.28	0.29	0.16	-0.04	-0.03	0.17	-0.11	-0.12
13	6	-0.02	-0.02	0.01	-0.08	-0.09	0.01	-0.01	-0.02	-0.15
14	6	-0.03	0.00	-0.03	-0.11	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.02
15	6	-0.01	0.01	-0.02	-0.05	0.04	-0.01	-0.02	0.04	0.24
16	6	0.01	0.01	0.04	0.03	0.02	-0.03	-0.01	0.04	0.23
17	6	0.01	0.00	0.07	0.05	-0.06	-0.03	0.00	0.01	0.03
18	7	0.00	-0.02	0.06	-0.01	-0.12	0.01	0.00	-0.02	-0.13
19	1	-0.01	0.02	-0.06	-0.06	0.10	-0.01	-0.03	0.07	0.39
20	1	-0.04	-0.03	0.02	-0.12	-0.14	0.01	0.00	-0.05	-0.31
21	1	0.02	0.03	0.05	0.07	0.06	-0.06	-0.01	0.06	0.36
22	1	0.02	0.00	0.12	0.11	-0.08	-0.04	0.00	0.00	0.02
23	6	-0.04	-0.01	-0.09	-0.22	0.02	0.04	-0.02	0.00	-0.04
24	7	-0.06	-0.01	-0.14	-0.34	0.05	0.07	-0.03	-0.01	-0.09

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	133.2928	139.0523	142.8911
Red. masses --	5.3491	6.4900	5.2258
Frc consts --	0.0560	0.0739	0.0629
IR Inten --	1.8162	4.3060	1.2121

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.02	-0.04	0.14	0.02	0.11	0.11	0.01	0.05	0.00
2	6	-0.04	-0.08	0.19	0.06	0.16	0.05	0.02	0.08	0.05
3	6	0.02	-0.09	0.12	0.11	0.09	0.02	0.05	0.03	0.03
4	6	0.07	-0.01	-0.03	0.03	-0.03	0.00	0.02	-0.02	-0.01
5	6	0.05	0.06	-0.11	-0.10	-0.07	0.02	-0.04	-0.02	-0.02
6	6	-0.03	0.02	0.00	-0.13	0.04	0.02	-0.07	0.03	0.00
7	6	-0.07	-0.06	0.14	-0.05	0.16	0.04	-0.04	0.08	0.03
8	1	0.03	-0.13	0.17	0.19	0.11	0.02	0.10	0.02	0.05
9	1	0.12	0.01	-0.09	0.07	-0.10	-0.02	0.05	-0.06	-0.02

10	1	0.10	0.14	-0.24	-0.17	-0.18	0.03	-0.07	-0.06	-0.04
11	1	-0.05	0.06	-0.05	-0.22	0.02	0.02	-0.12	0.03	-0.02
12	1	-0.12	-0.07	0.20	-0.08	0.24	0.04	-0.06	0.13	0.05
13	6	-0.06	-0.01	-0.26	0.10	-0.08	-0.29	0.05	0.00	0.12
14	6	-0.07	0.04	-0.05	0.10	-0.10	-0.17	0.05	-0.01	0.23
15	6	-0.06	0.09	0.16	0.08	-0.09	0.01	0.04	-0.02	0.25
16	6	-0.02	0.06	0.02	0.03	-0.08	0.09	0.02	-0.06	-0.09
17	6	-0.01	0.01	-0.17	0.02	-0.05	0.03	0.02	-0.06	-0.28
18	7	-0.03	-0.01	-0.16	0.06	-0.04	-0.11	0.03	-0.01	-0.04
19	1	-0.08	0.14	0.36	0.08	-0.11	0.12	0.04	-0.02	0.38
20	1	-0.08	-0.05	-0.39	0.13	-0.08	-0.40	0.07	0.01	0.10
21	1	-0.01	0.08	0.06	0.00	-0.08	0.22	0.01	-0.09	-0.24
22	1	0.02	-0.01	-0.26	-0.01	-0.03	0.13	0.01	-0.10	-0.57
23	6	0.02	0.03	-0.01	0.00	-0.05	-0.04	0.00	-0.02	0.06
24	7	0.24	-0.02	0.06	-0.29	0.05	0.20	-0.16	-0.02	-0.27

39 bph-pyCN4

0 1 -596.931129

B	-0.79812100	-1.19282000	0.00008400
C	-2.12772200	-0.45500000	0.00012000
C	-3.35637500	-1.14915400	0.00040800
C	-4.56475300	-0.46263200	0.00030500
C	-4.56891200	0.93347700	-0.00015700
C	-3.36793400	1.64580500	-0.00049000
C	-2.15970800	0.95917800	-0.00034900
H	-3.34344900	-2.23303600	0.00075700
H	-5.50175900	-1.00748100	0.00053200
H	-5.51198100	1.46922000	-0.00029500
H	-3.37957900	2.72995400	-0.00083400
H	-1.22730500	1.51366200	-0.00059600
C	1.23377300	-0.51096700	1.19683100
C	2.54079800	-0.12440500	1.20102600
C	3.26016700	0.08116300	0.00003900

C	2.54108500	-0.12517800	-1.20099500
C	1.23405100	-0.51173700	-1.19685000
N	0.52539900	-0.72878700	-0.00004100
H	0.68420300	-0.70614500	2.10623300
H	3.02532500	0.02339400	-2.15815200
H	0.68473600	-0.70757000	-2.10626700
H	3.02480100	0.02478000	2.15821000
C	4.62015000	0.46409500	0.00004900
N	5.73572900	0.78442300	0.00009600

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		29.0470			32.5583			43.9148		
Red. masses --		4.8179			7.0101			3.8039		
Frc consts --		0.0024			0.0044			0.0043		
IR Inten --		0.0987			5.1502			0.0585		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.20	-0.02	-0.18	0.00	0.00	0.00	-0.07
2	6	0.00	0.00	-0.08	0.03	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.04
3	6	0.00	0.00	0.17	-0.03	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.12
4	6	0.00	0.00	0.30	0.03	0.16	0.00	0.00	0.00	-0.06
5	6	0.00	0.00	0.15	0.16	0.16	0.00	0.00	0.00	0.11
6	6	0.00	0.00	-0.11	0.23	0.05	0.00	0.00	0.00	0.19
7	6	0.00	0.00	-0.20	0.16	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.10
8	1	0.00	0.00	0.25	-0.13	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.23
9	1	0.00	0.00	0.50	-0.02	0.25	0.00	0.00	0.00	-0.12
10	1	0.00	0.00	0.24	0.21	0.25	0.00	0.00	0.00	0.17
11	1	0.00	0.00	-0.22	0.33	0.05	0.00	0.00	0.00	0.31
12	1	0.00	0.00	-0.38	0.21	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.16
13	6	-0.07	0.00	-0.10	-0.03	-0.17	0.00	-0.08	0.19	-0.05
14	6	-0.07	-0.01	-0.02	-0.06	-0.06	0.00	-0.08	0.18	-0.02
15	6	0.00	0.00	0.02	-0.08	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01
16	6	0.07	0.01	-0.02	-0.06	-0.06	0.00	0.08	-0.18	-0.02

17	6	0.07	0.00	-0.10	-0.03	-0.17	0.00	0.08	-0.19	-0.05
18	7	0.00	0.00	-0.14	-0.02	-0.19	0.00	0.00	0.00	-0.06
19	1	-0.13	0.02	-0.13	-0.01	-0.23	0.00	-0.14	0.34	-0.05
20	1	0.13	0.01	0.01	-0.06	-0.04	0.00	0.14	-0.33	-0.01
21	1	0.13	-0.02	-0.13	-0.01	-0.23	0.00	0.14	-0.34	-0.05
22	1	-0.13	-0.01	0.01	-0.07	-0.04	0.00	-0.14	0.33	-0.02
23	6	0.00	0.00	0.11	-0.13	0.19	0.00	0.00	0.00	0.02
24	7	0.00	0.00	0.18	-0.17	0.34	0.00	0.00	0.00	0.05

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	94.1257	138.9139	180.1756
Red. masses --	6.5518	6.5189	5.6187
Frc consts --	0.0342	0.0741	0.1075
IR Inten --	13.9799	6.0968	2.4975

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.01	0.20	0.00	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.19
2	6	-0.03	0.16	0.00	0.00	0.00	0.28	0.00	0.00	0.18
3	6	0.02	0.07	0.00	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	0.16
4	6	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.01
5	6	-0.15	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	-0.17
6	6	-0.21	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01
7	6	-0.15	0.16	0.00	0.00	0.00	0.23	0.00	0.00	0.19
8	1	0.10	0.07	0.00	0.00	0.00	0.28	0.00	0.00	0.19
9	1	0.01	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	-0.08
10	1	-0.19	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.46	0.00	0.00	-0.39
11	1	-0.29	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	-0.08
12	1	-0.19	0.24	0.00	0.00	0.00	0.32	0.00	0.00	0.27
13	6	0.10	-0.15	0.01	0.03	0.01	-0.12	-0.13	-0.01	-0.07
14	6	0.11	-0.20	0.00	0.02	0.01	-0.16	-0.12	-0.04	0.10
15	6	0.10	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	0.18
16	6	0.11	-0.20	0.00	-0.02	-0.01	-0.16	0.12	0.04	0.10
17	6	0.10	-0.15	-0.01	-0.03	-0.01	-0.12	0.13	0.01	-0.07
18	7	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.15

19	1	0.11	-0.17	0.01	0.05	0.01	-0.10	-0.24	0.01	-0.13
20	1	0.12	-0.26	0.00	-0.05	-0.02	-0.17	0.23	0.06	0.17
21	1	0.11	-0.17	-0.01	-0.05	-0.01	-0.10	0.24	-0.01	-0.13
22	1	0.12	-0.26	0.00	0.05	0.02	-0.17	-0.23	-0.06	0.17
23	6	0.05	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.10
24	7	-0.02	0.29	0.00	0.00	0.00	0.36	0.00	0.00	-0.30

0 3 -596.941929

B	-0.76721800	1.20407700	0.30330400
C	-2.10246000	0.47578400	0.12943000
C	-2.39909600	-0.70550400	0.84639900
C	-3.63793000	-1.32759800	0.72762100
C	-4.61031500	-0.79749400	-0.12091500
C	-4.34104700	0.36897300	-0.83803100
C	-3.11210200	1.00556300	-0.70194700
H	-1.65647600	-1.13284000	1.51291000
H	-3.84511000	-2.22898500	1.29408000
H	-5.57343300	-1.28596200	-0.21695400
H	-5.09583700	0.78824000	-1.49412200
H	-2.92575100	1.92650400	-1.24418200
C	1.65755800	1.55706700	0.50680200
C	2.94680000	1.14477800	0.39152000
C	3.25476300	-0.16260600	-0.08324600
C	2.15657500	-0.99686600	-0.43521000
C	0.87707000	-0.55583500	-0.30930600
N	0.56976700	0.73184000	0.17350600
H	1.38474200	2.53996100	0.86317300
H	2.33195800	-1.99536000	-0.81482100
H	0.02376500	-1.15886600	-0.58091200
H	3.74179500	1.82542500	0.66678600
C	4.58792600	-0.60765700	-0.20659500
N	5.68508800	-0.97328700	-0.30802200

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		29.0937			48.1372			59.1648		
Red. masses --		4.7071			5.1499			4.8551		
Frc consts --		0.0023			0.0070			0.0100		
IR Inten --		0.9373			1.6085			0.2899		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.01	-0.13	0.01	-0.11	-0.03	0.01	-0.12	-0.06
2	6	0.00	0.00	-0.06	-0.02	-0.06	-0.02	-0.01	-0.08	-0.07
3	6	0.10	-0.09	-0.17	-0.08	-0.08	-0.07	-0.08	0.00	0.04
4	6	0.09	-0.09	-0.09	-0.13	0.02	-0.07	-0.14	0.10	0.14
5	6	-0.02	0.00	0.10	-0.12	0.13	-0.02	-0.13	0.12	0.14
6	6	-0.13	0.10	0.22	-0.05	0.14	0.03	-0.05	0.03	0.02
7	6	-0.12	0.09	0.14	0.00	0.05	0.03	0.01	-0.07	-0.09
8	1	0.19	-0.17	-0.32	-0.10	-0.16	-0.10	-0.09	0.00	0.04
9	1	0.18	-0.17	-0.18	-0.19	0.01	-0.11	-0.19	0.17	0.23
10	1	-0.03	0.00	0.17	-0.15	0.20	-0.02	-0.18	0.20	0.23
11	1	-0.22	0.17	0.37	-0.04	0.23	0.07	-0.04	0.03	0.01
12	1	-0.20	0.17	0.23	0.05	0.06	0.07	0.06	-0.13	-0.17
13	6	-0.01	0.03	-0.12	-0.01	-0.03	-0.07	-0.02	-0.09	0.08
14	6	0.00	0.02	-0.05	0.01	0.03	-0.10	0.00	-0.05	0.12
15	6	0.01	-0.01	0.02	0.06	0.00	0.02	0.05	0.01	-0.02
16	6	0.02	-0.01	-0.01	0.08	-0.11	0.20	0.09	0.03	-0.19
17	6	0.02	0.00	-0.08	0.06	-0.17	0.21	0.07	-0.01	-0.21
18	7	0.00	0.01	-0.12	0.02	-0.12	0.05	0.02	-0.08	-0.07
19	1	-0.02	0.04	-0.17	-0.05	0.00	-0.17	-0.06	-0.14	0.18
20	1	0.03	-0.02	0.02	0.12	-0.15	0.32	0.14	0.08	-0.30
21	1	0.03	0.00	-0.11	0.08	-0.25	0.33	0.10	0.00	-0.33
22	1	-0.01	0.02	-0.04	-0.02	0.11	-0.21	-0.03	-0.07	0.25
23	6	0.01	-0.03	0.12	0.08	0.09	-0.05	0.08	0.06	0.04
24	7	0.02	-0.04	0.21	0.11	0.19	-0.11	0.10	0.12	0.11
		4			5			6		
		A			A			A		

Frequencies --	91.4610	144.6704	191.2661
Red. masses --	5.9289	7.9418	6.6162
Frc consts --	0.0292	0.0979	0.1426
IR Inten --	3.8580	8.2810	0.6651

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.09	0.23	0.02	0.08	0.01	0.00	-0.02	-0.01
2	6	-0.01	-0.07	0.21	-0.02	0.16	0.09	-0.01	-0.03	0.14
3	6	-0.12	-0.09	0.14	0.04	0.15	0.09	-0.08	-0.03	0.11
4	6	-0.13	-0.04	-0.03	0.11	0.03	0.00	-0.07	-0.03	0.00
5	6	-0.02	0.02	-0.13	0.13	-0.06	-0.08	0.00	-0.02	-0.08
6	6	0.10	0.05	-0.04	0.04	0.00	-0.01	0.04	0.01	-0.01
7	6	0.10	0.00	0.13	-0.03	0.12	0.07	0.02	0.01	0.11
8	1	-0.21	-0.14	0.20	0.05	0.21	0.12	-0.12	-0.06	0.15
9	1	-0.23	-0.06	-0.10	0.16	0.00	-0.03	-0.12	-0.04	-0.04
10	1	-0.02	0.05	-0.26	0.19	-0.17	-0.17	0.02	-0.04	-0.19
11	1	0.19	0.10	-0.11	0.04	-0.06	-0.05	0.09	0.04	-0.05
12	1	0.19	0.02	0.19	-0.07	0.14	0.10	0.06	0.03	0.16
13	6	0.01	0.06	-0.17	0.00	-0.14	-0.04	0.00	0.07	-0.19
14	6	0.01	0.09	-0.23	-0.03	-0.21	-0.05	0.00	-0.04	0.16
15	6	0.01	0.05	-0.14	-0.10	-0.22	-0.06	0.01	-0.10	0.33
16	6	0.01	0.04	-0.12	-0.13	-0.17	-0.06	0.03	-0.03	0.12
17	6	0.01	0.02	-0.07	-0.12	-0.09	-0.05	0.03	0.07	-0.21
18	7	0.01	0.00	-0.01	-0.04	-0.07	-0.04	0.01	0.08	-0.26
19	1	0.01	0.07	-0.21	0.06	-0.12	-0.04	-0.01	0.13	-0.35
20	1	0.02	0.04	-0.12	-0.20	-0.18	-0.07	0.05	-0.05	0.16
21	1	0.01	0.01	-0.03	-0.15	-0.04	-0.04	0.04	0.13	-0.38
22	1	0.01	0.12	-0.32	0.01	-0.26	-0.05	-0.01	-0.05	0.22
23	6	0.01	0.00	0.04	-0.03	-0.04	-0.01	0.01	-0.04	0.15
24	7	0.01	-0.06	0.25	0.14	0.44	0.15	0.01	0.05	-0.25

40 bph-py(NH₂)

0 1 -560.013980

B -0.51212500 1.48751200 -0.12760200

C	-1.77746700	0.60288400	-0.03279000
C	-1.83260700	-0.54238800	0.79531800
C	-3.00532000	-1.27890300	0.93840900
C	-4.14500100	-0.92094700	0.21717700
C	-4.11186900	0.19096500	-0.62846400
C	-2.95492300	0.95565800	-0.72744800
H	-0.94763100	-0.84947700	1.34460300
H	-3.02983200	-2.14057400	1.59773000
H	-5.05631100	-1.50052100	0.31823200
H	-4.99815600	0.47190600	-1.18739400
H	-2.94434900	1.84889000	-1.34291700
C	1.09219400	-0.29765800	-0.85224400
C	2.35810400	-0.82865000	-0.92745500
C	3.38109200	-0.36300700	-0.08467400
C	3.03825500	0.67293800	0.81056500
C	1.79417500	1.24447900	0.77578200
N	0.78973400	0.78679300	-0.04889900
H	0.27427200	-0.68081500	-1.44497900
H	3.77297500	1.07221800	1.50036400
H	1.53906700	2.11768900	1.36000400
H	2.53811100	-1.64987400	-1.61264000
N	4.64895100	-0.92360900	-0.09216500
H	4.93137700	-1.40280000	-0.93363600
H	5.39051500	-0.37873300	0.32104700

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		35.9045			49.0449			60.1129		
Red. masses --		4.3195			4.9953			3.6246		
Frc consts --		0.0033			0.0071			0.0077		
IR Inten --		3.9869			5.2413			2.3957		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
	1 5	-0.01	0.01	-0.16	0.02	-0.16	-0.07	0.00	-0.03	-0.03

2	6	0.00	0.00	-0.08	-0.03	-0.09	-0.06	0.00	-0.02	-0.04
3	6	0.10	-0.06	-0.15	-0.09	-0.10	-0.08	-0.03	0.07	0.09
4	6	0.12	-0.06	-0.05	-0.16	0.01	-0.02	-0.05	0.11	0.16
5	6	0.03	0.00	0.12	-0.17	0.14	0.06	-0.03	0.04	0.09
6	6	-0.08	0.06	0.20	-0.11	0.16	0.08	0.01	-0.07	-0.05
7	6	-0.08	0.06	0.10	-0.03	0.04	0.02	0.02	-0.09	-0.11
8	1	0.17	-0.10	-0.28	-0.09	-0.20	-0.13	-0.04	0.12	0.13
9	1	0.19	-0.11	-0.11	-0.20	0.00	-0.04	-0.07	0.19	0.26
10	1	0.03	0.00	0.20	-0.22	0.24	0.11	-0.04	0.07	0.14
11	1	-0.15	0.11	0.33	-0.12	0.26	0.14	0.03	-0.12	-0.11
12	1	-0.15	0.10	0.15	0.02	0.05	0.04	0.04	-0.16	-0.21
13	6	0.06	0.06	-0.15	0.08	-0.14	0.05	0.06	0.09	-0.15
14	6	0.05	0.03	-0.04	0.13	-0.04	0.03	0.08	0.12	-0.14
15	6	-0.02	-0.02	0.08	0.11	0.07	-0.01	0.02	0.01	-0.01
16	6	-0.08	-0.03	0.06	0.03	0.04	0.00	-0.06	-0.12	0.11
17	6	-0.06	0.00	-0.04	-0.01	-0.06	0.01	-0.06	-0.13	0.11
18	7	0.00	0.03	-0.14	0.02	-0.14	0.01	0.00	-0.02	-0.02
19	1	0.11	0.09	-0.25	0.11	-0.22	0.07	0.11	0.16	-0.26
20	1	-0.13	-0.05	0.13	0.01	0.10	-0.01	-0.11	-0.22	0.22
21	1	-0.10	-0.01	-0.05	-0.07	-0.07	0.00	-0.10	-0.22	0.22
22	1	0.10	0.05	-0.05	0.19	-0.04	0.05	0.13	0.21	-0.24
23	7	-0.03	-0.07	0.20	0.17	0.20	-0.04	0.03	0.02	-0.01
24	1	0.04	-0.04	0.21	0.20	0.23	-0.05	0.09	0.16	-0.06
25	1	-0.06	-0.09	0.28	0.13	0.30	-0.08	-0.01	-0.01	0.11

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 126.4438

169.6538

244.1133

Red. masses -- 4.9222

4.7501

5.0033

Frc consts -- 0.0464

0.0806

0.1757

IR Inten -- 3.0025

13.7272

9.9692

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.02	-0.08	0.14	0.02	-0.01	-0.10	0.01	-0.01	0.10
2	6	-0.01	-0.09	0.15	-0.04	0.14	0.20	0.15	-0.13	0.06

3	6	-0.13	-0.10	0.13	-0.04	0.13	0.19	0.09	-0.18	0.01
4	6	-0.18	-0.05	0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	0.02
5	6	-0.11	0.01	-0.06	0.08	-0.09	-0.16	0.02	0.14	0.04
6	6	0.01	0.02	-0.04	0.04	0.01	-0.02	0.16	0.08	-0.03
7	6	0.04	-0.02	0.08	-0.02	0.14	0.17	0.23	-0.05	-0.01
8	1	-0.18	-0.15	0.19	-0.07	0.18	0.25	0.06	-0.26	0.01
9	1	-0.27	-0.05	0.01	0.02	-0.04	-0.07	-0.13	-0.01	0.03
10	1	-0.14	0.04	-0.14	0.15	-0.23	-0.36	-0.07	0.29	0.11
11	1	0.07	0.07	-0.11	0.08	-0.04	-0.10	0.20	0.16	-0.05
12	1	0.12	0.00	0.11	-0.03	0.18	0.23	0.35	-0.04	0.02
13	6	0.09	0.10	-0.15	0.02	-0.12	-0.09	-0.07	-0.01	-0.07
14	6	0.09	0.09	-0.10	0.05	-0.09	0.00	-0.11	-0.08	0.04
15	6	0.05	0.02	-0.01	0.00	-0.03	0.02	-0.14	-0.02	0.06
16	6	0.07	0.10	-0.11	-0.09	-0.07	0.02	-0.14	-0.04	0.07
17	6	0.07	0.11	-0.14	-0.09	-0.08	-0.07	-0.08	0.05	-0.07
18	7	0.04	0.04	-0.08	-0.03	-0.08	-0.15	0.00	0.05	-0.13
19	1	0.11	0.11	-0.18	0.06	-0.14	-0.13	-0.09	0.01	-0.06
20	1	0.07	0.14	-0.13	-0.15	-0.05	0.07	-0.15	-0.07	0.10
21	1	0.07	0.15	-0.20	-0.13	-0.07	-0.11	-0.12	0.09	-0.15
22	1	0.10	0.10	-0.11	0.11	-0.09	0.01	-0.07	-0.11	0.09
23	7	-0.01	-0.13	0.17	0.07	0.12	0.03	-0.08	0.15	-0.04
24	1	0.04	-0.20	0.22	0.15	0.21	0.00	-0.03	0.26	-0.08
25	1	0.00	-0.22	0.25	-0.01	0.25	0.02	-0.15	0.20	0.01

03 -560.027145

B	0.46266300	1.17340700	0.28651100
C	1.82755300	0.49001300	0.12850900
C	2.86622200	1.10307500	-0.60660000
C	4.12222300	0.51606700	-0.71901700
C	4.39271900	-0.69469700	-0.07925800
C	3.39141000	-1.31367000	0.67075400
C	2.13028900	-0.73434000	0.76948500
H	2.67741600	2.05483200	-1.09229400

H	4.89634600	1.00638500	-1.29973500
H	5.37474300	-1.14766700	-0.15839500
H	3.59590400	-2.25017200	1.17923700
H	1.36980700	-1.22987600	1.36522500
C	-1.12839200	-0.62911700	-0.36982500
C	-2.40077000	-1.10799000	-0.50476800
C	-3.52321500	-0.33697800	-0.13316500
C	-3.25578900	0.96215300	0.36072900
C	-1.98004700	1.42489200	0.49119600
N	-0.85432900	0.65520200	0.14601400
H	-0.26110900	-1.20030400	-0.66366000
H	-4.07028200	1.61968300	0.64457600
H	-1.75227600	2.41116900	0.86869700
H	-2.53110700	-2.10243900	-0.91862200
N	-4.83024600	-0.79122700	-0.33103100
H	-4.94098000	-1.79497900	-0.36219000
H	-5.53295100	-0.35793600	0.25149600

1	2	3
A	A	A

Frequencies --	29.4728	51.4909	63.9356
Red. masses --	4.1192	4.0883	4.6170
Frc consts --	0.0021	0.0064	0.0111
IR Inten --	0.5619	0.7162	0.3069

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.01	-0.14	0.00	0.10	-0.03	0.00	-0.13	-0.09
2	6	0.00	0.00	-0.07	-0.01	0.06	-0.02	0.01	-0.09	-0.09
3	6	0.10	0.09	0.13	0.02	-0.03	-0.04	0.00	-0.06	-0.09
4	6	0.11	0.09	0.21	-0.01	-0.11	0.00	0.06	0.05	0.03
5	6	0.02	0.01	0.09	-0.08	-0.09	0.06	0.14	0.13	0.15
6	6	-0.07	-0.08	-0.11	-0.12	0.00	0.08	0.14	0.09	0.13
7	6	-0.08	-0.08	-0.19	-0.09	0.07	0.04	0.08	-0.02	0.00
8	1	0.16	0.15	0.23	0.08	-0.04	-0.09	-0.05	-0.11	-0.17
9	1	0.18	0.16	0.36	0.03	-0.18	-0.01	0.05	0.07	0.04

10	1	0.03	0.01	0.15	-0.10	-0.15	0.09	0.19	0.22	0.26
11	1	-0.14	-0.14	-0.20	-0.18	0.01	0.12	0.20	0.15	0.21
12	1	-0.15	-0.15	-0.33	-0.13	0.14	0.04	0.09	-0.05	-0.01
13	6	-0.03	-0.02	-0.03	0.05	0.14	-0.22	-0.10	-0.03	-0.16
14	6	-0.03	-0.03	0.06	0.07	0.07	-0.16	-0.13	0.03	-0.12
15	6	-0.01	-0.01	0.07	0.05	-0.05	0.03	-0.08	0.04	0.02
16	6	0.00	0.02	-0.03	0.01	-0.07	0.12	0.01	-0.01	0.12
17	6	0.01	0.03	-0.12	-0.01	0.00	0.06	0.03	-0.07	0.07
18	7	0.00	0.01	-0.10	0.01	0.09	-0.07	-0.02	-0.09	-0.07
19	1	-0.04	-0.03	-0.04	0.07	0.23	-0.36	-0.14	-0.04	-0.26
20	1	0.02	0.04	-0.05	-0.01	-0.15	0.24	0.05	-0.01	0.24
21	1	0.02	0.06	-0.20	-0.04	-0.02	0.13	0.10	-0.12	0.15
22	1	-0.05	-0.05	0.12	0.10	0.11	-0.27	-0.20	0.07	-0.20
23	7	-0.02	-0.04	0.18	0.07	-0.13	0.13	-0.11	0.12	0.07
24	1	-0.02	-0.04	0.25	0.14	-0.14	0.05	-0.16	0.13	-0.03
25	1	0.01	0.00	0.18	0.10	-0.24	0.25	-0.05	0.09	0.17

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	106.5680	193.1295	228.2458
Red. masses --	4.7715	4.7357	1.0559
Frc consts --	0.0319	0.1041	0.0324
IR Inten --	1.6603	0.6835	17.0212

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.09	0.20	-0.01	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.01
2	6	0.00	-0.08	0.18	0.08	0.18	0.11	0.01	0.01	0.00
3	6	-0.08	-0.01	0.11	0.11	0.15	0.13	0.01	0.00	0.01
4	6	-0.07	0.04	-0.03	0.03	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00
5	6	0.03	0.02	-0.10	-0.08	-0.10	-0.14	0.00	-0.01	-0.01
6	6	0.12	-0.03	-0.02	-0.06	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
7	6	0.11	-0.08	0.13	0.03	0.19	0.15	0.01	0.01	0.01
8	1	-0.17	-0.01	0.16	0.17	0.18	0.17	0.01	0.01	0.01
9	1	-0.15	0.08	-0.10	0.04	-0.09	-0.06	0.01	-0.01	0.00
10	1	0.03	0.06	-0.22	-0.17	-0.26	-0.32	0.00	-0.02	-0.02

11	1	0.21	-0.04	-0.07	-0.12	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
12	1	0.18	-0.13	0.18	0.02	0.27	0.21	0.01	0.01	0.01
13	6	-0.02	0.05	-0.15	-0.03	-0.14	-0.07	-0.01	0.00	-0.01
14	6	-0.02	0.04	-0.10	-0.08	-0.08	-0.03	0.00	0.01	-0.02
15	6	-0.01	0.02	-0.01	-0.03	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00
16	6	-0.01	0.07	-0.15	0.06	-0.05	0.02	-0.01	-0.01	0.02
17	6	-0.01	0.08	-0.19	0.07	-0.12	-0.03	0.00	0.00	0.01
18	7	-0.01	0.02	-0.06	0.04	-0.14	-0.09	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.02	0.07	-0.19	-0.07	-0.19	-0.07	-0.01	0.01	-0.03
20	1	-0.01	0.10	-0.22	0.10	-0.02	0.07	0.00	-0.02	0.07
21	1	-0.01	0.11	-0.28	0.13	-0.13	-0.02	0.00	-0.01	0.03
22	1	-0.03	0.05	-0.11	-0.14	-0.08	-0.02	-0.01	0.03	-0.07
23	7	-0.02	-0.06	0.21	-0.09	0.13	0.04	0.01	-0.04	-0.01
24	1	0.03	-0.07	0.30	-0.20	0.14	-0.10	-0.08	-0.05	0.69
25	1	0.05	-0.07	0.29	0.01	0.12	0.16	-0.10	0.46	-0.52

41 bph-nhc(NO₂)₂

0 1 -891.612212

B	1.59668200	-0.00028900	0.00011700
N	-0.68099200	1.10666200	0.28703700
C	-1.98812400	0.70943900	0.10916200
C	-1.98823100	-0.70960000	-0.10899600
N	-0.68117600	-1.10690700	-0.28712800
C	0.18494200	-0.00020100	-0.00002900
N	-3.05347300	1.45235300	0.10705300
O	-4.25262300	0.59660800	-0.36107400
O	-3.22129400	2.67247400	0.19232900
N	-3.05372200	-1.45230000	-0.10707900
O	-3.22195100	-2.67232300	-0.19257300
O	-4.25275000	-0.59607300	0.36133200
H	-0.42413400	2.04616700	0.01854800
H	-0.42428600	-2.04655200	-0.01918000
C	3.09380200	-0.00015100	0.00007600

C	3.82350600	0.29033100	-1.17899000
C	3.82368400	-0.29048300	1.17906500
C	5.21207700	0.28511900	-1.17893900
H	3.28290700	0.51691900	-2.09063300
C	5.21225300	-0.28499800	1.17886900
H	3.28322100	-0.51718100	2.09076100
C	5.90419200	0.00012600	-0.00007200
H	5.75786800	0.50521700	-2.08898800
H	5.75818100	-0.50498500	2.08886200
H	6.98870000	0.00023400	-0.00012600

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		29.5813			32.2256			36.8786		
Red. masses --		6.4023			4.3285			7.0349		
Frc consts --		0.0033			0.0026			0.0056		
IR Inten --		0.7835			0.1090			0.6286		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.06	-0.26	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.24	-0.06
2	7	0.01	0.04	-0.19	0.00	-0.01	0.04	0.08	-0.15	-0.05
3	6	0.00	0.02	-0.06	0.00	0.00	0.03	0.05	-0.06	-0.01
4	6	0.00	0.02	-0.06	0.00	0.00	-0.03	-0.05	-0.06	-0.01
5	7	-0.01	0.04	-0.19	0.00	0.01	-0.04	-0.08	-0.15	-0.05
6	6	0.00	0.05	-0.22	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.21	-0.07
7	7	-0.02	-0.01	0.05	0.00	-0.01	0.07	0.10	0.01	0.01
8	8	-0.05	-0.03	0.17	0.00	0.02	0.03	0.03	0.10	0.05
9	8	-0.04	-0.01	0.08	0.00	-0.01	0.13	0.20	0.03	0.01
10	7	0.02	-0.01	0.05	0.00	0.01	-0.07	-0.10	0.01	0.01
11	8	0.04	-0.01	0.08	0.00	0.01	-0.13	-0.20	0.03	0.01
12	8	0.05	-0.03	0.17	0.00	-0.02	-0.03	-0.03	0.10	0.05
13	1	-0.03	0.04	-0.22	0.00	0.00	0.08	0.13	-0.17	-0.07
14	1	0.03	0.04	-0.22	0.00	0.00	-0.08	-0.13	-0.17	-0.07
15	6	0.00	0.02	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.04

16	6	0.14	0.00	-0.04	0.00	-0.22	-0.06	0.00	-0.02	-0.01
17	6	-0.14	0.00	-0.04	0.00	0.22	0.06	0.00	-0.02	-0.01
18	6	0.14	-0.04	0.12	0.00	-0.24	-0.06	0.00	0.18	0.04
19	1	0.25	0.02	-0.10	0.00	-0.38	-0.10	0.00	-0.10	-0.03
20	6	-0.14	-0.04	0.12	0.00	0.24	0.06	0.00	0.18	0.04
21	1	-0.25	0.02	-0.10	0.00	0.39	0.10	0.00	-0.10	-0.03
22	6	0.00	-0.06	0.20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.29	0.07
23	1	0.25	-0.05	0.18	0.00	-0.43	-0.10	0.00	0.27	0.07
24	1	-0.25	-0.05	0.18	0.00	0.43	0.10	-0.01	0.27	0.07
25	1	0.00	-0.09	0.32	0.00	0.00	0.00	0.00	0.46	0.11

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	80.9900	108.1912	140.2705
Red. masses --	6.3886	13.6056	6.0055
Frc consts --	0.0247	0.0938	0.0696
IR Inten --	2.6666	2.9735	4.5425

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.08	-0.28	0.00	-0.07	-0.02	0.00	-0.08	0.00
2	7	-0.01	-0.04	0.26	0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.10	0.05
3	6	0.00	-0.03	0.12	0.01	0.07	-0.19	-0.02	0.09	0.04
4	6	0.00	-0.03	0.12	-0.01	0.07	-0.19	0.02	0.09	0.04
5	7	0.01	-0.04	0.26	-0.01	0.00	-0.03	0.01	0.10	0.05
6	6	0.00	-0.01	0.12	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.10	0.05
7	7	0.02	-0.01	-0.01	-0.02	0.03	0.02	-0.05	0.04	-0.01
8	8	0.04	0.01	-0.11	0.09	0.02	-0.32	-0.04	-0.05	0.04
9	8	0.03	0.00	-0.02	-0.13	-0.02	0.50	-0.15	0.03	-0.08
10	7	-0.02	-0.01	-0.01	0.02	0.03	0.02	0.05	0.04	-0.01
11	8	-0.03	0.00	-0.02	0.13	-0.02	0.50	0.15	0.03	-0.08
12	8	-0.04	0.01	-0.11	-0.09	0.02	-0.32	0.04	-0.05	0.04
13	1	-0.01	-0.03	0.31	0.10	0.02	0.16	-0.01	0.10	0.05
14	1	0.01	-0.03	0.31	-0.10	0.02	0.16	0.01	0.10	0.05
15	6	0.00	0.04	-0.22	0.00	-0.10	-0.03	0.00	-0.31	-0.07
16	6	0.13	0.03	-0.14	0.00	-0.07	-0.02	0.00	-0.24	-0.05

17	6	-0.13	0.03	-0.14	0.00	-0.07	-0.02	0.00	-0.24	-0.05
18	6	0.13	0.00	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.04	0.01
19	1	0.23	0.04	-0.20	0.00	-0.10	-0.03	-0.01	-0.34	-0.08
20	6	-0.13	0.00	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.04	0.01
21	1	-0.23	0.04	-0.20	0.00	-0.10	-0.03	0.01	-0.34	-0.08
22	6	0.00	-0.01	0.09	0.00	0.08	0.01	0.00	0.23	0.05
23	1	0.23	-0.01	0.07	0.00	0.06	0.01	-0.01	0.14	0.03
24	1	-0.23	-0.01	0.07	0.00	0.06	0.01	0.01	0.14	0.03
25	1	0.00	-0.02	0.20	0.00	0.16	0.03	0.00	0.51	0.12

0 3 -891.7036886

B	-1.49836000	0.00000300	-0.25754700
N	0.71656000	-1.13663700	-0.59101100
C	2.01981200	-0.71288300	-0.21795800
C	2.01981300	0.71289400	-0.21794800
N	0.71656600	1.13666000	-0.59101800
C	-0.08366900	0.00001100	-0.47520200
N	3.00004300	-1.53265300	0.08590000
O	4.17126400	-0.99105500	0.42287400
O	2.84178500	-2.79957900	0.06879000
N	3.00004200	1.53265100	0.08594400
O	2.84183000	2.79958000	0.06875600
O	4.17122000	0.99102700	0.42304800
H	0.38614500	-1.94779300	-0.06226600
H	0.38614900	1.94781100	-0.06226800
C	-2.97812700	-0.00000200	-0.05241900
C	-3.84431600	-0.00025300	-1.16724900
C	-3.50709700	0.00015700	1.25626100
C	-5.21714700	0.00015700	-0.96720200
H	-3.44466300	0.00018400	-2.17256900
C	-4.88226400	-0.00015700	1.43900800
H	-2.84857100	0.00020500	2.11468700
C	-5.73456000	-0.00004000	0.33128000

H	-5.88496900	0.00041500	-1.81835600
H	-5.29173300	-0.00034600	2.44036600
H	-6.80651000	0.00026400	0.48026800

42 bph-nhc(CN)₂

0 1 -667.129218

B	-0.93338100	-0.00033200	0.10879300
N	1.34426200	1.12893100	-0.25555300
C	2.65556300	0.68014900	-0.03688100
C	2.65576600	-0.68009400	-0.03748700
N	1.34442700	-1.12904600	-0.25656400
C	0.46108400	-0.00015900	-0.12396000
H	1.07112700	2.01057700	0.15313400
H	1.07156400	-2.01065000	0.15244600
C	3.75044700	1.56428500	0.05283300
C	3.75084400	-1.56404000	0.05139400
N	4.62389000	2.31729000	0.14563600
N	4.62443300	-2.31696700	0.14352200
C	-2.43742600	-0.00017900	0.07442400
C	-3.20499600	-0.00142400	1.26414200
C	-3.13473800	0.00123100	-1.15884300
C	-4.59374500	-0.00133700	1.22410100
H	-2.69058400	-0.00245800	2.21819800
C	-4.52371300	0.00144700	-1.19888300
H	-2.56643600	0.00216000	-2.08175100
C	-5.25148900	0.00013900	-0.00749600
H	-5.16605200	-0.00233200	2.14465400
H	-5.04171000	0.00257600	-2.15110800
H	-6.33566400	0.00023000	-0.03888400

1

2

3

A

A

A

Frequencies --

24.0732

28.3375

37.5896

Red. masses --	4.4796	6.2785	6.9492
Frc consts --	0.0015	0.0030	0.0058
IR Inten --	0.0017	1.1065	0.3356

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.31	0.00	-0.26	0.00
2	7	0.01	0.02	0.06	0.02	0.00	-0.15	-0.09	-0.15	0.00
3	6	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.02	-0.05	-0.05	0.00
4	6	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.02	0.05	-0.05	0.00
5	7	-0.01	0.02	-0.06	0.02	0.00	-0.15	0.09	-0.15	0.00
6	6	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.20	0.00	-0.22	0.00
7	1	0.01	0.00	0.10	-0.01	0.00	-0.16	-0.15	-0.17	-0.01
8	1	-0.01	0.00	-0.10	-0.01	0.00	-0.16	0.15	-0.17	0.00
9	6	0.01	-0.01	0.10	0.00	0.00	0.10	-0.13	0.05	0.02
10	6	-0.01	-0.01	-0.10	-0.01	0.00	0.10	0.13	0.05	-0.02
11	7	0.01	-0.01	0.16	-0.02	0.00	0.20	-0.21	0.13	0.03
12	7	-0.01	-0.01	-0.16	-0.02	0.00	0.20	0.20	0.13	-0.03
13	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.00	-0.14	0.00
14	6	0.00	0.23	0.00	0.15	0.00	-0.05	0.00	-0.01	0.00
15	6	0.00	-0.22	0.00	-0.15	0.00	-0.06	0.00	-0.05	0.00
16	6	0.00	0.23	0.00	0.14	0.00	0.12	0.00	0.20	0.00
17	1	0.00	0.39	0.00	0.26	0.00	-0.11	0.00	-0.08	0.00
18	6	0.00	-0.26	0.00	-0.16	0.00	0.11	0.00	0.16	0.00
19	1	0.00	-0.38	0.00	-0.27	0.00	-0.13	0.00	-0.14	0.00
20	6	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.20	0.00	0.29	0.00
21	1	0.00	0.41	0.00	0.25	0.00	0.19	0.00	0.30	0.00
22	1	0.00	-0.45	0.00	-0.27	0.00	0.17	0.00	0.23	0.00
23	1	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.33	0.00	0.46	0.00

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	75.7413	108.0289	128.6520
Red. masses --	6.7462	12.5350	6.0547
Frc consts --	0.0228	0.0862	0.0590
IR Inten --	10.5272	4.7170	0.4729

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.05	0.00	-0.27	0.05	0.00	-0.09	0.00	-0.11	0.00
2	7	0.01	0.02	0.25	0.07	-0.01	0.10	-0.02	0.12	0.14
3	6	0.02	0.00	0.13	0.08	0.00	0.07	0.00	0.11	0.06
4	6	0.02	0.00	0.13	0.08	0.00	0.07	0.00	0.11	-0.06
5	7	0.01	-0.02	0.25	0.07	0.01	0.10	0.02	0.12	-0.14
6	6	0.00	0.00	0.13	0.07	0.00	0.06	0.00	0.08	0.00
7	1	0.03	-0.03	0.37	0.08	-0.01	0.11	-0.04	0.05	0.28
8	1	0.03	0.03	0.37	0.08	0.01	0.11	0.04	0.05	-0.28
9	6	0.06	-0.03	-0.02	-0.05	0.17	0.00	0.05	0.05	0.00
10	6	0.06	0.03	-0.02	-0.05	-0.17	0.00	-0.05	0.05	0.00
11	7	0.11	-0.07	-0.17	-0.32	0.51	-0.09	0.17	-0.07	-0.12
12	7	0.11	0.07	-0.17	-0.32	-0.51	-0.09	-0.17	-0.07	0.12
13	6	-0.06	0.00	-0.18	0.06	0.00	-0.07	0.00	-0.28	0.00
14	6	0.04	0.00	-0.12	0.10	0.00	-0.04	0.00	-0.20	0.00
15	6	-0.16	0.00	-0.12	0.02	0.00	-0.05	0.00	-0.21	0.00
16	6	0.04	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00
17	1	0.12	0.00	-0.16	0.14	0.00	-0.06	0.00	-0.29	0.00
18	6	-0.17	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00
19	1	-0.24	0.00	-0.17	-0.01	0.00	-0.07	0.00	-0.30	0.00
20	6	-0.07	0.00	0.06	0.06	0.00	0.02	0.00	0.20	0.00
21	1	0.12	0.00	0.05	0.13	0.00	0.02	0.00	0.17	0.00
22	1	-0.25	0.00	0.04	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.11	0.00
23	1	-0.07	0.00	0.15	0.06	0.00	0.06	0.00	0.45	0.00

03 -667.128493

B	-0.93629800	-1.26965500	0.12158000
N	1.64480500	-1.41982400	0.21481000
C	2.73301500	-0.58483500	0.07654400
C	2.24345300	0.68166600	-0.14426700
N	0.86668200	0.58701700	-0.13366400
C	0.43960600	-0.72966500	0.08140600
H	1.68803600	-2.41407200	0.37797200

H	0.23020100	1.34995100	-0.30591000
C	4.07157700	-1.02196500	0.16075100
C	2.94599700	1.88767900	-0.34789700
N	5.16002500	-1.40413000	0.23333700
N	3.49512900	2.89078700	-0.51758200
C	-2.31264300	-0.60679700	0.07402800
C	-2.66055300	0.43086700	0.97335400
C	-3.30457300	-1.01383700	-0.84810600
C	-3.91551400	1.03112900	0.94218100
H	-1.94023200	0.75547100	1.71869700
C	-4.55431400	-0.40569500	-0.88616400
H	-3.08324400	-1.81926200	-1.54041900
C	-4.86756100	0.61929300	0.00868300
H	-4.15374900	1.82018900	1.64757200
H	-5.29164300	-0.73499600	-1.61043800
H	-5.84530900	1.08701200	-0.01676200

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		19.6881			35.2070			40.3444		
Red. masses --		4.3181			6.5162			7.3516		
Frc consts --		0.0010			0.0048			0.0071		
IR Inten --		0.1337			0.4051			0.8134		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.06	-0.05	0.01	0.18	-0.05	0.00	-0.02	-0.23
2	7	0.00	-0.03	-0.05	-0.02	0.08	-0.04	0.00	-0.01	-0.12
3	6	-0.01	-0.01	-0.02	0.03	0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.01
4	6	-0.03	0.00	0.04	0.11	0.05	0.00	0.00	-0.01	-0.09
5	7	-0.03	-0.02	0.04	0.10	0.14	-0.01	0.00	-0.03	-0.24
6	6	-0.01	-0.04	-0.02	0.02	0.16	-0.04	0.00	-0.02	-0.22
7	1	0.02	-0.04	-0.11	-0.09	0.08	-0.06	-0.01	0.00	-0.03
8	1	-0.04	-0.03	0.07	0.15	0.18	-0.01	0.01	-0.03	-0.28
9	6	0.00	0.01	-0.04	0.00	-0.07	-0.01	-0.01	0.03	0.20

10	6	-0.05	0.02	0.10	0.19	0.01	0.04	0.01	0.00	-0.04
11	7	0.00	0.02	-0.06	-0.03	-0.15	-0.02	-0.01	0.06	0.40
12	7	-0.06	0.04	0.16	0.27	-0.03	0.07	0.02	0.00	0.00
13	6	0.01	-0.03	-0.03	-0.04	0.08	-0.03	0.00	-0.01	-0.12
14	6	0.13	0.13	-0.17	-0.10	0.10	-0.07	0.10	-0.04	-0.04
15	6	-0.09	-0.15	0.13	-0.05	-0.07	0.05	-0.10	0.04	-0.03
16	6	0.15	0.17	-0.16	-0.17	-0.04	-0.03	0.10	-0.04	0.13
17	1	0.20	0.22	-0.28	-0.09	0.22	-0.13	0.18	-0.08	-0.10
18	6	-0.07	-0.11	0.13	-0.12	-0.21	0.09	-0.11	0.04	0.14
19	1	-0.17	-0.27	0.24	-0.01	-0.09	0.09	-0.18	0.07	-0.09
20	6	0.05	0.05	-0.01	-0.18	-0.20	0.05	-0.01	0.00	0.22
21	1	0.24	0.30	-0.27	-0.21	-0.03	-0.06	0.18	-0.07	0.19
22	1	-0.14	-0.20	0.26	-0.13	-0.34	0.15	-0.19	0.07	0.21
23	1	0.07	0.08	0.00	-0.23	-0.31	0.09	-0.01	-0.01	0.35

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	102.0026	106.0889	140.8170
Red. masses --	7.8202	12.9488	7.5326
Frc consts --	0.0479	0.0859	0.0880
IR Inten --	4.6957	3.9159	4.9258

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	-0.03	-0.26	-0.08	-0.06	-0.02	0.02	-0.11	0.00
2	7	-0.01	0.05	0.20	-0.06	-0.06	0.04	-0.04	0.14	-0.07
3	6	0.00	0.04	0.18	-0.07	-0.05	0.03	-0.08	0.16	-0.05
4	6	0.00	0.05	0.21	-0.08	-0.05	0.04	-0.09	0.16	0.00
5	7	0.00	0.06	0.28	-0.08	-0.05	0.05	-0.11	0.13	0.03
6	6	0.00	0.03	0.10	-0.07	-0.06	0.02	-0.06	0.09	-0.02
7	1	-0.01	0.02	0.03	-0.06	-0.07	0.01	-0.02	0.13	-0.10
8	1	0.01	0.03	0.13	-0.09	-0.06	0.03	-0.13	0.12	0.06
9	6	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.18	-0.03	-0.11	0.07	-0.01
10	6	-0.01	0.01	-0.01	0.09	-0.16	0.03	0.01	0.10	-0.01
11	7	-0.02	-0.07	-0.13	0.16	0.63	-0.12	-0.21	-0.18	0.07
12	7	-0.02	-0.02	-0.29	0.47	-0.37	0.03	0.29	-0.06	-0.04

13	6	0.02	-0.01	-0.25	-0.07	-0.03	-0.02	-0.02	-0.23	0.08
14	6	0.12	-0.05	-0.16	-0.04	-0.03	-0.02	0.05	-0.21	0.08
15	6	-0.08	0.04	-0.16	-0.09	0.00	-0.02	-0.03	-0.16	0.07
16	6	0.11	-0.07	0.04	-0.02	0.01	0.00	0.14	-0.04	-0.01
17	1	0.21	-0.09	-0.23	-0.02	-0.05	-0.02	0.06	-0.30	0.12
18	6	-0.10	0.03	0.03	-0.08	0.04	0.00	0.06	0.01	-0.02
19	1	-0.16	0.08	-0.24	-0.13	-0.01	-0.02	-0.08	-0.20	0.09
20	6	0.00	-0.04	0.14	-0.04	0.05	0.00	0.16	0.10	-0.09
21	1	0.19	-0.11	0.11	0.01	0.01	0.00	0.20	0.00	-0.03
22	1	-0.18	0.06	0.11	-0.09	0.06	0.00	0.05	0.10	-0.06
23	1	-0.02	-0.06	0.30	-0.03	0.08	0.01	0.24	0.26	-0.19

43 bph-nhcCN

0 1 -574.866684

B	0.42286500	0.32059600	0.20706900
N	-1.96523900	-0.64158700	0.21433600
C	-3.23301700	-0.00926500	0.01296800
C	-3.03185500	1.15183600	-0.64862500
N	-1.67868200	1.31351600	-0.86385600
C	-0.95629300	0.31386000	-0.14299300
H	-1.84232500	-1.11948000	1.09494700
H	-1.27686700	2.21613700	-1.05559900
C	-4.44928900	-0.62782300	0.35554000
N	-5.44007400	-1.14254200	0.66671900
C	1.91288100	0.09181100	0.13355600
C	2.46684000	-0.75764100	-0.85581700
C	2.80618400	0.69997200	1.04741500
C	3.83485500	-0.99683800	-0.91706600
H	1.80339500	-1.22660000	-1.57338700
C	4.17694300	0.48409900	0.96889300
H	2.40244100	1.34294400	1.82109700
C	4.69008800	-0.37006500	-0.00903300
H	4.23897000	-1.65811300	-1.67535100

H	4.84587100	0.96618000	1.67282600
H	5.75868200	-0.54816500	-0.06309800
H	-3.76054600	1.83874600	-1.04620400

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		20.4770			27.6094			41.2899		
Red. masses --		4.4619			5.5519			6.5002		
Frc consts --		0.0011			0.0025			0.0065		
IR Inten --		4.3230			5.4191			1.0581		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	-0.08	-0.05	0.00	-0.18	-0.27	0.00	-0.21	0.16
2	7	-0.01	-0.02	-0.08	-0.04	-0.07	-0.12	-0.09	-0.08	0.10
3	6	-0.01	0.01	0.01	-0.03	0.02	0.04	-0.03	0.00	0.00
4	6	-0.01	0.10	0.17	-0.03	0.06	0.10	0.10	-0.03	-0.03
5	7	-0.01	0.12	0.18	-0.04	0.01	-0.02	0.12	-0.14	0.05
6	6	-0.01	0.01	0.02	-0.02	-0.08	-0.13	0.00	-0.18	0.12
7	1	-0.01	-0.11	-0.12	0.00	-0.10	-0.15	-0.17	-0.06	0.13
8	1	0.00	0.14	0.27	-0.02	0.02	0.06	0.20	-0.19	0.01
9	6	-0.01	-0.03	-0.07	-0.03	0.07	0.11	-0.11	0.12	-0.06
10	7	-0.02	-0.07	-0.14	-0.03	0.11	0.17	-0.18	0.23	-0.12
11	6	0.01	-0.04	-0.03	0.01	-0.09	-0.13	0.01	-0.13	0.09
12	6	0.02	-0.17	0.09	0.17	-0.02	-0.10	0.03	-0.05	0.03
13	6	0.00	0.12	-0.14	-0.12	-0.07	-0.01	0.01	-0.04	0.03
14	6	0.02	-0.16	0.12	0.19	0.07	0.03	0.05	0.13	-0.09
15	1	0.03	-0.28	0.15	0.28	-0.03	-0.19	0.03	-0.11	0.08
16	6	0.01	0.17	-0.14	-0.10	0.02	0.12	0.03	0.13	-0.09
17	1	0.00	0.21	-0.21	-0.24	-0.12	-0.03	-0.01	-0.10	0.07
18	6	0.02	0.01	0.00	0.06	0.09	0.15	0.05	0.22	-0.15
19	1	0.03	-0.28	0.23	0.31	0.12	0.05	0.07	0.19	-0.14
20	1	0.01	0.30	-0.23	-0.20	0.04	0.21	0.03	0.21	-0.14
21	1	0.02	0.03	0.02	0.07	0.16	0.25	0.07	0.36	-0.25
22	1	-0.01	0.16	0.28	-0.03	0.12	0.22	0.17	0.01	-0.09

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		88.9717			134.0158			185.2014		
Red. masses --		5.0043			6.2421			7.8777		
Frc consts --		0.0233			0.0661			0.1592		
IR Inten --		8.6525			6.0708			2.3886		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.04	-0.03	-0.17	-0.03	-0.08	0.00	-0.02	0.02	0.02
2	7	-0.02	0.14	0.35	-0.05	0.16	0.03	-0.02	0.00	0.00
3	6	-0.04	0.04	0.11	-0.03	0.14	-0.08	0.04	0.24	0.37
4	6	-0.05	-0.04	-0.04	-0.01	0.11	-0.12	0.08	0.15	0.22
5	7	-0.05	0.01	0.04	0.01	0.10	-0.05	0.06	-0.20	-0.27
6	6	-0.02	0.08	0.10	-0.02	0.11	-0.01	0.02	-0.14	-0.14
7	1	-0.05	0.45	0.52	-0.10	0.24	0.09	0.12	-0.15	-0.10
8	1	-0.08	-0.01	-0.10	0.02	0.10	-0.06	0.17	-0.26	-0.35
9	6	-0.05	-0.03	-0.04	0.04	0.03	-0.02	0.03	0.12	0.14
10	7	-0.07	-0.08	-0.19	0.22	-0.23	0.12	0.07	-0.19	-0.26
11	6	0.04	-0.01	-0.12	-0.05	-0.24	0.11	-0.03	0.02	0.01
12	6	0.10	0.00	-0.10	-0.01	-0.19	0.09	-0.06	0.01	0.01
13	6	-0.01	-0.02	-0.07	-0.08	-0.18	0.09	-0.04	0.03	0.01
14	6	0.11	-0.01	-0.02	0.02	0.02	-0.02	-0.06	0.01	0.00
15	1	0.15	0.00	-0.14	0.00	-0.27	0.13	-0.07	0.01	0.03
16	6	-0.01	-0.04	0.03	-0.05	0.04	-0.02	-0.04	0.00	0.01
17	1	-0.05	-0.02	-0.09	-0.12	-0.25	0.13	-0.04	0.04	-0.01
18	6	0.05	-0.03	0.05	0.00	0.17	-0.11	-0.06	0.00	0.00
19	1	0.15	0.00	0.00	0.06	0.10	-0.07	-0.06	0.01	-0.01
20	1	-0.05	-0.05	0.08	-0.07	0.12	-0.06	-0.03	0.00	0.01
21	1	0.05	-0.04	0.12	0.03	0.37	-0.23	-0.06	0.00	0.00
22	1	-0.06	-0.15	-0.20	0.02	0.09	-0.20	0.10	0.21	0.28

0 3 -574.870641

B	0.50409700	-1.34238200	0.20055400
N	-1.52257200	0.26052000	-0.10925700

C	-2.91589500	0.16445400	-0.07966200
C	-3.21237900	-1.13325900	0.23262000
N	-2.03119200	-1.79751900	0.38012500
C	-0.92780100	-0.96827200	0.16792500
H	-0.99914700	1.08243800	-0.36432300
H	-1.92495300	-2.77333000	0.60862300
C	-3.78551200	1.24421300	-0.32709500
N	-4.48591300	2.14242200	-0.53473600
C	1.79992500	-0.53744000	0.09206700
C	2.83401800	-0.90182700	-0.80173800
C	2.03328600	0.59665300	0.90865300
C	4.01199600	-0.16854800	-0.89078800
H	2.70202700	-1.77535300	-1.43162400
C	3.21642200	1.32438900	0.82669300
H	1.27882500	0.89799600	1.62944200
C	4.21145400	0.94844500	-0.07685900
H	4.78267500	-0.47066000	-1.59211500
H	3.36524800	2.18592500	1.46930600
H	5.13355900	1.51508100	-0.14194600
H	-4.17406200	-1.60100000	0.35604200

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		25.2785			36.8894			68.8891		
Red. masses --		4.2815			6.6411			4.2284		
Frc consts --		0.0016			0.0053			0.0118		
IR Inten --		0.3423			0.5697			3.2648		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.06	-0.08	0.01	-0.18	0.09	0.00	-0.03	-0.17
2	7	0.03	-0.01	0.02	0.12	-0.10	0.04	0.00	-0.05	-0.21
3	6	0.02	0.01	0.02	0.11	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03
4	6	0.01	0.00	-0.04	0.01	0.03	0.00	0.01	0.06	0.26
5	7	0.00	-0.03	-0.09	-0.04	-0.06	0.04	0.01	0.04	0.16

6	6	0.01	-0.04	-0.05	0.02	-0.13	0.06	0.00	-0.02	-0.10
7	1	0.03	-0.01	0.04	0.19	-0.14	0.05	0.00	-0.09	-0.36
8	1	-0.02	-0.04	-0.14	-0.12	-0.06	0.05	0.01	0.08	0.32
9	6	0.04	0.04	0.09	0.21	0.07	-0.04	0.01	0.01	0.00
10	7	0.06	0.06	0.15	0.30	0.13	-0.08	0.01	0.00	-0.02
11	6	-0.01	-0.03	-0.04	-0.04	-0.10	0.05	-0.01	-0.02	-0.14
12	6	0.11	-0.12	0.14	-0.07	0.04	-0.04	0.06	0.04	-0.08
13	6	-0.14	0.10	-0.18	-0.10	-0.10	0.07	-0.08	-0.06	-0.06
14	6	0.09	-0.09	0.16	-0.15	0.17	-0.10	0.07	0.05	0.06
15	1	0.21	-0.22	0.25	-0.03	0.05	-0.06	0.12	0.08	-0.15
16	6	-0.16	0.13	-0.15	-0.18	0.03	0.01	-0.08	-0.05	0.08
17	1	-0.23	0.17	-0.30	-0.07	-0.21	0.14	-0.14	-0.10	-0.11
18	6	-0.05	0.04	0.02	-0.21	0.16	-0.08	0.00	0.00	0.15
19	1	0.18	-0.16	0.30	-0.18	0.27	-0.17	0.12	0.10	0.10
20	1	-0.27	0.23	-0.26	-0.22	0.02	0.02	-0.13	-0.09	0.14
21	1	-0.06	0.07	0.04	-0.28	0.27	-0.14	0.01	0.00	0.26
22	1	0.00	0.00	-0.06	-0.02	0.09	-0.02	0.01	0.12	0.48

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	110.7709	138.7397	197.2246
Red. masses --	7.9914	7.3758	6.2772
Frc consts --	0.0578	0.0836	0.1439
IR Inten --	1.0868	9.0481	4.3922

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.04	-0.22	0.03	-0.12	0.01	-0.02	0.06	-0.11
2	7	0.01	0.12	0.46	0.14	0.11	-0.03	-0.14	0.02	-0.06
3	6	0.01	0.06	0.23	0.13	0.17	-0.03	-0.13	0.00	0.25
4	6	0.01	0.00	0.00	0.08	0.19	-0.02	-0.04	-0.04	0.18
5	7	0.01	0.01	0.01	0.03	0.13	-0.03	0.02	-0.04	-0.18
6	6	0.01	0.04	0.14	0.08	0.07	-0.02	-0.03	0.04	-0.20
7	1	0.00	0.09	0.34	0.19	0.08	-0.03	-0.22	0.13	0.14
8	1	0.01	-0.05	-0.23	-0.01	0.13	-0.02	0.09	-0.03	-0.18
9	6	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.07	-0.01	-0.10	-0.01	0.12

10	7	-0.01	-0.08	-0.33	-0.38	-0.21	0.04	0.10	0.08	-0.20
11	6	-0.01	-0.02	-0.19	0.08	-0.20	0.08	0.09	-0.08	0.12
12	6	0.06	0.02	-0.13	0.09	-0.13	0.06	0.11	-0.09	0.14
13	6	-0.08	-0.05	-0.13	0.00	-0.19	0.08	0.11	-0.10	0.13
14	6	0.07	0.02	0.01	-0.01	0.03	-0.02	0.03	0.02	0.00
15	1	0.11	0.05	-0.18	0.16	-0.16	0.09	0.14	-0.14	0.19
16	6	-0.07	-0.06	0.02	-0.11	-0.04	-0.01	0.03	0.02	-0.01
17	1	-0.14	-0.09	-0.17	0.00	-0.28	0.12	0.15	-0.13	0.18
18	6	0.01	-0.02	0.09	-0.13	0.10	-0.09	-0.04	0.12	-0.13
19	1	0.13	0.06	0.07	-0.01	0.12	-0.06	0.00	0.05	-0.05
20	1	-0.13	-0.09	0.07	-0.18	-0.01	-0.03	0.01	0.05	-0.05
21	1	0.02	-0.03	0.21	-0.22	0.24	-0.18	-0.13	0.26	-0.30
22	1	0.01	-0.04	-0.18	0.05	0.24	-0.02	0.01	-0.11	0.27

44 bph-nhc(OMe)₂

0 1 -711.634661

B	-1.04359300	-0.00034300	-0.25917800
N	1.17278900	1.18887300	-0.58320000
C	2.48969200	0.66958300	-0.34990700
C	2.49000600	-0.66936100	-0.35010400
N	1.17331100	-1.18918200	-0.58342700
C	0.33356000	-0.00040000	-0.52125600
H	1.12628000	1.67616600	-1.48008000
H	1.12693400	-1.67649400	-1.48029000
O	3.53879200	1.51337300	-0.22803500
O	3.53945700	-1.51273200	-0.22840500
C	3.45864700	-2.43698400	0.86863600
H	4.33293800	-3.08137200	0.78564400
H	3.48471700	-1.89759900	1.82125300
H	2.54493800	-3.03278100	0.81234900
C	3.45757800	2.43742900	0.86914400
H	3.48451300	1.89794300	1.82168400
H	4.33125200	3.08261800	0.78590200

H	2.54330100	3.03238400	0.81328600
C	-2.53897900	-0.00024000	-0.05620400
C	-3.42976500	0.00037900	-1.15349200
C	-3.09278600	-0.00071700	1.24404500
C	-4.80662200	0.00056600	-0.96048500
H	-3.02607500	0.00069200	-2.15958700
C	-4.46949400	-0.00061800	1.43778500
H	-2.42541000	-0.00114700	2.09806600
C	-5.32522000	0.00004700	0.33527200
H	-5.47637100	0.00110800	-1.81299300
H	-4.87808400	-0.00105400	2.44192100
H	-6.39937100	0.00017200	0.48604000

		1				2				3
		A			A			A		
Frequencies --		18.8338			31.7054			34.1485		
Red. masses --		3.8477			4.6600			4.9390		
Frc consts --		0.0008			0.0028			0.0034		
IR Inten --		0.0133			0.3763			0.0405		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.03	0.00	-0.02	0.00	0.20	0.00	0.19	0.00
2	7	0.02	0.01	-0.05	-0.02	0.00	0.15	0.08	0.12	0.00
3	6	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.05	0.02	-0.01
4	6	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.02	0.01
5	7	-0.02	0.01	0.05	-0.02	0.00	0.15	-0.08	0.12	0.00
6	6	0.00	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.18	0.00	0.18	0.00
7	1	0.03	-0.03	-0.07	-0.11	0.04	0.17	0.11	0.13	0.00
8	1	-0.03	-0.03	0.07	-0.11	-0.04	0.17	-0.11	0.13	0.00
9	8	0.03	-0.02	-0.07	0.02	0.00	-0.12	0.11	-0.05	-0.02
10	8	-0.03	-0.02	0.07	0.02	0.00	-0.12	-0.11	-0.05	0.02
11	6	-0.05	0.04	0.12	0.15	0.02	-0.09	-0.20	-0.05	0.02
12	1	-0.05	0.02	0.16	0.14	0.01	-0.19	-0.25	-0.12	0.03
13	1	-0.04	0.08	0.09	0.27	0.03	-0.10	-0.16	-0.05	0.02

14	1	-0.05	0.05	0.14	0.14	0.02	0.03	-0.24	0.03	0.01
15	6	0.05	0.04	-0.12	0.15	-0.02	-0.09	0.20	-0.05	-0.02
16	1	0.04	0.08	-0.09	0.27	-0.03	-0.10	0.16	-0.05	-0.02
17	1	0.05	0.02	-0.16	0.14	-0.01	-0.19	0.25	-0.12	-0.03
18	1	0.05	0.05	-0.14	0.14	-0.02	0.03	0.24	0.03	-0.01
19	6	0.00	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.10	0.00	0.09	0.00
20	6	0.00	0.21	0.00	0.06	0.00	0.02	0.00	-0.05	0.00
21	6	0.00	-0.21	0.00	-0.15	0.00	0.05	0.00	0.08	0.00
22	6	0.00	0.20	0.00	0.04	0.00	-0.10	0.00	-0.21	0.00
23	1	0.00	0.37	0.00	0.15	0.00	0.05	0.00	-0.04	0.00
24	6	0.00	-0.25	0.00	-0.17	0.00	-0.07	0.00	-0.07	0.00
25	1	0.00	-0.36	0.00	-0.22	0.00	0.11	0.00	0.19	0.00
26	6	0.00	-0.04	0.00	-0.07	0.00	-0.15	0.00	-0.22	0.00
27	1	0.00	0.36	0.00	0.12	0.00	-0.16	0.00	-0.33	0.00
28	1	0.00	-0.44	0.00	-0.25	0.00	-0.11	0.00	-0.08	0.00
29	1	0.00	-0.06	0.00	-0.08	0.00	-0.24	0.00	-0.35	0.00

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	66.8913	88.8632	95.8358
Red. masses --	2.6157	1.9125	4.5972
Frc consts --	0.0069	0.0089	0.0249
IR Inten --	3.3206	6.8340	2.5252

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.03	0.00	-0.07	0.00	-0.03	0.00	0.07	0.00	0.22
2	7	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.15
3	6	-0.01	0.00	-0.05	-0.01	0.04	-0.03	-0.01	0.00	-0.11
4	6	-0.01	0.00	-0.05	0.01	0.04	0.03	-0.01	0.00	-0.11
5	7	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.15
6	6	-0.02	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.07
7	1	-0.03	0.04	0.02	-0.03	-0.05	-0.08	0.00	-0.07	-0.19
8	1	-0.03	-0.04	0.02	0.03	-0.05	0.08	0.00	0.07	-0.19
9	8	-0.01	0.00	-0.04	-0.03	0.07	-0.08	-0.02	0.01	0.00
10	8	-0.01	0.00	-0.04	0.03	0.07	0.08	-0.02	-0.01	0.00

11	6	0.10	0.18	0.12	-0.08	-0.07	-0.05	-0.11	0.10	0.08
12	1	0.04	0.11	0.10	0.08	0.12	0.11	-0.13	0.06	0.19
13	1	0.28	0.34	0.03	-0.44	-0.18	0.03	-0.15	0.19	0.03
14	1	0.05	0.24	0.36	0.06	-0.25	-0.36	-0.13	0.12	0.08
15	6	0.10	-0.18	0.12	0.08	-0.07	0.05	-0.11	-0.10	0.08
16	1	0.28	-0.34	0.03	0.44	-0.18	-0.03	-0.15	-0.19	0.03
17	1	0.04	-0.11	0.10	-0.08	0.11	-0.10	-0.13	-0.06	0.19
18	1	0.05	-0.24	0.36	-0.06	-0.25	0.36	-0.13	-0.12	0.08
19	6	-0.03	0.00	-0.05	0.00	-0.03	0.00	0.06	0.00	0.18
20	6	-0.06	0.00	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.17	0.00	0.10
21	6	0.01	0.00	-0.03	0.00	-0.02	0.00	-0.05	0.00	0.13
22	6	-0.05	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00	0.15	0.00	-0.04
23	1	-0.09	0.00	-0.03	0.00	-0.03	0.00	0.27	0.00	0.14
24	6	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.07	0.00	-0.01
25	1	0.03	0.00	-0.05	0.00	-0.02	0.00	-0.14	0.00	0.20
26	6	-0.02	0.00	0.03	0.00	0.02	0.00	0.03	0.00	-0.09
27	1	-0.08	0.00	0.04	0.00	0.02	0.00	0.24	0.00	-0.10
28	1	0.04	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.17	0.00	-0.05
29	1	-0.01	0.00	0.06	0.00	0.04	0.00	0.02	0.00	-0.19

03 -711.638289

B	-1.12747200	-1.31172900	0.10156600
N	0.65715700	0.51864900	-0.34532900
C	2.03976300	0.58218200	-0.51277800
C	2.53356700	-0.65509900	-0.23996900
N	1.44965800	-1.46690400	0.08614900
C	0.24894000	-0.77726200	-0.02453100
H	0.01145900	1.21229900	-0.68958800
H	1.48286500	-2.47204000	0.15576600
O	2.67007600	1.70083600	-0.91769800
O	3.79419500	-1.12409000	-0.29090100
C	4.46338500	-1.25725100	0.97763600
H	5.44533100	-1.67215300	0.75718400

H	4.57202200	-0.28031600	1.45721500
H	3.91731300	-1.93385200	1.64133100
C	2.83422400	2.72280800	0.08387100
H	3.43900900	2.34951400	0.91535000
H	3.34880200	3.54593500	-0.40856800
H	1.86573900	3.06551800	0.45921600
C	-2.50040300	-0.63239700	0.10268700
C	-3.59854700	-1.16049600	-0.61754300
C	-2.74449600	0.54800100	0.84934700
C	-4.84447000	-0.54332400	-0.60981200
H	-3.45960000	-2.07198500	-1.18969900
C	-3.99297800	1.16263100	0.86366600
H	-1.94113100	0.97526500	1.44272200
C	-5.05138500	0.62279700	0.13082400
H	-5.66208500	-0.97384200	-1.17886700
H	-4.14463400	2.06293400	1.45075900
H	-6.02520900	1.09965000	0.14200700

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		21.5666			26.6353			40.1155		
Red. masses --		3.7647			3.0530			4.9416		
Frc consts --		0.0010			0.0013			0.0047		
IR Inten --		0.3470			2.3138			0.6670		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.02	-0.05	0.01	0.07	0.03	0.00	-0.03	0.21
2	7	-0.01	0.01	0.02	0.01	0.06	-0.03	-0.04	-0.01	0.18
3	6	-0.01	0.02	0.03	0.01	0.05	-0.03	-0.06	0.00	0.05
4	6	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.05	0.00	-0.03	0.00	-0.01
5	7	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.07	0.04	0.01	-0.01	0.09
6	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.08	0.01	-0.01	-0.02	0.18
7	1	-0.01	0.02	0.03	0.02	0.06	-0.04	-0.08	-0.01	0.22
8	1	0.00	0.00	-0.08	-0.01	0.07	0.05	0.02	-0.01	0.02

9	8	-0.01	0.05	0.08	0.01	0.04	-0.06	-0.11	0.02	0.01
10	8	0.00	0.03	-0.03	0.01	0.06	0.01	-0.03	0.01	-0.15
11	6	-0.02	-0.06	-0.03	-0.08	-0.18	0.03	0.11	-0.02	-0.23
12	1	-0.01	-0.04	-0.04	-0.05	-0.10	0.01	0.09	-0.02	-0.35
13	1	-0.03	-0.09	0.04	-0.15	-0.27	0.23	0.16	-0.04	-0.22
14	1	-0.03	-0.11	-0.08	-0.11	-0.33	-0.15	0.19	-0.04	-0.19
15	6	0.01	-0.01	0.13	0.25	-0.04	-0.02	0.03	-0.02	0.03
16	1	0.02	-0.06	0.10	0.42	-0.12	-0.18	0.14	-0.06	-0.06
17	1	0.00	0.02	0.17	0.17	-0.02	-0.07	-0.04	0.00	0.00
18	1	0.01	-0.03	0.17	0.34	-0.05	0.21	0.08	-0.04	0.18
19	6	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	0.02	0.01	0.01	-0.02	0.11
20	6	-0.07	-0.12	0.16	0.01	-0.03	0.00	0.06	-0.03	0.03
21	6	0.08	0.11	-0.20	-0.07	0.01	0.02	-0.04	0.02	0.04
22	6	-0.06	-0.12	0.17	-0.01	-0.08	0.00	0.08	0.00	-0.13
23	1	-0.12	-0.22	0.29	0.06	-0.02	0.00	0.10	-0.06	0.09
24	6	0.08	0.12	-0.18	-0.10	-0.05	0.01	-0.03	0.05	-0.12
25	1	0.13	0.20	-0.33	-0.09	0.04	0.02	-0.09	0.03	0.10
26	6	0.01	0.00	0.00	-0.07	-0.09	0.00	0.04	0.05	-0.21
27	1	-0.12	-0.21	0.32	0.01	-0.12	-0.01	0.13	0.00	-0.19
28	1	0.14	0.21	-0.31	-0.14	-0.06	0.01	-0.06	0.08	-0.18
29	1	0.01	0.01	0.01	-0.09	-0.14	0.00	0.05	0.08	-0.33

4

5

6

A

A

A

Frequencies --

45.2086

53.5464

111.4580

Red. masses --

3.3754

2.7673

4.4555

Frc consts --

0.0041

0.0047

0.0326

IR Inten --

1.5706

2.3911

2.0768

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.02	-0.10	0.02	-0.02	-0.07	-0.03	-0.03	-0.05	-0.18
2	7	-0.06	-0.06	-0.04	-0.06	-0.05	-0.04	-0.02	0.03	0.17
3	6	-0.06	0.02	-0.02	-0.06	-0.01	-0.03	-0.02	0.02	0.15
4	6	0.00	0.05	0.01	-0.03	0.01	-0.01	-0.02	0.02	0.14
5	7	0.04	0.00	0.02	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	0.02	0.14

6	6	0.01	-0.06	0.00	-0.03	-0.05	-0.03	-0.02	0.00	0.07
7	1	-0.10	-0.09	-0.04	-0.07	-0.06	-0.03	-0.01	0.00	0.10
8	1	0.08	0.00	0.04	0.02	-0.01	0.03	-0.01	0.01	0.07
9	8	-0.13	0.05	-0.05	-0.10	0.01	-0.03	-0.04	-0.02	0.00
10	8	0.03	0.14	0.03	-0.01	0.04	0.03	-0.03	0.00	0.01
11	6	-0.11	-0.17	0.07	0.01	0.21	0.04	0.12	-0.06	-0.08
12	1	-0.03	0.02	0.07	0.01	0.20	0.08	0.09	-0.05	-0.22
13	1	-0.30	-0.30	0.38	-0.01	0.26	-0.08	0.19	-0.08	-0.05
14	1	-0.11	-0.44	-0.20	0.03	0.27	0.12	0.21	-0.08	-0.04
15	6	-0.11	0.04	-0.04	0.19	-0.13	0.07	0.08	0.11	-0.16
16	1	0.00	0.06	-0.11	0.44	-0.24	-0.17	0.23	0.24	-0.21
17	1	-0.21	0.08	-0.08	0.04	-0.05	0.04	-0.04	0.07	-0.35
18	1	-0.10	-0.04	0.05	0.30	-0.20	0.41	0.12	0.12	-0.05
19	6	0.04	-0.06	0.02	-0.01	-0.04	-0.02	-0.02	-0.03	-0.18
20	6	0.02	0.01	0.00	-0.03	0.00	-0.01	-0.08	0.02	-0.12
21	6	0.09	-0.05	0.03	0.04	-0.04	0.00	0.06	-0.05	-0.13
22	6	0.06	0.08	-0.02	-0.01	0.05	0.00	-0.08	0.03	0.03
23	1	-0.02	0.01	-0.01	-0.06	0.00	-0.02	-0.15	0.04	-0.17
24	6	0.13	0.02	0.01	0.06	0.00	0.01	0.07	-0.04	0.02
25	1	0.11	-0.10	0.04	0.06	-0.07	0.00	0.12	-0.08	-0.18
26	6	0.11	0.08	-0.01	0.04	0.05	0.01	0.00	-0.01	0.11
27	1	0.04	0.13	-0.04	-0.03	0.08	0.00	-0.14	0.06	0.09
28	1	0.17	0.02	0.02	0.09	0.00	0.02	0.14	-0.06	0.07
29	1	0.14	0.14	-0.03	0.05	0.08	0.02	0.00	-0.01	0.23

45 bph-nhcOMe

0 1 -597.115481

B	0.56826400	0.18547400	-0.20669400
N	-1.86013300	-0.57106100	0.07010300
C	-3.09375800	0.03264300	-0.28790400
C	-2.90643800	1.31834400	-0.60194200
N	-1.52338300	1.62745200	-0.48853200
C	-0.83376400	0.39510100	-0.21368000

H	-1.71878500	-1.50826400	-0.28751000
H	-1.13087300	2.18833000	-1.23194900
O	-4.23622600	-0.68666000	-0.21948600
C	-4.64728600	-1.05991000	1.10917100
H	-4.85290200	-0.16565400	1.70535600
H	-5.55812000	-1.64457900	0.98929500
H	-3.88053000	-1.66052200	1.60464600
C	2.05067600	0.00922100	-0.06045700
C	2.78816300	0.79020000	0.86607400
C	2.77332700	-0.93123500	-0.83726100
C	4.16670900	0.66153800	0.98031200
H	2.26086800	1.49758400	1.49622400
C	4.14162500	-1.10475100	-0.67034200
H	2.24432800	-1.52216000	-1.57670100
C	4.84599400	-0.29759900	0.22571900
H	4.71146800	1.28501000	1.68085900
H	4.66859400	-1.84658100	-1.26041800
H	5.91833300	-0.41544800	0.33535400
H	-3.64077200	2.08214700	-0.79493400

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		28.4417			39.5909			40.9380		
Red. masses --		4.9893			3.8478			4.0886		
Frc consts --		0.0024			0.0036			0.0040		
IR Inten --		2.5424			1.0812			16.4164		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.01	0.07	0.33	0.00	0.15	-0.04	0.01	-0.06	-0.14
2	7	-0.02	0.00	0.05	0.04	0.06	-0.07	0.00	-0.01	-0.03
3	6	0.00	-0.02	-0.04	0.00	0.02	0.01	0.00	0.03	0.02
4	6	0.00	-0.02	-0.05	-0.06	0.03	0.01	0.02	0.06	0.16
5	7	-0.01	0.00	0.02	-0.06	0.08	-0.08	0.02	0.03	0.21
6	6	-0.01	0.02	0.12	-0.01	0.11	-0.08	0.01	-0.01	0.03

7	1	0.02	0.01	0.04	0.06	0.08	-0.13	-0.01	0.01	-0.06
8	1	0.03	-0.04	0.01	-0.12	0.07	-0.12	0.04	0.17	0.34
9	8	0.00	-0.03	-0.11	0.03	-0.01	0.05	0.00	0.03	-0.06
10	6	-0.06	-0.06	-0.14	0.20	-0.22	0.04	-0.04	-0.06	-0.10
11	1	-0.11	-0.07	-0.13	0.28	-0.31	0.21	-0.05	-0.11	-0.04
12	1	-0.05	-0.06	-0.20	0.19	-0.20	0.07	-0.04	-0.05	-0.17
13	1	-0.08	-0.06	-0.11	0.26	-0.29	-0.14	-0.06	-0.11	-0.12
14	6	0.00	0.05	0.16	-0.01	0.09	-0.02	0.00	-0.05	-0.08
15	6	0.15	0.09	0.01	0.03	0.07	-0.03	-0.03	0.10	-0.17
16	6	-0.13	-0.03	0.13	-0.07	0.00	0.03	0.03	-0.15	0.08
17	6	0.16	0.05	-0.16	0.01	-0.05	0.01	-0.03	0.14	-0.13
18	1	0.25	0.15	0.03	0.07	0.14	-0.08	-0.06	0.17	-0.28
19	6	-0.11	-0.07	-0.03	-0.09	-0.12	0.08	0.03	-0.11	0.14
20	1	-0.24	-0.06	0.23	-0.10	0.02	0.04	0.07	-0.26	0.15
21	6	0.03	-0.03	-0.18	-0.05	-0.15	0.08	0.00	0.04	0.03
22	1	0.27	0.08	-0.27	0.05	-0.07	0.00	-0.06	0.26	-0.21
23	1	-0.21	-0.12	-0.05	-0.14	-0.19	0.13	0.05	-0.19	0.26
24	1	0.04	-0.06	-0.31	-0.06	-0.24	0.12	0.00	0.08	0.07
25	1	0.00	-0.03	-0.11	-0.10	0.01	0.06	0.03	0.09	0.23

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 52.2192 91.6161 131.8533

Red. masses -- 3.4664 3.1522 1.3405

Frc consts -- 0.0056 0.0156 0.0137

IR Inten -- 7.7629 4.7688 1.2598

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.02	-0.10	0.12	-0.01	-0.05	-0.06	-0.01	-0.02	0.01
2	7	-0.07	-0.07	-0.13	-0.02	0.13	0.27	0.00	0.03	0.00
3	6	-0.04	0.07	0.01	0.01	0.05	0.04	0.00	0.04	0.01
4	6	0.04	0.06	0.03	0.02	0.01	-0.13	0.00	0.03	-0.01
5	7	0.08	-0.05	-0.10	0.02	0.03	-0.04	0.00	0.03	-0.02
6	6	-0.01	-0.10	-0.06	0.00	0.05	0.09	0.00	0.03	-0.01
7	1	-0.16	-0.03	-0.29	0.01	0.05	0.50	-0.01	0.04	-0.02

8	1	0.06	-0.17	-0.20	0.08	-0.03	-0.04	0.00	0.01	-0.04
9	8	-0.11	0.18	0.05	0.01	0.05	-0.02	0.02	0.01	0.00
10	6	0.09	-0.10	0.03	0.03	-0.15	-0.07	0.05	-0.04	0.00
11	1	0.37	-0.22	0.31	0.26	-0.24	0.14	-0.47	-0.07	-0.13
12	1	-0.03	0.10	0.06	-0.10	0.07	-0.14	0.36	-0.52	-0.03
13	1	0.08	-0.36	-0.28	-0.07	-0.43	-0.25	0.30	0.41	0.16
14	6	-0.01	-0.07	0.07	-0.01	-0.06	-0.02	-0.02	-0.07	0.03
15	6	-0.02	-0.02	0.04	-0.05	-0.05	-0.01	-0.03	-0.05	0.03
16	6	0.01	-0.04	0.06	0.02	-0.04	-0.02	0.00	-0.05	0.03
17	6	0.00	0.06	-0.02	-0.04	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.01
18	1	-0.03	-0.04	0.05	-0.08	-0.08	-0.01	-0.05	-0.07	0.04
19	6	0.03	0.05	0.00	0.03	0.01	-0.03	0.01	0.01	-0.01
20	1	0.01	-0.08	0.09	0.04	-0.05	-0.03	0.00	-0.08	0.04
21	6	0.02	0.10	-0.04	-0.01	0.03	-0.02	0.00	0.04	-0.03
22	1	-0.01	0.10	-0.05	-0.07	0.01	0.01	-0.03	0.03	-0.02
23	1	0.04	0.07	-0.02	0.06	0.04	-0.03	0.02	0.03	-0.02
24	1	0.03	0.16	-0.09	0.00	0.07	-0.02	0.01	0.10	-0.07
25	1	0.09	0.13	0.11	0.04	-0.02	-0.30	0.00	0.03	-0.02

0 3 -597.123189

B	0.64285300	-1.40302200	-0.33884800
N	-1.39410700	0.09252200	0.25557900
C	-2.77536300	-0.03628500	0.30257900
C	-3.09013600	-1.26550900	-0.17799400
N	-1.88998900	-1.88617500	-0.49781600
C	-0.79839500	-1.07907100	-0.21868800
H	-0.86538100	0.83088700	0.69221000
H	-1.78140200	-2.82770900	-0.83650000
O	-3.57243300	0.93045600	0.79810200
C	-3.78370300	2.06504800	-0.06508800
H	-4.26173700	1.74897000	-0.99643000
H	-4.44041200	2.73912700	0.48163600
H	-2.84042200	2.57159400	-0.28830100

C	1.91061200	-0.56088400	-0.16940500
C	3.01647800	-1.01470500	0.58907100
C	2.04746800	0.70841100	-0.78672900
C	4.16619500	-0.24734000	0.73895900
H	2.96075700	-1.98823800	1.06513500
C	3.20052100	1.47419900	-0.64294400
H	1.23831700	1.08683800	-1.40482600
C	4.26720400	1.00312600	0.12456200
H	4.99186600	-0.62524600	1.33321200
H	3.27169400	2.43956600	-1.13410400
H	5.16694000	1.59794900	0.23632200
H	-4.05163500	-1.72865100	-0.30921400

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		23.5718			32.0677			48.6227		
Red. masses --		3.7853			3.7288			3.5697		
Frc consts --		0.0012			0.0023			0.0050		
IR Inten --		0.2422			1.6082			0.8099		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.03	-0.07	0.00	-0.11	-0.01	0.01	-0.07	-0.14
2	7	-0.01	-0.01	0.01	0.05	-0.06	-0.03	0.10	0.00	-0.06
3	6	-0.01	-0.02	0.01	0.04	-0.01	-0.03	0.10	0.04	0.06
4	6	0.00	0.00	-0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.05	0.10
5	7	0.00	0.02	-0.08	-0.02	-0.06	0.01	-0.02	0.01	0.00
6	6	0.00	0.01	-0.05	0.00	-0.09	-0.01	0.02	-0.03	-0.08
7	1	-0.01	-0.03	0.03	0.08	-0.08	-0.04	0.15	-0.01	-0.11
8	1	0.00	0.03	-0.12	-0.06	-0.06	0.01	-0.08	-0.01	0.03
9	8	-0.01	-0.05	0.07	0.07	0.02	-0.04	0.19	0.10	0.09
10	6	0.02	0.01	0.15	0.31	0.13	0.06	-0.12	-0.09	-0.08
11	1	0.04	0.09	0.11	0.42	0.27	-0.05	-0.42	-0.29	0.14
12	1	0.00	-0.03	0.19	0.28	0.12	0.03	0.05	0.02	-0.01
13	1	0.02	0.03	0.21	0.38	0.08	0.26	-0.20	-0.12	-0.49

14	6	0.00	0.02	-0.03	-0.03	-0.05	-0.01	-0.01	-0.05	-0.09
15	6	-0.10	0.10	0.16	-0.01	0.02	0.00	-0.04	-0.02	-0.03
16	6	0.10	-0.07	-0.20	-0.11	-0.04	-0.01	-0.01	-0.03	-0.05
17	6	-0.10	0.09	0.18	-0.07	0.09	0.02	-0.08	0.02	0.08
18	1	-0.18	0.16	0.29	0.04	0.01	0.00	-0.04	-0.04	-0.05
19	6	0.11	-0.09	-0.17	-0.16	0.04	0.01	-0.06	0.01	0.05
20	1	0.18	-0.13	-0.33	-0.12	-0.09	-0.02	0.02	-0.05	-0.10
21	6	0.01	-0.01	0.01	-0.14	0.10	0.03	-0.09	0.04	0.12
22	1	-0.18	0.15	0.33	-0.05	0.14	0.03	-0.11	0.04	0.13
23	1	0.19	-0.16	-0.30	-0.22	0.04	0.02	-0.06	0.03	0.08
24	1	0.01	-0.02	0.03	-0.18	0.16	0.04	-0.13	0.08	0.20
25	1	0.00	0.00	-0.06	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.07	0.18

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 75.5391 122.9820 143.8323

Red. masses -- 3.8095 4.5481 1.2212

Frc consts -- 0.0128 0.0405 0.0149

IR Inten -- 3.4580 1.0687 0.3697

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.02	0.08	-0.13	-0.02	0.07	-0.13	-0.01	0.02	0.01
2	7	-0.05	0.06	-0.16	-0.01	-0.12	0.33	-0.02	-0.01	-0.03
3	6	-0.04	-0.03	0.01	-0.02	-0.04	0.13	-0.02	-0.03	-0.01
4	6	0.00	-0.12	0.21	-0.03	0.02	-0.04	-0.02	-0.03	0.00
5	7	0.00	-0.08	0.16	-0.03	0.01	0.01	-0.01	-0.03	0.00
6	6	-0.02	0.03	-0.06	-0.02	-0.03	0.12	-0.02	-0.01	-0.01
7	1	-0.05	0.14	-0.29	-0.02	-0.11	0.31	-0.03	-0.02	-0.01
8	1	0.04	-0.13	0.31	-0.04	0.09	-0.23	0.00	-0.03	0.01
9	8	-0.07	-0.03	-0.04	-0.02	0.03	-0.01	0.01	-0.01	0.00
10	6	0.09	0.03	0.01	0.14	-0.08	-0.19	0.06	0.01	0.01
11	1	0.28	0.09	-0.12	0.22	-0.18	-0.20	-0.43	0.11	0.22
12	1	-0.04	-0.03	-0.07	0.13	0.05	-0.36	0.52	0.28	0.23
13	1	0.12	0.07	0.23	0.20	-0.18	-0.17	0.15	-0.34	-0.41
14	6	0.00	0.06	-0.11	-0.02	0.07	-0.11	-0.02	0.04	0.03

15	6	-0.06	-0.02	-0.08	-0.06	0.01	-0.08	-0.02	0.03	0.02
16	6	0.07	0.08	-0.05	0.05	0.08	-0.08	0.00	0.04	0.03
17	6	-0.04	-0.06	0.03	-0.05	-0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.01
18	1	-0.12	-0.04	-0.13	-0.11	0.00	-0.12	-0.04	0.03	0.03
19	6	0.09	0.04	0.07	0.06	0.04	0.01	0.02	0.01	0.00
20	1	0.12	0.14	-0.07	0.09	0.12	-0.10	0.00	0.06	0.04
21	6	0.03	-0.03	0.11	0.01	-0.01	0.05	0.03	-0.02	-0.02
22	1	-0.09	-0.12	0.06	-0.09	-0.07	0.03	0.00	-0.02	-0.02
23	1	0.15	0.06	0.12	0.11	0.06	0.04	0.04	0.01	-0.01
24	1	0.04	-0.06	0.20	0.02	-0.03	0.12	0.05	-0.05	-0.05
25	1	0.01	-0.19	0.36	-0.04	0.09	-0.20	-0.01	-0.04	0.01

46 bph-nhc(NH₂)

0 1 -537.951702

B	0.15004700	-0.50254000	-0.48397600
N	-2.15821500	0.63433500	-0.47389700
C	-3.44574600	0.19527600	-0.11865300
C	-3.30639200	-0.85122100	0.71831300
N	-1.91840900	-1.03892400	0.94786200
C	-1.19877300	-0.27340900	0.00666600
H	-1.99579800	1.17921600	-1.30354700
H	-1.57556700	-1.95262300	1.19577400
C	1.61578900	-0.20627100	-0.23145300
C	2.64374400	-1.07041700	-0.67926800
C	2.01404400	0.98052100	0.43482800
C	3.98423900	-0.78308500	-0.44903300
H	2.36796000	-1.97063900	-1.21708400
C	3.35611600	1.29978600	0.60691000
H	1.25051500	1.64804400	0.81939200
C	4.34488100	0.41134100	0.17856100
H	4.75240300	-1.47202800	-0.78336200
H	3.63564700	2.22339500	1.10258500
H	5.39182500	0.64858000	0.33368700

H	-4.04998400	-1.39762200	1.27253400
N	-4.55852600	0.94462400	-0.51232200
H	-4.72764800	0.93123900	-1.51256200
H	-5.40095000	0.67976600	-0.02026500

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		29.3631			39.1405			41.1539		
Red. masses --		4.8152			4.2040			4.6739		
Frc consts --		0.0024			0.0038			0.0047		
IR Inten --		12.4603			13.9412			4.7428		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.22	0.17	-0.01	-0.02	0.11	-0.01	0.14	-0.18
2	7	-0.06	0.10	0.12	0.00	-0.01	-0.03	-0.09	0.01	-0.11
3	6	-0.06	-0.06	-0.05	-0.01	-0.03	-0.06	-0.03	-0.05	0.03
4	6	-0.05	-0.14	-0.14	-0.02	0.07	0.06	0.11	0.02	0.10
5	7	-0.05	-0.04	-0.02	-0.02	0.13	0.16	0.14	0.15	0.00
6	6	-0.03	0.09	0.09	0.00	0.03	0.08	0.01	0.13	-0.11
7	1	-0.04	0.10	0.12	0.01	-0.14	-0.12	-0.20	-0.03	-0.16
8	1	-0.01	-0.06	-0.12	-0.02	0.15	0.23	0.25	0.22	0.11
9	6	0.02	0.11	0.08	0.01	-0.01	0.05	0.00	0.08	-0.10
10	6	-0.07	0.00	0.07	-0.01	0.07	-0.14	-0.03	0.03	-0.06
11	6	0.15	0.11	0.00	0.03	-0.09	0.18	0.03	0.03	-0.03
12	6	-0.04	-0.10	-0.01	0.00	0.07	-0.21	-0.03	-0.08	0.07
13	1	-0.17	0.00	0.12	-0.04	0.13	-0.23	-0.05	0.07	-0.11
14	6	0.19	0.01	-0.09	0.03	-0.09	0.13	0.04	-0.08	0.10
15	1	0.23	0.19	0.01	0.03	-0.16	0.31	0.05	0.07	-0.07
16	6	0.09	-0.10	-0.09	0.02	-0.01	-0.07	0.01	-0.14	0.15
17	1	-0.11	-0.19	-0.01	0.00	0.14	-0.37	-0.05	-0.13	0.11
18	1	0.29	0.01	-0.15	0.05	-0.15	0.24	0.06	-0.12	0.16
19	1	0.12	-0.18	-0.15	0.02	0.00	-0.12	0.01	-0.23	0.26
20	1	-0.05	-0.24	-0.25	-0.03	0.11	0.09	0.20	0.00	0.19
21	7	-0.08	-0.11	-0.06	-0.01	-0.10	-0.19	-0.12	-0.17	0.06

22	1	0.03	0.03	-0.08	0.05	-0.20	-0.20	-0.22	-0.28	0.08
23	1	-0.11	-0.27	-0.19	-0.03	-0.09	-0.23	-0.06	-0.18	0.17
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		144.4705			151.7460			182.9720		
Red. masses --		4.0110			4.8567			1.1799		
Frc consts --		0.0493			0.0659			0.0233		
IR Inten --		7.7065			1.2759			52.9901		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.04	-0.04	-0.07	0.00	0.02	-0.08	0.00	-0.01	-0.01
2	7	0.09	0.15	0.23	-0.03	0.17	0.04	0.01	0.02	0.06
3	6	0.07	0.00	0.02	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.02	0.02
4	6	0.05	-0.04	-0.04	0.09	-0.03	-0.09	0.00	0.00	0.00
5	7	0.05	0.03	0.09	0.09	0.11	-0.07	-0.01	-0.02	-0.02
6	6	0.05	0.06	0.13	0.03	0.18	-0.05	0.01	0.01	0.01
7	1	0.11	0.12	0.21	-0.07	0.21	0.05	0.02	0.22	0.19
8	1	0.06	0.01	0.01	0.20	0.16	-0.03	-0.01	-0.01	0.01
9	6	-0.04	-0.01	-0.14	0.00	-0.20	0.14	0.00	0.00	-0.01
10	6	-0.02	0.00	-0.09	0.05	-0.15	0.14	0.00	0.00	-0.01
11	6	-0.10	0.00	-0.13	-0.06	-0.17	0.13	0.00	0.00	-0.01
12	6	-0.04	-0.02	0.03	0.04	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
13	1	0.01	0.00	-0.11	0.10	-0.21	0.21	0.00	0.00	-0.01
14	6	-0.11	-0.01	-0.01	-0.08	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00
15	1	-0.13	-0.01	-0.18	-0.10	-0.25	0.18	0.00	0.00	-0.01
16	6	-0.09	-0.03	0.09	-0.03	0.11	-0.15	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.01	-0.02	0.11	0.08	0.08	-0.04	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.15	-0.01	0.01	-0.14	0.05	-0.10	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.10	-0.06	0.21	-0.04	0.26	-0.32	0.00	-0.01	0.01
20	1	0.03	-0.12	-0.14	0.13	-0.15	-0.14	-0.01	-0.07	-0.08
21	7	0.07	-0.08	-0.12	-0.09	-0.09	0.05	0.00	-0.01	-0.08
22	1	0.38	0.14	-0.17	-0.10	-0.03	0.05	-0.34	-0.63	-0.02
23	1	-0.03	-0.33	-0.43	-0.05	-0.21	0.05	0.12	0.47	0.38

03 -537.961919

B	-0.17301600	-1.25234700	-0.28268600
N	1.69426800	0.47504200	0.23016400
C	3.07476600	0.53259100	0.21770000
C	3.52208500	-0.68345700	-0.20042200
N	2.39495100	-1.45841400	-0.46222300
C	1.22525100	-0.77310800	-0.19157300
H	1.08354300	1.25653600	0.40544800
H	2.39227200	-2.40932300	-0.79075100
C	-1.52804500	-0.55476200	-0.14061600
C	-2.55043000	-1.06061200	0.69840100
C	-1.83495800	0.62410900	-0.86710200
C	-3.78044100	-0.42396600	0.82034600
H	-2.36461400	-1.97040800	1.26000600
C	-3.06773600	1.25893900	-0.74971900
H	-1.09535300	1.03369600	-1.54928700
C	-4.04882800	0.74129400	0.09801000
H	-4.53805800	-0.83838200	1.47771900
H	-3.26798100	2.15783700	-1.32432400
H	-5.01067300	1.23378700	0.18862200
H	4.52549500	-1.05155300	-0.32132300
N	3.73652900	1.72022300	0.53439000
H	3.55828400	2.05007700	1.47686600
H	4.73194800	1.67533800	0.36400100

	1			2			3			
	A			A			A			
Frequencies --	20.5892			41.2699			70.0451			
Red. masses --	4.0735			5.0149			3.8537			
Frc consts --	0.0010			0.0050			0.0111			
IR Inten --	0.6499			1.8244			3.8635			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.07	0.10	0.00	-0.17	-0.11	0.00	0.05	-0.15

2	7	-0.03	0.01	-0.05	-0.14	-0.07	-0.04	0.01	0.07	-0.19
3	6	-0.03	0.03	-0.07	-0.14	0.03	0.02	0.01	-0.01	0.02
4	6	-0.01	0.01	0.02	-0.03	0.07	0.04	0.01	-0.09	0.24
5	7	0.00	-0.03	0.09	0.04	-0.02	-0.02	0.01	-0.05	0.15
6	6	-0.01	-0.03	0.05	-0.02	-0.11	-0.07	0.00	0.03	-0.09
7	1	-0.04	0.00	-0.07	-0.21	-0.13	-0.06	0.02	0.11	-0.35
8	1	0.01	-0.05	0.16	0.13	-0.02	-0.02	0.01	-0.12	0.34
9	6	0.01	-0.04	0.06	0.03	-0.10	-0.07	-0.01	0.03	-0.12
10	6	-0.10	-0.11	-0.12	0.05	0.01	0.01	0.05	-0.03	-0.09
11	6	0.13	0.07	0.19	0.09	-0.09	-0.07	-0.08	0.06	-0.04
12	6	-0.09	-0.08	-0.16	0.12	0.13	0.09	0.05	-0.06	0.04
13	1	-0.20	-0.20	-0.23	0.01	0.00	0.02	0.11	-0.06	-0.15
14	6	0.15	0.11	0.15	0.15	0.03	0.01	-0.08	0.04	0.09
15	1	0.21	0.13	0.31	0.07	-0.17	-0.13	-0.13	0.11	-0.07
16	6	0.04	0.03	-0.03	0.17	0.14	0.10	-0.01	-0.02	0.13
17	1	-0.17	-0.14	-0.30	0.13	0.21	0.16	0.11	-0.11	0.07
18	1	0.24	0.20	0.25	0.19	0.04	0.01	-0.14	0.07	0.15
19	1	0.05	0.06	-0.06	0.23	0.23	0.17	-0.01	-0.03	0.23
20	1	-0.01	0.02	0.03	0.00	0.15	0.08	0.01	-0.15	0.43
21	7	-0.05	0.07	-0.17	-0.25	0.08	0.06	0.03	0.00	-0.04
22	1	-0.04	0.14	-0.19	-0.35	0.08	0.04	-0.11	0.15	-0.12
23	1	-0.05	0.07	-0.17	-0.24	0.15	0.14	0.06	-0.09	0.13
			4			5			6	
			A			A			A	
Frequencies --		135.6499			174.8787			195.0029		
Red. masses --		5.0963			3.4507			1.2104		
Frc consts --		0.0553			0.0622			0.0271		
IR Inten --		4.4990			1.9138			37.0877		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.04	-0.14	0.00	-0.02	0.07	0.00	0.01	0.02
2	7	0.01	-0.11	0.33	0.02	0.11	-0.02	0.02	0.01	0.05
3	6	0.00	0.00	0.01	0.04	0.04	0.01	0.01	0.00	0.01
4	6	0.00	0.03	-0.08	-0.03	0.01	0.01	0.00	0.01	-0.03

5	7	0.01	-0.06	0.16	-0.06	0.08	0.00	-0.01	0.02	-0.02
6	6	0.01	-0.06	0.19	-0.04	0.12	0.02	0.00	0.01	0.02
7	1	0.02	-0.06	0.15	0.07	0.14	0.02	0.01	0.00	0.06
8	1	0.00	0.06	-0.17	-0.11	0.06	0.05	-0.02	0.02	-0.01
9	6	-0.01	0.02	-0.17	-0.08	-0.17	-0.06	-0.02	-0.03	-0.01
10	6	0.04	-0.02	-0.13	-0.12	-0.12	-0.08	-0.03	-0.02	-0.02
11	6	-0.07	0.04	-0.12	-0.03	-0.17	-0.09	-0.01	-0.03	-0.02
12	6	0.06	-0.02	0.01	-0.03	0.03	0.02	-0.01	0.00	0.00
13	1	0.08	-0.05	-0.19	-0.18	-0.15	-0.10	-0.04	-0.03	-0.03
14	6	-0.06	0.04	0.02	0.06	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00
15	1	-0.12	0.07	-0.16	-0.02	-0.25	-0.13	-0.01	-0.05	-0.03
16	6	0.01	0.03	0.10	0.08	0.11	0.10	0.01	0.02	0.02
17	1	0.11	-0.04	0.05	-0.04	0.10	0.05	-0.01	0.02	0.01
18	1	-0.10	0.07	0.08	0.13	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00
19	1	0.03	0.04	0.22	0.16	0.25	0.22	0.03	0.05	0.05
20	1	0.00	0.08	-0.22	-0.05	-0.04	0.02	0.00	0.01	-0.08
21	7	-0.02	0.06	-0.17	0.13	-0.02	0.04	0.05	-0.02	-0.04
22	1	0.26	0.02	-0.11	0.47	-0.23	0.18	-0.49	0.40	-0.30
23	1	-0.07	0.17	-0.51	0.07	0.02	-0.32	0.15	-0.27	0.61

47 bph-CAAC

0 1 -780.931968

B	0.72921300	-0.37058900	-0.05181800
N	-1.50008800	-1.32123900	-0.67170600
C	-2.79841100	-1.23769500	0.04542700
C	-2.99145500	0.29372000	0.08817400
C	-1.57496500	0.95059600	0.05564100
C	-0.66406200	-0.26160700	-0.21969000
C	-3.90903700	-1.92624600	-0.75659200
C	-0.87119900	-2.61504600	-0.83999500
C	-2.72399100	-1.83829800	1.46470900
C	-1.25874500	1.67194800	1.38638900
C	0.06133100	2.44977100	1.36033900

C	0.10004500	3.46008600	0.20684000
C	-0.19214300	2.77684600	-1.13525500
C	-1.50417700	1.98665700	-1.09804200
H	-3.55844800	0.60093500	0.97051400
H	-3.56079800	0.60821100	-0.79056800
H	-4.88274900	-1.72569100	-0.30024400
H	-3.78091400	-3.01220300	-0.78104500
H	-3.92430100	-1.55646900	-1.78464000
H	-0.07261100	-2.52698800	-1.58378600
H	-1.59233100	-3.34557800	-1.20974800
H	-0.42304700	-3.00545300	0.09114900
H	-1.90667300	-1.39229800	2.03637000
H	-3.65803100	-1.66211100	2.00605500
H	-2.56134700	-2.91938900	1.42858500
H	-2.07556000	2.37831400	1.58873400
H	-1.25508400	0.94835000	2.20658900
H	0.21092100	2.95830100	2.31889600
H	0.89969400	1.74530200	1.26366200
H	1.07085500	3.96575500	0.17485700
H	-0.65266400	4.23923400	0.38690600
H	-0.22754200	3.51747800	-1.94134300
H	0.62856000	2.09162800	-1.38124900
H	-1.66371900	1.46768900	-2.04834700
H	-2.34022000	2.68983700	-0.97510900
C	2.23779400	-0.52761400	-0.02368000
C	3.06078200	0.01013600	-1.03952400
C	2.87149400	-1.24746800	1.01447300
C	4.44178700	-0.14879100	-1.01048200
H	2.60160500	0.55300800	-1.85785600
C	4.24979900	-1.43709300	1.02637500
H	2.26499500	-1.65750300	1.81395300
C	5.03734100	-0.87996800	0.01877000
H	5.05433800	0.28036200	-1.79569500

H	4.71306700	-2.00375200	1.82646100
H	6.11342000	-1.01495000	0.03467000

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		22.8553			33.4250			40.7700		
Red. masses --		3.7129			3.2171			4.3113		
Frc consts --		0.0011			0.0021			0.0042		
IR Inten --		0.9812			1.7692			0.2178		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.03	0.03	0.01	0.00	0.00	0.02	0.10	0.06
2	7	-0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.05	0.07	0.08	0.03	0.02
3	6	-0.02	0.01	-0.04	-0.02	0.01	-0.01	0.06	-0.02	-0.01
4	6	0.00	0.01	-0.06	-0.01	0.02	-0.15	-0.01	-0.02	-0.03
5	6	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.05	-0.03	0.04	0.00
6	6	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.02	0.01	0.03	0.07	0.03
7	6	-0.01	0.02	-0.06	0.01	-0.04	-0.01	0.11	-0.08	-0.03
8	6	-0.02	-0.02	0.03	0.01	-0.07	0.19	0.14	0.06	0.04
9	6	-0.07	0.02	-0.03	-0.10	0.12	0.05	0.05	0.00	-0.01
10	6	-0.03	-0.04	0.02	-0.07	-0.02	-0.03	-0.10	0.05	0.00
11	6	-0.02	-0.05	0.07	-0.07	-0.03	0.06	-0.13	0.10	0.03
12	6	0.03	-0.03	0.09	0.01	-0.02	0.08	-0.14	0.10	0.03
13	6	0.07	0.00	0.07	0.09	0.00	0.05	-0.08	0.09	0.03
14	6	0.06	0.01	0.02	0.09	0.00	-0.04	-0.04	0.03	0.00
15	1	-0.04	0.03	-0.09	-0.10	0.10	-0.23	-0.05	-0.04	-0.05
16	1	0.04	0.01	-0.09	0.09	-0.05	-0.24	0.01	-0.06	-0.06
17	1	-0.02	0.03	-0.09	-0.01	-0.01	-0.07	0.09	-0.11	-0.06
18	1	-0.02	0.01	-0.05	0.01	-0.05	0.08	0.16	-0.07	-0.02
19	1	0.02	0.01	-0.06	0.07	-0.12	-0.04	0.12	-0.09	-0.04
20	1	0.00	-0.05	0.04	0.03	-0.13	0.20	0.15	0.09	0.06
21	1	-0.02	-0.02	0.03	0.02	-0.10	0.23	0.18	0.02	0.04
22	1	-0.03	-0.01	0.05	-0.01	0.01	0.23	0.14	0.09	0.06
23	1	-0.08	0.01	-0.01	-0.12	0.14	0.05	0.02	0.04	0.01

24	1	-0.08	0.05	-0.05	-0.12	0.20	-0.01	0.03	-0.04	-0.03
25	1	-0.10	0.02	-0.01	-0.14	0.12	0.14	0.10	0.01	0.01
26	1	-0.03	-0.03	0.00	-0.08	-0.01	-0.07	-0.13	0.02	-0.02
27	1	-0.06	-0.05	0.01	-0.13	-0.02	-0.03	-0.09	0.06	0.01
28	1	-0.04	-0.07	0.09	-0.12	-0.04	0.08	-0.16	0.11	0.04
29	1	-0.02	-0.06	0.09	-0.07	-0.04	0.10	-0.10	0.14	0.05
30	1	0.03	-0.03	0.14	0.02	-0.02	0.14	-0.16	0.15	0.06
31	1	0.03	-0.03	0.08	0.00	-0.02	0.04	-0.18	0.07	0.01
32	1	0.11	0.01	0.08	0.15	0.00	0.06	-0.08	0.08	0.02
33	1	0.07	-0.01	0.09	0.10	-0.01	0.10	-0.04	0.12	0.06
34	1	0.09	0.03	0.00	0.14	0.01	-0.05	0.00	0.02	-0.01
35	1	0.06	0.02	0.00	0.08	0.01	-0.09	-0.08	0.00	-0.03
36	6	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01	-0.02	0.02	0.04	0.04
37	6	-0.05	-0.16	-0.12	0.00	0.09	0.02	0.02	-0.06	-0.01
38	6	0.06	0.17	0.09	0.02	-0.06	-0.08	0.00	0.01	0.03
39	6	-0.05	-0.13	-0.15	0.00	0.10	0.00	0.01	-0.19	-0.08
40	1	-0.10	-0.30	-0.19	-0.01	0.15	0.06	0.03	-0.04	-0.01
41	6	0.06	0.21	0.08	0.02	-0.07	-0.11	-0.02	-0.12	-0.03
42	1	0.09	0.29	0.18	0.03	-0.12	-0.10	0.00	0.09	0.07
43	6	0.01	0.06	-0.05	0.01	0.02	-0.07	-0.01	-0.23	-0.09
44	1	-0.09	-0.26	-0.25	-0.01	0.17	0.03	0.01	-0.28	-0.12
45	1	0.11	0.36	0.15	0.03	-0.13	-0.16	-0.03	-0.14	-0.04
46	1	0.01	0.08	-0.07	0.01	0.02	-0.09	-0.03	-0.34	-0.14

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 56.8589 95.9775 109.5472

Red. masses -- 3.7228 3.4601 3.4267

Frc consts -- 0.0071 0.0188 0.0242

IR Inten -- 0.9837 0.7471 0.0035

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.03	0.20	0.03	0.07	-0.15	-0.03	0.12	0.03
2	7	0.02	0.02	0.05	0.01	-0.04	0.08	0.02	0.03	0.00
3	6	-0.02	0.00	-0.03	-0.03	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00

4	6	0.00	0.00	0.08	0.01	-0.01	0.07	-0.05	-0.02	0.00
5	6	0.01	0.00	0.06	0.00	-0.01	0.03	-0.07	0.02	0.01
6	6	0.01	-0.01	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.06	0.01
7	6	0.02	0.09	-0.16	0.01	0.07	-0.13	0.05	-0.07	0.00
8	6	0.02	0.02	0.03	0.03	-0.04	0.20	0.08	0.06	0.01
9	6	-0.13	-0.11	-0.07	-0.16	-0.09	-0.03	0.04	-0.01	0.00
10	6	0.00	0.07	0.02	0.06	-0.03	0.03	-0.05	0.02	0.00
11	6	0.01	0.07	-0.03	0.06	-0.02	-0.03	0.04	-0.14	0.00
12	6	0.02	0.00	-0.09	-0.01	0.00	-0.01	0.20	-0.17	-0.03
13	6	0.01	-0.08	-0.05	-0.07	0.03	-0.01	0.04	-0.12	-0.02
14	6	0.01	-0.07	-0.01	-0.06	0.01	0.04	-0.05	0.03	0.02
15	1	0.06	-0.06	0.14	0.06	-0.04	0.12	-0.06	-0.04	-0.01
16	1	-0.05	0.08	0.14	-0.04	0.05	0.12	-0.05	-0.03	-0.01
17	1	-0.01	0.07	-0.21	-0.02	0.05	-0.17	0.03	-0.12	-0.01
18	1	0.00	0.09	-0.25	0.00	0.07	-0.22	0.10	-0.06	0.00
19	1	0.09	0.18	-0.13	0.08	0.16	-0.09	0.03	-0.07	0.00
20	1	0.05	0.03	0.07	0.02	-0.11	0.17	0.08	0.10	0.02
21	1	0.03	0.03	-0.01	0.04	-0.10	0.29	0.12	0.02	0.01
22	1	-0.02	-0.01	0.04	0.06	0.07	0.23	0.09	0.09	0.02
23	1	-0.18	-0.14	0.02	-0.19	-0.15	0.06	0.02	0.03	0.00
24	1	-0.18	-0.15	-0.13	-0.19	-0.09	-0.09	0.03	-0.05	0.00
25	1	-0.13	-0.10	-0.14	-0.20	-0.10	-0.07	0.09	0.00	0.00
26	1	0.01	0.09	-0.02	0.07	-0.04	0.08	0.02	0.11	-0.04
27	1	0.00	0.11	0.05	0.11	-0.05	0.01	-0.14	0.04	0.02
28	1	0.01	0.12	-0.06	0.11	-0.04	-0.03	0.10	-0.13	-0.02
29	1	0.00	0.05	0.02	0.06	-0.01	-0.09	-0.05	-0.25	0.04
30	1	0.02	-0.01	-0.12	-0.02	0.01	-0.05	0.29	-0.35	-0.05
31	1	0.02	0.01	-0.14	-0.01	-0.01	0.04	0.35	-0.03	-0.02
32	1	0.01	-0.12	-0.09	-0.12	0.04	0.01	0.10	-0.09	-0.01
33	1	0.01	-0.09	-0.02	-0.08	0.04	-0.06	-0.06	-0.22	-0.08
34	1	0.01	-0.13	0.03	-0.10	0.03	0.04	-0.14	0.07	0.02
35	1	0.01	-0.06	-0.05	-0.06	0.00	0.10	0.03	0.11	0.08
36	6	0.00	-0.01	0.12	0.03	0.06	-0.11	-0.03	0.13	0.03

37	6	-0.08	0.03	0.07	0.10	0.02	-0.07	-0.02	0.09	0.02
38	6	0.09	-0.04	0.04	-0.05	0.06	-0.06	-0.06	0.10	0.02
39	6	-0.08	0.05	-0.04	0.10	-0.03	0.01	-0.03	-0.01	-0.02
40	1	-0.15	0.05	0.12	0.17	0.02	-0.11	0.00	0.13	0.03
41	6	0.09	-0.02	-0.07	-0.06	0.01	0.02	-0.07	0.00	-0.01
42	1	0.16	-0.07	0.07	-0.11	0.10	-0.08	-0.07	0.14	0.03
43	6	0.01	0.02	-0.11	0.02	-0.03	0.05	-0.06	-0.06	-0.03
44	1	-0.14	0.08	-0.08	0.16	-0.06	0.04	-0.02	-0.05	-0.03
45	1	0.16	-0.05	-0.13	-0.12	0.01	0.06	-0.09	-0.03	-0.02
46	1	0.01	0.03	-0.20	0.01	-0.07	0.12	-0.07	-0.15	-0.07

0 3 -780.907583

B	-0.89878800	0.35427500	-0.13233900
N	0.79102700	-1.51885000	0.02585500
C	2.24057800	-1.84293300	-0.00727600
C	2.83656600	-0.50933800	-0.50138800
C	1.79216800	0.60363000	-0.22290600
C	0.47954300	-0.19060500	-0.11638300
C	2.74035400	-2.23439400	1.39743100
C	-0.19466800	-2.57146900	0.20738100
C	2.52675800	-2.98635900	-0.99364800
C	1.81494000	1.62887600	-1.38668300
C	0.99984500	2.90592200	-1.14847600
C	1.38539000	3.58757300	0.16935200
C	1.26542600	2.60810500	1.34234900
C	2.10999100	1.34865300	1.10829200
H	3.00630500	-0.57512300	-1.58019400
H	3.80085800	-0.29807500	-0.03359600
H	3.81607000	-2.42791300	1.36686100
H	2.25219800	-3.14431400	1.75616100
H	2.55706900	-1.43960600	2.12178200
H	-1.17237200	-2.12447900	0.36896800
H	0.06011900	-3.18974300	1.07275400

H	-0.24815800	-3.21656400	-0.67522200
H	2.10431600	-2.76799900	-1.97770100
H	3.60733100	-3.10751500	-1.10764000
H	2.12320900	-3.94035000	-0.64500900
H	2.86551000	1.90839500	-1.54840200
H	1.48081800	1.13309900	-2.30440400
H	1.14730300	3.59053000	-1.99096500
H	-0.06638400	2.65465600	-1.12394400
H	0.75199800	4.46384600	0.34057300
H	2.41910300	3.95507500	0.10619700
H	1.58285500	3.08621800	2.27531200
H	0.21409000	2.32703800	1.47160600
H	2.00000900	0.66425800	1.95471600
H	3.16871200	1.63986800	1.07642700
C	-2.37996300	0.09746800	-0.05757600
C	-3.08758500	0.13142300	1.17805500
C	-3.16228000	-0.13356400	-1.22489300
C	-4.46051300	-0.06590600	1.23803100
H	-2.54111300	0.31841800	2.09728700
C	-4.53480500	-0.32948700	-1.15601600
H	-2.67382000	-0.15397600	-2.19407200
C	-5.19980700	-0.29833900	0.07400900
H	-4.96298400	-0.03663600	2.19974900
H	-5.09560400	-0.50669900	-2.06832300
H	-6.27231900	-0.44737400	0.12386200

	1			2			3		
	A			A			A		
Frequencies --	27.9025			34.3999			43.6559		
Red. masses --	3.3705			4.2222			3.4734		
Frc consts --	0.0015			0.0029			0.0039		
IR Inten --	0.0498			1.2900			0.0215		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

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

34	1	-0.09	0.03	0.02	0.05	-0.03	-0.01	0.11	0.02	-0.03
35	1	-0.07	0.03	0.05	-0.02	0.03	-0.04	0.07	0.00	-0.10
36	6	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.04	0.02	-0.01	0.00	0.02
37	6	0.07	-0.14	0.02	-0.03	0.05	0.00	-0.03	-0.17	0.01
38	6	-0.06	0.16	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.16	-0.03
39	6	0.06	-0.11	0.07	-0.05	0.18	-0.04	-0.03	-0.19	-0.04
40	1	0.11	-0.27	0.02	-0.04	0.01	0.01	-0.05	-0.30	0.04
41	6	-0.06	0.19	0.04	-0.01	0.13	-0.03	0.01	0.14	-0.08
42	1	-0.11	0.27	-0.03	0.03	-0.06	0.02	0.03	0.30	-0.02
43	6	0.00	0.06	0.07	-0.04	0.22	-0.05	-0.01	-0.03	-0.09
44	1	0.11	-0.21	0.09	-0.08	0.24	-0.05	-0.05	-0.32	-0.05
45	1	-0.11	0.32	0.04	0.00	0.17	-0.05	0.03	0.26	-0.11
46	1	0.00	0.08	0.11	-0.06	0.33	-0.08	-0.01	-0.05	-0.13

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	60.6408	69.7155	83.9253
Red. masses --	3.9623	1.2904	2.4888
Frc consts --	0.0086	0.0037	0.0103
IR Inten --	0.9430	0.3437	0.1027

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	0.03	0.25	0.00	-0.01	0.01	-0.02	-0.02	0.00
2	7	-0.01	-0.02	-0.09	0.01	0.01	0.07	0.00	-0.01	-0.04
3	6	-0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.02	0.01	0.02	0.02
4	6	0.01	0.00	0.04	0.02	0.00	0.04	-0.03	-0.01	-0.10
5	6	0.00	0.00	0.04	0.01	0.00	0.02	-0.01	-0.01	-0.04
6	6	0.00	0.00	0.08	0.01	0.00	0.03	-0.01	-0.01	-0.02
7	6	-0.09	-0.04	0.00	0.04	-0.05	-0.01	-0.01	0.17	0.07
8	6	-0.02	-0.03	-0.16	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.03	-0.13
9	6	0.06	0.01	-0.04	-0.04	0.02	-0.02	0.06	-0.08	0.15
10	6	-0.05	-0.05	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.06	0.02	-0.01
11	6	-0.06	-0.05	-0.04	-0.01	-0.02	-0.03	-0.02	0.03	0.06
12	6	0.01	0.02	-0.09	-0.03	0.00	-0.04	0.06	0.00	0.05
13	6	0.07	0.08	-0.03	-0.02	0.02	-0.02	0.09	-0.03	0.03

14	6	0.05	0.06	-0.01	0.00	0.03	0.01	0.05	-0.04	-0.03
15	1	0.05	0.03	0.04	0.05	0.01	0.05	-0.16	-0.06	-0.12
16	1	-0.01	-0.02	0.08	0.00	0.00	0.07	0.02	0.01	-0.21
17	1	-0.09	-0.03	0.06	0.03	-0.08	-0.04	-0.01	0.18	0.11
18	1	-0.11	-0.05	-0.05	0.02	-0.04	0.00	-0.01	0.20	0.15
19	1	-0.15	-0.05	0.00	0.08	-0.05	0.01	-0.04	0.23	-0.01
20	1	-0.05	-0.03	-0.34	0.08	-0.02	0.45	0.03	-0.05	0.11
21	1	-0.14	0.04	-0.07	0.26	-0.37	-0.39	0.13	-0.23	-0.32
22	1	0.14	-0.09	-0.12	-0.34	0.36	-0.30	-0.14	0.17	-0.27
23	1	0.11	0.03	-0.06	-0.03	0.07	-0.01	0.10	-0.19	0.10
24	1	0.07	0.03	0.02	-0.05	-0.03	-0.03	0.06	-0.08	0.20
25	1	0.06	0.00	-0.08	-0.09	0.03	-0.06	0.05	-0.04	0.23
26	1	-0.06	-0.04	-0.06	0.00	-0.01	0.00	-0.06	0.01	-0.06
27	1	-0.07	-0.10	0.03	0.02	-0.04	0.01	-0.11	0.05	-0.01
28	1	-0.11	-0.09	-0.08	-0.02	-0.04	-0.04	-0.06	0.04	0.06
29	1	-0.05	-0.06	0.03	-0.01	-0.04	-0.03	-0.03	0.04	0.11
30	1	0.01	0.03	-0.11	-0.04	0.00	-0.05	0.09	0.01	0.10
31	1	0.00	0.02	-0.17	-0.03	0.02	-0.04	0.06	-0.03	0.01
32	1	0.12	0.13	-0.08	-0.03	0.05	-0.03	0.15	-0.06	0.03
33	1	0.08	0.09	0.04	-0.02	0.01	-0.02	0.09	-0.01	0.08
34	1	0.09	0.11	0.03	0.00	0.04	0.02	0.07	-0.05	-0.04
35	1	0.05	0.06	-0.07	-0.01	0.04	0.00	0.06	-0.06	-0.07
36	6	0.01	0.02	0.17	0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.00
37	6	-0.11	0.01	0.10	0.00	-0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.00
38	6	0.12	0.01	0.10	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00
39	6	-0.11	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00
40	1	-0.19	0.02	0.15	0.00	-0.03	0.01	-0.02	-0.02	0.00
41	6	0.11	-0.01	-0.03	0.00	0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00
42	1	0.21	0.01	0.14	0.01	0.02	0.00	-0.02	-0.02	0.00
43	6	0.00	-0.02	-0.09	0.00	0.02	-0.01	-0.02	0.02	0.00
44	1	-0.20	-0.01	-0.07	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00
45	1	0.20	-0.01	-0.09	0.00	0.04	-0.01	-0.02	0.01	0.00
46	1	0.00	-0.03	-0.19	0.00	0.03	-0.01	-0.03	0.03	-0.01

48 bph-DAC

0 1 -828.443610

C	-2.30949900	1.28180200	-0.16224000
N	-0.94775600	1.20031800	-0.33051700
C	-0.21290100	0.00013900	-0.17825500
N	-0.94757900	-1.20015100	-0.33069600
C	-2.30930800	-1.28187700	-0.16242800
C	-3.01128000	-0.00012800	0.30453300
O	-2.92030000	2.32777100	-0.32302700
O	-2.91994200	-2.32790800	-0.32341900
C	-4.46732200	-0.00020400	-0.18141600
C	-2.96952600	-0.00024300	1.85945100
C	-0.18073600	-2.41414900	-0.58272000
C	-0.18112000	2.41447800	-0.58242500
B	1.19050000	0.00026200	0.04127000
H	-4.51816600	-0.00012100	-1.27235600
H	-4.97564300	-0.89281700	0.18178900
H	-4.97580000	0.89226000	0.18193000
H	-3.48035600	0.88768900	2.23778200
H	-3.48023800	-0.88830300	2.23764200
H	-1.94411100	-0.00020100	2.23831400
H	0.55004900	-2.57278300	0.22023500
H	-0.86975800	-3.25492300	-0.60738300
H	0.34609900	-2.33815900	-1.53772300
H	-0.87021100	3.25520900	-0.60634200
H	0.55004900	2.57281100	0.22026800
H	0.34529600	2.33890900	-1.53768900
C	2.69588400	0.00014800	0.09050700
C	3.38538700	-0.00017800	1.32567500
C	3.46730600	0.00031200	-1.09588700
C	4.77440000	-0.00031900	1.37246600
H	2.81379500	-0.00034400	2.24658400

C	4.85603200	0.00020700	-1.04888100
H	2.96032600	0.00054000	-2.05387400
C	5.50837400	-0.00011000	0.18534900
H	5.28704000	-0.00055400	2.32750200
H	5.43195400	0.00033100	-1.96720300
H	6.59232400	-0.00020500	0.22185700

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		21.5767			30.5809			40.8415		
Red. masses --		3.5757			3.8921			5.0644		
Frc consts --		0.0010			0.0021			0.0050		
IR Inten --		0.7407			0.0087			0.0489		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.04	-0.08	0.01	-0.02
2	7	-0.01	0.00	-0.09	0.00	0.01	0.03	-0.07	0.09	0.00
3	6	-0.01	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.13	0.00
4	7	-0.01	0.00	-0.09	0.00	0.01	-0.03	0.07	0.09	0.00
5	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.04	0.08	0.01	0.02
6	6	0.04	0.00	0.07	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00
7	8	-0.02	-0.02	-0.02	0.00	0.01	0.09	-0.14	-0.03	-0.04
8	8	-0.02	0.02	-0.02	0.00	0.01	-0.09	0.14	-0.03	0.04
9	6	-0.01	0.00	0.23	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.12	0.00
10	6	0.22	0.00	0.06	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.01	0.00
11	6	-0.03	0.01	-0.15	0.00	0.01	-0.07	0.14	0.13	0.00
12	6	-0.03	-0.01	-0.15	0.00	0.01	0.07	-0.14	0.13	0.00
13	5	-0.01	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.17	0.00
14	1	-0.14	0.00	0.24	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.14	0.00
15	1	0.03	0.00	0.29	0.00	0.00	-0.03	0.06	-0.15	0.01
16	1	0.03	0.00	0.29	0.00	0.00	0.03	-0.06	-0.15	-0.01
17	1	0.27	0.00	0.12	0.00	-0.08	0.03	-0.05	-0.03	-0.01
18	1	0.27	0.00	0.12	0.00	-0.08	-0.03	0.05	-0.03	0.01
19	1	0.27	0.00	-0.06	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.06	0.00

20	1	-0.02	-0.05	-0.17	0.01	-0.01	-0.08	0.13	0.16	0.02
21	1	-0.04	0.01	-0.19	0.00	0.01	-0.09	0.18	0.10	-0.02
22	1	-0.04	0.05	-0.16	-0.01	0.04	-0.08	0.16	0.17	0.02
23	1	-0.04	-0.01	-0.19	0.00	0.01	0.09	-0.18	0.10	0.02
24	1	-0.02	0.05	-0.17	-0.01	-0.01	0.08	-0.13	0.16	-0.02
25	1	-0.04	-0.05	-0.16	0.01	0.04	0.08	-0.16	0.17	-0.02
26	6	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.09	0.00
27	6	-0.07	0.00	0.03	0.00	0.22	0.00	0.00	0.02	0.00
28	6	0.03	0.00	0.03	0.00	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.00
29	6	-0.07	0.00	0.08	0.00	0.24	0.00	0.00	-0.16	0.00
30	1	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.39	0.00	0.00	0.09	0.00
31	6	0.03	0.00	0.08	0.00	-0.24	0.00	0.00	-0.18	0.00
32	1	0.07	0.00	0.01	0.00	-0.39	0.00	0.00	0.06	0.00
33	6	-0.02	0.00	0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.00
34	1	-0.10	0.00	0.10	0.00	0.43	0.00	0.00	-0.22	0.00
35	1	0.06	0.00	0.11	0.00	-0.43	0.00	0.00	-0.26	0.00
36	1	-0.02	0.00	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.41	0.00

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	51.8842	82.8945	89.8157
Red. masses --	6.0979	4.4306	4.3999
Frc consts --	0.0097	0.0179	0.0209
IR Inten --	2.0116	0.3072	5.7977

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.02	0.08	0.00	0.02	0.07	-0.03	-0.01	-0.03
2	7	-0.01	0.00	-0.06	-0.02	-0.01	-0.09	-0.01	0.00	0.10
3	6	0.01	0.00	-0.13	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02
4	7	-0.01	0.00	-0.06	0.02	-0.01	0.09	-0.01	0.00	0.10
5	6	0.01	-0.02	0.08	0.00	0.02	-0.07	-0.03	0.01	-0.03
6	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00
7	8	0.02	0.05	0.25	0.01	0.04	0.21	-0.04	-0.03	-0.14
8	8	0.02	-0.05	0.25	-0.01	0.04	-0.21	-0.04	0.03	-0.14
9	6	0.03	0.00	-0.13	0.00	0.04	0.00	-0.05	0.00	0.09

10	6	-0.16	0.00	0.01	0.00	-0.12	0.00	0.06	0.00	0.00
11	6	-0.02	-0.01	-0.05	0.04	-0.03	0.25	-0.01	-0.02	0.19
12	6	-0.02	0.01	-0.05	-0.04	-0.03	-0.25	-0.01	0.02	0.19
13	5	0.03	0.00	-0.27	0.00	0.05	0.00	0.03	0.00	-0.21
14	1	0.14	0.00	-0.13	0.00	0.11	0.00	-0.12	0.00	0.09
15	1	0.00	0.00	-0.17	-0.01	0.02	-0.06	-0.03	0.00	0.12
16	1	0.00	0.00	-0.17	0.01	0.02	0.06	-0.03	0.00	0.12
17	1	-0.19	0.00	-0.04	0.01	-0.14	0.06	0.09	0.00	0.03
18	1	-0.19	0.00	-0.04	-0.01	-0.14	-0.06	0.09	0.00	0.03
19	1	-0.19	0.00	0.11	0.00	-0.15	0.00	0.09	0.00	-0.06
20	1	0.00	-0.01	-0.07	0.05	0.11	0.26	0.06	0.12	0.16
21	1	-0.02	-0.01	-0.03	0.05	-0.05	0.37	0.01	-0.04	0.36
22	1	-0.03	-0.02	-0.06	0.02	-0.17	0.23	-0.08	-0.14	0.14
23	1	-0.02	0.01	-0.03	-0.05	-0.05	-0.38	0.01	0.04	0.35
24	1	0.00	0.01	-0.06	-0.05	0.11	-0.26	0.06	-0.12	0.16
25	1	-0.03	0.02	-0.06	-0.02	-0.17	-0.23	-0.08	0.14	0.14
26	6	0.02	0.00	-0.16	0.00	0.05	0.00	0.03	0.00	-0.15
27	6	-0.11	0.00	-0.09	0.00	0.02	0.00	-0.06	0.00	-0.10
28	6	0.14	0.00	-0.08	0.00	0.04	0.00	0.13	0.00	-0.09
29	6	-0.11	0.00	0.06	0.00	-0.03	0.00	-0.07	0.00	0.01
30	1	-0.21	0.00	-0.15	0.00	0.04	0.00	-0.14	0.00	-0.15
31	6	0.14	0.00	0.07	0.00	0.00	0.00	0.12	0.00	0.02
32	1	0.24	0.00	-0.13	0.00	0.05	0.00	0.20	0.00	-0.13
33	6	0.01	0.00	0.14	0.00	-0.04	0.00	0.03	0.00	0.07
34	1	-0.21	0.00	0.12	0.00	-0.06	0.00	-0.15	0.00	0.06
35	1	0.24	0.00	0.13	0.00	-0.02	0.00	0.20	0.00	0.07
36	1	0.01	0.00	0.25	0.00	-0.09	0.00	0.02	0.00	0.16

0 3 -828.412794

C	1.90516000	-1.37551700	-0.22262700
N	0.58698000	-0.91343900	-0.26548000
C	0.20886400	0.42465900	-0.13887400
N	1.23844900	1.36847800	-0.14341400

C	2.59425100	1.06217700	-0.10728000
C	2.96839800	-0.37685000	0.22006400
O	2.17887200	-2.53683700	-0.45466000
O	3.42847000	1.93552400	-0.25354800
C	4.32094700	-0.72820600	-0.41726500
C	3.06914900	-0.48030500	1.77176400
C	0.91851100	2.80142100	-0.26048200
C	-0.46922200	-1.91614400	-0.49243600
B	-1.21987000	0.85893000	-0.03024800
H	4.27100800	-0.66526300	-1.50640900
H	5.08149800	-0.02954600	-0.07065900
H	4.60161500	-1.74556500	-0.14750000
H	3.35119900	-1.49787100	2.04839100
H	3.83532300	0.20981700	2.13014900
H	2.12325200	-0.23518700	2.26108500
H	-0.15430400	2.92142000	-0.11875500
H	1.47069700	3.35811500	0.49522700
H	1.21047600	3.16774400	-1.24600500
H	0.01536400	-2.88197100	-0.59710900
H	-1.16119800	-1.93192400	0.34855900
H	-1.02217600	-1.68092700	-1.40164400
C	-2.65995600	0.42230000	0.03389200
C	-3.30605600	0.18856200	1.27644700
C	-3.45398100	0.29154100	-1.13578100
C	-4.64658000	-0.16994600	1.33925100
H	-2.74373000	0.29484400	2.19861000
C	-4.79406300	-0.06666700	-1.06437000
H	-3.00925900	0.48050500	-2.10764100
C	-5.40184600	-0.30161900	0.17139100
H	-5.10850200	-0.34616500	2.30496500
H	-5.37162100	-0.16160900	-1.97786600
H	-6.44849100	-0.57826800	0.22360200

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		20.3841			23.7984			43.1339		
Red. masses --		3.6908			3.8919			5.0655		
Frc consts --		0.0009			0.0013			0.0056		
IR Inten --		0.3257			0.1513			0.2592		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.07	0.10	-0.02	-0.04
2	7	0.00	0.02	-0.07	0.00	-0.01	0.09	0.08	-0.09	-0.01
3	6	0.00	0.02	-0.07	0.00	-0.01	0.05	0.01	-0.11	0.01
4	7	0.01	0.01	-0.07	-0.01	0.00	0.03	-0.03	-0.06	-0.01
5	6	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.01	-0.01
6	6	-0.03	0.00	0.06	0.02	0.01	-0.03	0.04	0.03	0.01
7	8	-0.01	0.00	0.04	-0.02	-0.02	0.13	0.17	0.01	-0.09
8	8	0.02	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	-0.07	-0.06	0.04	-0.04
9	6	0.01	-0.03	0.17	-0.03	0.00	-0.14	0.09	0.09	0.09
10	6	-0.14	0.05	0.07	0.15	0.04	-0.04	-0.04	0.04	0.02
11	6	0.03	0.01	-0.11	-0.02	-0.01	0.02	-0.11	-0.08	-0.03
12	6	0.00	0.03	-0.13	-0.01	-0.02	0.17	0.12	-0.14	0.00
13	5	0.01	0.03	-0.08	-0.01	0.00	0.02	0.00	-0.18	0.02
14	1	0.09	-0.06	0.16	-0.11	-0.02	-0.13	0.14	0.08	0.09
15	1	0.00	-0.03	0.20	0.00	0.01	-0.21	0.04	0.13	0.12
16	1	-0.02	-0.03	0.22	0.00	0.01	-0.14	0.13	0.11	0.11
17	1	-0.18	0.05	0.12	0.18	0.05	-0.04	0.00	0.05	0.04
18	1	-0.16	0.05	0.10	0.17	0.05	-0.12	-0.09	0.08	0.06
19	1	-0.17	0.08	0.00	0.18	0.04	0.03	-0.07	-0.01	-0.03
20	1	0.03	0.02	-0.12	-0.01	0.00	0.09	-0.11	-0.12	0.01
21	1	0.03	0.03	-0.13	0.03	0.00	-0.02	-0.10	-0.03	-0.07
22	1	0.04	-0.03	-0.12	-0.08	-0.02	0.00	-0.16	-0.09	-0.05
23	1	0.00	0.04	-0.21	-0.01	-0.02	0.17	0.16	-0.12	0.04
24	1	0.01	-0.05	-0.12	0.03	0.00	0.20	0.10	-0.13	-0.02
25	1	-0.02	0.10	-0.10	-0.06	-0.05	0.19	0.14	-0.19	-0.03
26	6	0.01	0.01	-0.03	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.09	0.02

27	6	0.10	-0.14	-0.01	0.00	-0.17	-0.04	-0.04	-0.05	0.02
28	6	-0.07	0.13	0.02	-0.02	0.18	-0.02	-0.04	0.02	0.02
29	6	0.11	-0.16	0.05	0.00	-0.16	-0.07	-0.09	0.11	0.01
30	1	0.17	-0.24	-0.03	0.01	-0.31	-0.02	-0.03	-0.14	0.02
31	6	-0.06	0.11	0.07	-0.02	0.18	-0.06	-0.08	0.19	0.02
32	1	-0.14	0.25	0.01	-0.03	0.32	0.01	-0.02	-0.01	0.02
33	6	0.03	-0.04	0.09	-0.01	0.01	-0.09	-0.11	0.24	0.01
34	1	0.18	-0.27	0.06	0.00	-0.29	-0.09	-0.10	0.14	0.01
35	1	-0.12	0.20	0.10	-0.03	0.31	-0.07	-0.10	0.28	0.01
36	1	0.04	-0.05	0.13	-0.02	0.01	-0.12	-0.15	0.38	0.01

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	45.9291	62.4306	83.9952
Red. masses --	4.1335	3.2474	1.9538
Frc consts --	0.0051	0.0075	0.0081
IR Inten --	2.6853	1.4968	2.6913

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.02	0.05	0.00	-0.02	0.06	0.00	0.00	0.00
2	7	0.01	-0.02	-0.04	0.02	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.04
3	6	-0.01	-0.02	-0.09	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
4	7	-0.01	-0.01	-0.05	-0.01	0.00	0.06	0.00	0.00	0.07
5	6	-0.01	0.02	0.08	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.01
6	6	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01
7	8	0.01	-0.03	0.14	0.00	-0.05	0.21	0.01	0.01	-0.04
8	8	-0.02	0.05	0.25	-0.01	-0.01	-0.11	0.00	-0.01	-0.03
9	6	-0.03	0.05	-0.12	-0.01	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.01
10	6	0.14	-0.05	-0.02	0.06	0.06	0.00	0.00	-0.01	0.01
11	6	-0.02	-0.01	-0.03	-0.03	0.00	0.13	-0.01	0.00	0.11
12	6	0.02	-0.03	-0.05	0.03	0.03	-0.25	0.00	-0.01	0.06
13	5	-0.01	-0.03	-0.17	0.00	-0.03	0.04	-0.01	0.01	-0.13
14	1	-0.12	0.08	-0.12	-0.05	-0.04	-0.03	0.02	0.00	0.01
15	1	-0.02	0.05	-0.16	0.00	-0.01	-0.08	0.01	-0.01	0.02
16	1	0.01	0.04	-0.18	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01

17	1	0.18	-0.06	-0.08	0.07	0.07	0.03	0.00	-0.01	0.00
18	1	0.15	-0.05	-0.05	0.07	0.08	-0.05	-0.01	-0.01	0.02
19	1	0.17	-0.09	0.07	0.07	0.08	0.02	-0.01	-0.01	0.00
20	1	-0.06	-0.05	-0.36	0.01	0.02	0.43	0.05	0.04	0.58
21	1	-0.28	-0.05	0.20	0.20	-0.01	-0.03	0.36	0.02	-0.19
22	1	0.30	0.08	0.10	-0.31	0.00	0.05	-0.48	-0.07	-0.06
23	1	0.03	-0.02	-0.06	0.05	0.06	-0.51	-0.01	-0.03	0.19
24	1	0.02	-0.05	-0.06	0.09	-0.20	-0.20	-0.06	0.10	0.00
25	1	0.03	-0.02	-0.05	-0.05	0.24	-0.15	0.08	-0.10	-0.01
26	6	-0.01	-0.02	-0.11	0.00	-0.03	0.02	-0.01	0.01	-0.11
27	6	0.06	0.02	-0.06	-0.03	0.01	0.02	0.06	0.03	-0.07
28	6	-0.10	-0.02	-0.05	0.02	-0.04	0.01	-0.07	-0.01	-0.06
29	6	0.06	0.06	0.04	-0.03	0.04	0.00	0.07	0.02	0.01
30	1	0.13	0.03	-0.10	-0.04	0.02	0.03	0.11	0.04	-0.10
31	6	-0.10	0.01	0.05	0.01	0.00	0.00	-0.06	-0.02	0.02
32	1	-0.16	-0.05	-0.09	0.03	-0.07	0.02	-0.12	-0.03	-0.09
33	6	-0.02	0.05	0.10	-0.02	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.05
34	1	0.12	0.09	0.08	-0.05	0.07	0.00	0.12	0.04	0.04
35	1	-0.17	0.00	0.09	0.02	-0.01	-0.01	-0.11	-0.04	0.05
36	1	-0.03	0.08	0.17	-0.03	0.06	-0.02	0.01	-0.01	0.11

49 bphCN

0 1 -348.614964

B	2.51803000	-1.92375700	0.00000000
C	1.50084900	-0.76359200	0.00000000
C	1.94746200	0.57129900	0.00000000
C	1.03410500	1.62083500	0.00000000
C	-0.33187600	1.35315200	0.00000000
C	-0.79414300	0.02678300	0.00000000
C	0.12256000	-1.02963400	0.00000000
H	3.01220100	0.78218000	0.00000000
H	1.37982000	2.64780200	0.00000000
H	-1.04895100	2.16508500	0.00000000

H	-0.23977900	-2.05194400	0.00000000
C	-2.20154600	-0.23894300	0.00000000
N	-3.33684300	-0.45196200	0.00000000

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		136.8279			142.7975			181.7969		
Red. masses --		6.4884			10.1485			5.7557		
Frc consts --		0.0716			0.1219			0.1121		
IR Inten --		8.3525			16.7403			4.8283		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.26	0.48	0.32	0.00	0.00	0.00	0.42
2	6	0.00	0.00	-0.09	0.04	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.26
3	6	0.00	0.00	0.17	-0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.29
4	6	0.00	0.00	0.09	-0.12	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.01
5	6	0.00	0.00	-0.13	-0.08	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.28
6	6	0.00	0.00	-0.29	-0.01	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.09
7	6	0.00	0.00	-0.36	0.05	-0.19	0.00	0.00	0.00	-0.14
8	1	0.00	0.00	0.45	-0.07	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.44
9	1	0.00	0.00	0.25	-0.19	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.08
10	1	0.00	0.00	-0.10	-0.15	-0.26	0.00	0.00	0.00	0.57
11	1	0.00	0.00	-0.50	0.12	-0.21	0.00	0.00	0.00	-0.16
12	6	0.00	0.00	-0.06	-0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.05
13	7	0.00	0.00	0.37	-0.15	0.53	0.00	0.00	0.00	-0.11

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		217.4015			374.9604			428.3190		
Red. masses --		6.7044			4.2426			3.8290		
Frc consts --		0.1867			0.3514			0.4139		
IR Inten --		12.4587			0.1844			0.0435		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.34	0.31	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.05
2	6	-0.18	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.31

3	6	-0.02	-0.21	0.00	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	-0.01
4	6	0.14	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	-0.22
5	6	0.10	0.11	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.25
6	6	-0.07	0.16	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	-0.04
7	6	-0.22	0.03	0.00	0.00	0.00	0.22	0.00	0.00	-0.12
8	1	0.01	-0.37	0.00	0.00	0.00	-0.51	0.00	0.00	-0.14
9	1	0.29	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.43	0.00	0.00	-0.51
10	1	0.21	0.21	0.00	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	0.53
11	1	-0.37	0.09	0.00	0.00	0.00	0.51	0.00	0.00	-0.42
12	6	-0.07	0.15	0.00	0.00	0.00	-0.31	0.00	0.00	-0.17
13	7	0.00	-0.24	0.00	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	0.07

0 3 -348.569151

B	-2.47297800	-1.91643300	0.00000000
C	-1.50981200	-0.79254200	0.00000000
C	-1.95667200	0.56381800	0.00000000
C	-1.04577600	1.60664400	0.00000000
C	0.32937400	1.36715000	0.00000000
C	0.78731800	0.03689800	0.00000000
C	-0.10746400	-1.03126900	0.00000000
H	-3.01785600	0.78365200	0.00000000
H	-1.40954400	2.62790200	0.00000000
H	1.03915000	2.18367900	0.00000000
H	0.28088300	-2.04206000	0.00000000
C	2.19540200	-0.22956000	0.00000000
N	3.33114900	-0.44254800	0.00000000

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	138.4078	150.9663	200.7618
Red. masses --	6.0049	9.2799	5.0900
Frc consts --	0.0678	0.1246	0.1209
IR Inten --	1.2652	3.5693	1.7164

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.15	0.38	-0.22	0.00	0.00	0.00	0.41
2	6	0.00	0.00	-0.01	0.08	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.14
3	6	0.00	0.00	0.23	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.26
4	6	0.00	0.00	0.07	-0.14	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	-0.19	-0.10	0.21	0.00	0.00	0.00	0.27
6	6	0.00	0.00	-0.29	0.01	0.25	0.00	0.00	0.00	0.01
7	6	0.00	0.00	-0.31	0.09	0.19	0.00	0.00	0.00	-0.24
8	1	0.00	0.00	0.53	-0.07	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.41
9	1	0.00	0.00	0.21	-0.24	0.03	0.00	0.00	0.00	0.03
10	1	0.00	0.00	-0.21	-0.19	0.29	0.00	0.00	0.00	0.56
11	1	0.00	0.00	-0.44	0.20	0.23	0.00	0.00	0.00	-0.36
12	6	0.00	0.00	-0.06	-0.03	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00
13	7	0.00	0.00	0.36	-0.15	-0.54	0.00	0.00	0.00	-0.01

4
5
6
A
A
A

Frequencies --	264.0378	351.6094	448.9594
Red. masses --	7.4013	3.8145	4.4805
Frc consts --	0.3040	0.2778	0.5321
IR Inten --	1.2421	0.2035	13.0608

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.44	-0.36	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.13
2	6	-0.18	0.17	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.33
3	6	-0.03	0.21	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	0.03
4	6	0.13	0.10	0.00	0.00	0.00	0.23	0.00	0.00	-0.20
5	6	0.09	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.23
6	6	-0.08	-0.14	0.00	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	-0.03
7	6	-0.20	0.01	0.00	0.00	0.00	0.21	0.00	0.00	-0.03
8	1	0.00	0.34	0.00	0.00	0.00	-0.48	0.00	0.00	-0.21
9	1	0.27	0.15	0.00	0.00	0.00	0.45	0.00	0.00	-0.58
10	1	0.20	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.37
11	1	-0.33	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.56	0.00	0.00	-0.41
12	6	-0.09	-0.17	0.00	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	-0.28

13 7 -0.03 0.17 0.00 0.00 0.00 0.13 0.00 0.00 0.12

50 bph(NH₂)

0 1 -311.717364

B	-3.14805300	-0.00055600	0.00893400
C	-1.62856100	0.00051400	0.00227600
C	-0.89935500	-1.20931100	-0.00001100
C	0.48210200	-1.21527500	-0.00375000
C	1.19796900	-0.00005400	-0.00447600
C	0.48265900	1.21528900	-0.00378400
C	-0.89893100	1.20982200	0.00006800
H	-1.43256600	-2.15509000	0.00217900
H	1.02681200	-2.15413000	-0.00861200
H	-1.43159000	2.15591200	0.00212900
H	1.02748400	2.15406500	-0.00870200
N	2.57258200	-0.00039200	-0.04663900
H	3.06366900	0.85018200	0.17647800
H	3.06308300	-0.85132300	0.17639500

1	2	3
A	A	A

Frequencies --	130.1564	194.0355	272.5849
Red. masses --	6.2628	7.5883	4.8901
Frc consts --	0.0625	0.1683	0.2141
IR Inten --	3.4234	27.3331	19.3328

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.51	0.00	0.66	0.00	0.00	0.00	-0.21
2	6	0.00	0.00	-0.11	0.00	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.36
3	6	0.00	0.00	-0.18	0.08	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.11
4	6	0.00	0.00	-0.17	0.09	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.23
5	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.15
6	6	0.00	0.00	-0.17	-0.09	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.23
7	6	0.00	0.00	-0.18	-0.08	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.11

C	-0.48583000	1.21327200	-0.00372300
C	-1.20270100	-0.00012500	-0.00489800
C	-0.48581600	-1.21329900	-0.00426700
C	0.89623500	-1.20583700	0.00045600
H	1.43261100	2.14791200	0.00171600
H	-1.02901800	2.15330500	-0.00831900
H	1.43268400	-2.14779000	0.00344200
H	-1.02862700	-2.15352600	-0.00993800
N	-2.57860500	-0.00006200	-0.04870300
H	-3.06663000	-0.84976800	0.18487100
H	-3.06633800	0.85014800	0.18373100

		1		2		3				
		A		A		A				
Frequencies --		127.6277		284.7075		323.5362				
Red. masses --		6.1892		4.6421		2.8078				
Frc consts --		0.0594		0.2217		0.1732				
IR Inten --		0.3699		7.6321		1.6886				
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.50	0.00	0.00	0.21	0.00	0.24	0.00
2	6	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.33	0.00	-0.06	0.00
3	6	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	-0.13	0.00	-0.07	0.13
4	6	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	0.22	0.01	-0.07	-0.13
5	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.16	0.00	-0.05	0.00
6	6	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	0.22	-0.01	-0.07	0.13
7	6	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	-0.13	0.00	-0.07	-0.13
8	1	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	-0.17	0.00	-0.08	0.36
9	1	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	0.37	0.02	-0.07	-0.21
10	1	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	-0.17	0.00	-0.08	-0.36
11	1	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	0.37	-0.02	-0.07	0.21
12	7	-0.01	0.00	0.31	0.02	0.00	-0.15	0.00	0.12	0.00
13	1	0.05	0.00	0.44	-0.08	-0.01	-0.40	-0.16	0.31	0.34
14	1	0.05	0.00	0.44	-0.08	0.01	-0.40	0.16	0.31	-0.34

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		327.2545			380.6455			395.7532		
Red. masses --		3.5219			1.3122			1.1817		
Frc consts --		0.2222			0.1120			0.1090		
IR Inten --		0.1492			354.3182			7.9406		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.28	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.05	0.00
2	6	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.03	0.00
3	6	0.00	-0.09	-0.15	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.03
4	6	0.02	-0.08	0.16	0.00	-0.01	0.03	0.01	0.02	-0.06
5	6	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00
6	6	-0.02	-0.08	-0.16	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.02	0.06
7	6	0.00	-0.09	0.15	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.03
8	1	0.01	-0.09	-0.41	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.04	0.06
9	1	0.02	-0.07	0.25	0.00	-0.01	0.04	0.04	0.03	-0.17
10	1	-0.01	-0.09	0.41	0.01	0.00	0.01	-0.04	-0.04	-0.06
11	1	-0.02	-0.07	-0.26	0.00	0.01	0.03	-0.04	0.03	0.17
12	7	0.00	0.16	0.00	-0.06	0.00	-0.13	0.00	0.01	0.00
13	1	-0.16	0.18	-0.28	0.17	0.08	0.69	0.07	-0.20	-0.62
14	1	0.16	0.18	0.28	0.17	-0.07	0.66	-0.06	-0.21	0.65

51 bphCN-nhc

0 1 -574.866190

B	-0.95344200	-0.83663100	-0.62271700
C	0.52942200	-0.82314800	-0.32113900
C	1.22404200	0.39782000	-0.14308300
C	2.60726000	0.42205900	0.05158700
C	3.33141100	-0.77827300	0.15823600
C	2.65707900	-1.98975200	0.02899500
C	1.29483700	-2.01453500	-0.24742400
H	0.68241500	1.33659100	-0.15601700
H	4.39929200	-0.74988200	0.33433800

H	3.20958400	-2.91953900	0.10497800
H	0.80084600	-2.96406900	-0.41999100
C	-4.25121600	0.13780400	0.78267400
C	-4.17570600	0.97770300	-0.26560200
C	-2.19261000	-0.17794700	-0.18490400
N	-3.02782400	-0.52979800	0.87241700
H	-2.81679800	-1.25662000	1.53284000
H	-5.04376400	-0.02473200	1.49178900
H	-4.88763800	1.69266000	-0.63880300
N	-2.90408800	0.83309800	-0.83299600
H	-2.68206500	1.12268000	-1.76918700
C	3.28290600	1.67770200	0.18848900
N	3.82631100	2.69233800	0.29581800

		1			2				3		
		A			A				A		
Frequencies --		26.5794			35.3707				43.3137		
Red. masses --		6.0284			3.8241				4.5390		
Frc consts --		0.0025			0.0028				0.0050		
IR Inten --		5.9220			5.1281				9.9277		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	5	0.02	0.21	0.03	0.00	-0.06	0.16	0.00	-0.03	-0.19	
2	6	0.01	0.14	0.02	0.01	-0.06	0.11	-0.01	-0.02	-0.09	
3	6	0.09	0.10	-0.02	-0.02	-0.04	0.09	-0.03	-0.01	-0.12	
4	6	0.09	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.05	0.00	0.00	
5	6	0.02	-0.04	0.05	0.04	0.02	-0.10	-0.05	0.01	0.15	
6	6	-0.07	0.01	0.08	0.07	0.00	-0.08	-0.05	0.00	0.17	
7	6	-0.06	0.09	0.07	0.05	-0.04	0.03	-0.02	-0.02	0.05	
8	1	0.16	0.14	-0.06	-0.05	-0.06	0.16	-0.02	-0.01	-0.23	
9	1	0.02	-0.10	0.05	0.05	0.05	-0.19	-0.07	0.02	0.25	
10	1	-0.13	-0.03	0.12	0.11	0.02	-0.14	-0.05	0.01	0.29	
11	1	-0.12	0.11	0.09	0.07	-0.05	0.05	0.00	-0.03	0.07	
12	6	-0.15	-0.24	-0.09	-0.11	-0.01	-0.15	0.09	-0.03	0.04	

13	6	-0.15	-0.10	0.02	0.08	0.10	-0.05	0.12	0.14	0.18
14	6	-0.05	0.06	0.02	0.00	-0.02	0.10	0.02	-0.04	-0.08
15	7	-0.09	-0.13	-0.07	-0.15	-0.06	-0.03	0.02	-0.17	-0.14
16	1	-0.10	-0.24	-0.19	-0.38	-0.31	-0.23	0.02	-0.25	-0.22
17	1	-0.18	-0.40	-0.17	-0.22	-0.03	-0.27	0.10	-0.09	0.04
18	1	-0.18	-0.12	0.06	0.17	0.18	-0.07	0.17	0.26	0.32
19	7	-0.09	0.09	0.10	0.16	0.11	0.12	0.08	0.10	0.10
20	1	-0.06	0.20	0.14	0.30	0.19	0.18	0.12	0.32	0.18
21	6	0.18	-0.03	-0.06	-0.04	0.02	-0.05	-0.06	0.02	-0.04
22	7	0.26	-0.07	-0.11	-0.07	0.04	-0.07	-0.09	0.03	-0.08

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	122.5434	132.9954	150.9952
Red. masses --	5.5397	5.7439	5.3124
Frc consts --	0.0490	0.0599	0.0714
IR Inten --	31.9869	5.8820	4.3379

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.03	-0.01	0.05	0.12	-0.10	-0.06	-0.16	-0.03
2	6	0.01	-0.04	-0.07	0.00	-0.03	0.15	-0.04	0.00	-0.09
3	6	0.02	-0.05	-0.11	-0.01	-0.05	0.35	-0.12	0.03	0.07
4	6	0.01	-0.05	-0.04	0.01	-0.06	0.22	-0.14	0.07	0.17
5	6	-0.02	-0.06	0.04	0.02	-0.06	0.02	-0.11	0.09	0.18
6	6	-0.03	-0.06	0.04	0.02	-0.05	-0.08	-0.02	0.07	-0.04
7	6	-0.02	-0.05	-0.01	0.01	-0.03	-0.04	0.02	0.04	-0.22
8	1	0.03	-0.04	-0.15	-0.02	-0.05	0.49	-0.18	0.00	0.09
9	1	-0.03	-0.08	0.11	0.04	-0.08	-0.08	-0.13	0.13	0.29
10	1	-0.04	-0.06	0.11	0.03	-0.06	-0.23	0.03	0.09	-0.09
11	1	-0.04	-0.04	0.02	0.02	-0.01	-0.18	0.08	0.05	-0.42
12	6	0.00	-0.17	-0.09	0.07	-0.05	0.02	0.00	-0.02	-0.03
13	6	-0.07	-0.15	-0.08	-0.04	-0.01	0.04	0.04	-0.05	-0.05
14	6	0.11	0.19	0.06	0.03	0.11	-0.11	0.03	-0.05	0.05
15	7	0.20	0.22	0.16	0.09	0.00	-0.11	0.05	0.07	0.11
16	1	-0.10	-0.39	-0.41	0.31	0.21	0.06	-0.23	-0.34	-0.25

17	1	-0.02	-0.29	-0.14	0.11	-0.14	0.04	-0.02	0.02	-0.04
18	1	-0.15	-0.25	-0.10	-0.11	-0.05	0.10	0.06	-0.04	-0.08
19	7	0.06	0.18	0.09	-0.08	0.07	-0.05	0.09	-0.02	0.04
20	1	0.02	0.14	0.07	-0.13	0.13	-0.04	0.10	-0.07	0.02
21	6	-0.05	-0.03	-0.01	-0.02	-0.02	0.03	-0.03	0.03	0.05
22	7	-0.20	0.05	0.02	-0.12	0.06	-0.28	0.25	-0.10	-0.17

0 3 -574.877082

B	0.99183700	-1.17492400	-0.51855100
C	-0.49794300	-0.99759600	-0.21830600
C	-1.13034200	0.26120300	-0.34216100
C	-2.49490400	0.42691000	-0.07828700
C	-3.28127500	-0.66797600	0.31420200
C	-2.67973700	-1.91938900	0.43003000
C	-1.32477400	-2.08256900	0.16617400
H	-0.55962100	1.12403700	-0.66834100
H	-4.33648600	-0.53275800	0.51527200
H	-3.27827500	-2.77353300	0.72702400
H	-0.88188700	-3.06861800	0.25606500
C	4.34737300	0.40427500	-0.09726400
C	3.61064500	1.18899500	0.72746300
C	2.18792000	-0.35293400	-0.19786300
N	3.48433800	-0.52156600	-0.65372700
H	3.73073500	-1.24862500	-1.30522400
H	5.39757200	0.43251600	-0.32916100
H	3.90567000	2.02124800	1.34275700
N	2.30603500	0.73303800	0.66113000
H	1.52945800	1.09440000	1.19001100
C	-3.08719000	1.72438300	-0.20835600
N	-3.55679800	2.77626100	-0.30875000

1

2

3

A

A

A

Frequencies --	26.9834	46.8695	60.9454
Red. masses --	5.4032	5.1550	4.3481
Frc consts --	0.0023	0.0067	0.0095
IR Inten --	2.7522	2.5573	0.5759

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.02	0.15	-0.12	0.00	0.09	0.17	0.01	0.04	-0.15
2	6	-0.01	0.10	-0.04	-0.02	0.07	0.10	0.00	0.05	-0.14
3	6	-0.07	0.06	-0.08	-0.05	0.06	0.12	-0.03	0.03	-0.13
4	6	-0.06	0.01	-0.02	-0.08	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
5	6	0.01	0.00	0.08	-0.08	-0.06	-0.14	0.05	0.01	0.11
6	6	0.07	0.03	0.13	-0.05	-0.04	-0.15	0.08	0.02	0.08
7	6	0.07	0.08	0.07	-0.02	0.03	-0.04	0.06	0.04	-0.04
8	1	-0.12	0.07	-0.14	-0.05	0.10	0.22	-0.08	0.03	-0.20
9	1	0.01	-0.04	0.12	-0.11	-0.10	-0.24	0.07	0.00	0.21
10	1	0.13	0.02	0.21	-0.05	-0.08	-0.26	0.12	0.02	0.16
11	1	0.11	0.11	0.10	0.01	0.04	-0.06	0.09	0.05	-0.05
12	6	0.06	-0.07	0.00	0.12	-0.13	-0.06	0.04	-0.14	0.21
13	6	0.14	-0.19	0.17	0.21	0.02	-0.12	-0.04	0.01	0.00
14	6	0.03	0.03	-0.04	0.05	0.05	0.08	0.00	0.02	-0.08
15	7	0.00	0.06	-0.13	0.02	-0.12	0.07	0.07	-0.13	0.15
16	1	-0.06	0.17	-0.28	-0.06	-0.21	0.14	0.13	-0.23	0.29
17	1	0.06	-0.07	-0.05	0.11	-0.25	-0.09	0.09	-0.25	0.39
18	1	0.20	-0.32	0.31	0.30	0.06	-0.22	-0.08	0.05	-0.04
19	7	0.11	-0.13	0.15	0.17	0.13	-0.04	-0.06	0.10	-0.19
20	1	0.15	-0.18	0.24	0.22	0.25	-0.05	-0.12	0.21	-0.34
21	6	-0.14	-0.03	-0.08	-0.13	-0.02	0.02	-0.06	-0.01	0.04
22	7	-0.21	-0.06	-0.13	-0.18	-0.04	0.04	-0.11	-0.02	0.09

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	139.1775	144.1755	178.9858
Red. masses --	6.2840	7.4935	5.0355
Frc consts --	0.0717	0.0918	0.0950
IR Inten --	1.9135	5.6737	1.0976

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	-0.05	-0.07	-0.06	0.17	-0.05	0.01	-0.05	-0.02
2	6	0.04	0.02	0.05	-0.06	-0.01	0.01	0.06	0.01	0.19
3	6	0.11	0.09	0.31	-0.12	-0.04	0.10	0.08	0.02	0.14
4	6	0.10	0.09	0.28	-0.12	-0.10	0.12	0.04	0.01	-0.06
5	6	0.06	0.06	0.14	-0.08	-0.15	0.09	-0.02	0.00	-0.23
6	6	0.00	0.01	-0.09	-0.01	-0.13	0.01	-0.01	0.02	-0.01
7	6	-0.02	-0.01	-0.18	-0.01	-0.07	-0.04	0.04	0.04	0.24
8	1	0.14	0.11	0.42	-0.17	0.00	0.13	0.12	0.01	0.20
9	1	0.06	0.07	0.12	-0.08	-0.21	0.11	-0.07	-0.02	-0.47
10	1	-0.04	-0.01	-0.25	0.03	-0.17	-0.03	-0.04	0.03	-0.05
11	1	-0.08	-0.06	-0.44	0.03	-0.06	-0.11	0.05	0.05	0.38
12	6	-0.02	0.00	0.03	0.04	-0.13	0.10	0.01	-0.07	0.12
13	6	-0.07	-0.02	0.00	0.10	-0.07	0.10	-0.06	-0.10	0.10
14	6	0.01	-0.04	-0.07	-0.08	0.21	-0.11	-0.01	0.04	-0.20
15	7	0.03	-0.01	-0.02	-0.08	0.09	-0.07	0.01	0.08	-0.14
16	1	0.07	-0.01	0.00	-0.13	0.01	0.00	0.09	0.02	-0.05
17	1	-0.01	0.02	0.08	0.06	-0.29	0.19	0.04	-0.10	0.27
18	1	-0.12	-0.02	0.02	0.19	-0.16	0.18	-0.09	-0.17	0.21
19	7	-0.06	-0.04	-0.07	0.02	0.19	-0.08	-0.09	0.03	-0.18
20	1	-0.08	-0.09	-0.07	0.06	0.23	-0.05	-0.11	-0.09	-0.12
21	6	0.01	0.03	0.06	0.01	-0.06	0.03	0.02	0.01	-0.03
22	7	-0.17	-0.09	-0.31	0.39	0.09	-0.19	-0.06	-0.02	0.09

52 bph(NH₂)-nhc

0 1 -537.961192

B	0.82183900	0.68081200	0.00385600
C	-0.65911400	0.38838000	0.00001700
C	-1.63642800	1.41486800	0.00274100
C	-2.99297700	1.14582800	-0.00037700
C	-3.45230100	-0.18542800	-0.00465000
C	-2.50689900	-1.22905200	-0.00911600
C	-1.15366600	-0.94220100	-0.00634800

H	-1.29851700	2.44512000	0.00824300
H	-2.84982100	-2.25939400	-0.01749700
H	-0.44048800	-1.75905300	-0.00814700
C	4.33548500	-0.16541800	0.67128400
C	4.33551200	-0.15949400	-0.66915000
C	2.15529200	0.12406000	0.00211900
N	2.99715600	-0.13529400	1.11584700
H	2.77598100	0.29453200	1.99869400
H	5.15320300	-0.28951200	1.36107500
H	5.15337400	-0.27701800	-1.35993400
N	2.99752500	-0.12526800	-1.11343600
H	2.77569100	0.30929000	-1.99379500
H	-3.71351400	1.95799800	-0.00204900
N	-4.80397900	-0.46189200	-0.05037800
H	-5.10478400	-1.38973800	0.20257500
H	-5.44466500	0.27164000	0.20822400

		1				2				3			
		A			A			A					
Frequencies --		34.9153			41.9468			58.1032					
Red. masses --		5.3323			4.7821			3.7355					
Frc consts --		0.0038			0.0050			0.0074					
IR Inten --		19.2355			2.8073			0.2723					
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z			
1	5	0.01	0.29	0.00	0.00	0.00	0.22	0.00	0.00	-0.03			
2	6	0.02	0.18	0.00	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	0.01			
3	6	-0.06	0.09	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.15			
4	6	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.16			
5	6	0.07	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	-0.01			
6	6	0.16	0.02	0.00	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.17			
7	6	0.14	0.13	0.00	0.00	0.00	0.21	0.00	0.00	-0.12			
8	1	-0.15	0.12	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.24			
9	1	0.25	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	-0.29			

10	1	0.21	0.20	0.00	0.00	0.00	0.31	0.00	0.00	-0.20
11	6	-0.09	-0.23	0.00	0.08	0.01	-0.16	0.03	0.13	-0.01
12	6	-0.09	-0.22	0.00	-0.08	-0.01	-0.16	-0.03	-0.13	-0.01
13	6	-0.05	0.11	0.00	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	0.02
14	7	-0.08	0.01	-0.01	0.13	0.02	0.01	0.04	0.22	0.04
15	1	-0.03	-0.02	0.01	0.25	0.04	0.02	0.08	0.39	-0.04
16	1	-0.11	-0.35	0.00	0.17	0.01	-0.25	0.05	0.26	-0.02
17	1	-0.11	-0.35	-0.01	-0.17	-0.01	-0.25	-0.06	-0.27	-0.02
18	7	-0.08	0.02	0.01	-0.14	-0.02	0.01	-0.05	-0.22	0.03
19	1	-0.03	-0.01	-0.01	-0.25	-0.04	0.02	-0.08	-0.39	-0.04
20	1	-0.11	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	0.28
21	7	0.09	-0.18	0.00	0.01	0.00	-0.26	0.00	0.00	-0.04
22	1	0.18	-0.21	0.01	-0.03	0.01	-0.26	0.00	-0.04	-0.18
23	1	0.03	-0.24	0.01	-0.03	0.01	-0.38	0.00	-0.04	0.08

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	127.0173	162.0455	258.9330
Red. masses --	5.0064	4.5147	5.8011
Frc consts --	0.0476	0.0698	0.2292
IR Inten --	0.5168	2.7459	2.2606

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.21	0.02	0.05	0.00	0.05	-0.08	0.00
2	6	0.00	0.00	0.11	0.02	0.10	0.00	-0.07	0.17	0.00
3	6	0.00	0.00	0.17	0.00	0.08	0.00	-0.18	0.11	0.00
4	6	0.00	0.00	0.15	0.01	0.03	0.00	-0.20	0.03	0.00
5	6	0.00	0.00	0.03	0.07	0.01	0.00	-0.16	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.15	0.09	0.04	0.00	-0.07	0.10	0.00
7	6	0.00	0.00	0.19	0.08	0.08	0.00	-0.09	0.18	0.00
8	1	0.00	0.00	0.17	-0.02	0.09	0.00	-0.29	0.15	0.00
9	1	0.00	0.00	0.15	0.12	0.03	0.00	0.02	0.07	0.00
10	1	0.00	0.00	0.22	0.11	0.11	0.00	-0.07	0.19	0.00
11	6	-0.08	0.02	0.07	-0.06	0.19	0.00	0.18	-0.02	0.00
12	6	0.08	-0.02	0.07	-0.06	0.19	0.00	0.18	-0.02	0.00

13	6	0.00	0.00	-0.21	-0.08	-0.21	0.00	0.11	-0.06	0.00
14	7	-0.13	0.02	-0.10	-0.08	-0.22	-0.01	0.17	-0.07	-0.01
15	1	-0.25	0.00	-0.12	-0.19	-0.33	0.01	0.18	-0.10	0.01
16	1	-0.17	0.05	0.17	-0.03	0.41	0.00	0.18	0.02	0.01
17	1	0.17	-0.05	0.17	-0.03	0.41	0.00	0.18	0.02	-0.01
18	7	0.13	-0.02	-0.10	-0.08	-0.22	0.01	0.17	-0.07	0.01
19	1	0.25	0.00	-0.12	-0.19	-0.33	-0.01	0.18	-0.09	-0.01
20	1	0.00	0.00	0.14	-0.02	0.00	0.00	-0.22	0.01	0.00
21	7	0.01	0.00	-0.24	0.08	-0.05	0.00	-0.13	-0.20	0.00
22	1	-0.05	-0.01	-0.36	0.12	-0.07	-0.01	0.04	-0.26	-0.01
23	1	-0.05	-0.01	-0.36	0.04	-0.08	-0.01	-0.26	-0.32	0.03

0 3 -537.964864

B	-0.85615900	1.08220400	0.36771200
C	0.59544200	0.61900600	0.21868800
C	1.60797500	1.46041200	-0.30030900
C	2.92553400	1.04683300	-0.43341600
C	3.31713400	-0.24222500	-0.03946900
C	2.34040100	-1.09443200	0.49625200
C	1.02268400	-0.67175600	0.61827500
H	1.34425500	2.46735700	-0.60719000
H	2.62320300	-2.08943100	0.82887100
H	0.30466100	-1.35614100	1.06187700
C	-3.73677600	-1.12967800	-0.54511100
C	-4.39174600	-0.06283100	-0.02451600
C	-2.14611400	0.38548100	0.12934400
N	-2.38178500	-0.86501500	-0.44181900
H	-1.63887000	-1.43780000	-0.80568800
H	-4.12224600	-2.04216300	-0.96633800
H	-5.44670700	0.11586300	0.08866300
N	-3.43176600	0.84444300	0.38583900
H	-3.60045600	1.74532500	0.80162200
H	3.66800300	1.72926800	-0.83755200

N	4.65803800	-0.63987200	-0.11258900
H	4.81236500	-1.63707400	-0.14745200
H	5.21797100	-0.14798300	-0.79381800

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		36.1049			47.6596			62.6589		
Red. masses --		4.0657			4.8418			4.2393		
Frc consts --		0.0031			0.0065			0.0098		
IR Inten --		1.3346			1.1336			2.0448		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.02	0.16	-0.02	0.16	0.06	0.00	0.10	-0.09
2	6	-0.01	-0.01	0.10	-0.02	0.12	0.09	-0.01	0.08	-0.12
3	6	-0.06	-0.06	-0.10	0.02	0.08	0.10	0.04	0.03	-0.09
4	6	-0.07	-0.07	-0.16	-0.01	0.00	0.04	0.03	-0.03	-0.01
5	6	-0.02	-0.01	-0.03	-0.09	-0.05	-0.05	-0.03	-0.03	0.05
6	6	0.04	0.05	0.17	-0.13	-0.01	-0.04	-0.10	0.01	-0.01
7	6	0.04	0.05	0.23	-0.09	0.08	0.03	-0.09	0.06	-0.09
8	1	-0.10	-0.10	-0.20	0.07	0.11	0.15	0.10	0.03	-0.12
9	1	0.08	0.10	0.28	-0.18	-0.04	-0.09	-0.15	0.00	0.02
10	1	0.08	0.10	0.37	-0.12	0.11	0.04	-0.14	0.10	-0.11
11	6	0.05	0.06	-0.18	0.20	-0.11	0.03	0.07	-0.02	-0.01
12	6	0.02	-0.02	-0.06	0.08	-0.11	-0.11	0.04	-0.15	0.21
13	6	0.01	0.00	0.06	0.03	0.07	0.03	0.01	0.06	-0.05
14	7	0.04	0.08	-0.12	0.17	0.00	0.12	0.06	0.11	-0.18
15	1	0.07	0.13	-0.15	0.25	0.04	0.22	0.07	0.21	-0.32
16	1	0.08	0.11	-0.31	0.31	-0.17	0.07	0.11	-0.01	-0.07
17	1	0.01	-0.05	-0.06	0.06	-0.18	-0.21	0.04	-0.27	0.37
18	7	-0.01	-0.05	0.09	-0.02	-0.01	-0.10	0.00	-0.09	0.16
19	1	-0.04	-0.11	0.20	-0.12	0.02	-0.20	-0.03	-0.18	0.34
20	1	-0.11	-0.11	-0.32	0.02	-0.03	0.04	0.08	-0.06	0.02
21	7	-0.02	-0.01	-0.10	-0.13	-0.16	-0.15	-0.04	-0.08	0.15
22	1	-0.02	-0.01	0.02	-0.21	-0.17	-0.21	-0.07	-0.08	0.19

23	1	-0.09	-0.09	-0.22	-0.12	-0.16	-0.14	0.03	-0.11	0.18	
			4			5			6		
			A			A			A		
Frequencies --		135.7965			180.1914			264.0324			
Red. masses --		5.3102			5.8018			5.0156			
Frc consts --		0.0577			0.1110			0.2060			
IR Inten --		2.8345			2.7019			5.0938			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	5	-0.01	-0.04	-0.14	-0.01	-0.02	-0.14	0.04	-0.06	0.12	
2	6	0.04	0.04	0.08	0.04	0.15	-0.10	0.02	0.09	0.15	
3	6	0.06	0.06	0.15	0.11	0.12	-0.03	-0.04	0.07	0.03	
4	6	0.06	0.05	0.13	0.10	0.05	0.04	-0.09	0.00	-0.13	
5	6	0.03	0.01	0.03	0.01	0.02	0.03	-0.12	0.00	-0.08	
6	6	0.05	0.06	0.14	-0.04	0.10	0.06	-0.11	-0.02	-0.12	
7	6	0.05	0.07	0.16	-0.02	0.16	-0.01	-0.06	0.04	0.05	
8	1	0.07	0.07	0.17	0.17	0.13	-0.05	-0.06	0.07	0.05	
9	1	0.05	0.06	0.15	-0.10	0.09	0.09	-0.11	-0.05	-0.19	
10	1	0.05	0.08	0.18	-0.07	0.21	-0.02	-0.09	0.08	0.05	
11	6	-0.11	-0.06	0.09	-0.11	0.06	-0.16	-0.04	0.01	0.05	
12	6	-0.04	-0.04	0.16	-0.02	0.09	-0.12	0.12	0.10	0.07	
13	6	-0.01	-0.01	-0.22	0.02	-0.20	0.13	0.15	-0.15	-0.09	
14	7	-0.10	-0.01	-0.20	-0.07	-0.19	0.14	0.01	-0.12	-0.11	
15	1	-0.15	-0.09	-0.17	-0.14	-0.13	-0.10	-0.08	-0.28	-0.05	
16	1	-0.17	-0.08	0.20	-0.19	0.16	-0.30	-0.19	0.04	0.10	
17	1	-0.02	-0.05	0.33	-0.01	0.22	-0.22	0.14	0.22	0.14	
18	7	0.02	0.01	-0.11	0.06	-0.14	0.20	0.24	0.00	-0.07	
19	1	0.09	-0.04	0.03	0.13	-0.04	0.01	0.40	0.00	0.01	
20	1	0.06	0.04	0.12	0.15	0.01	0.07	-0.08	-0.04	-0.18	
21	7	-0.02	-0.10	-0.23	-0.04	-0.15	-0.04	-0.11	0.05	0.12	
22	1	-0.12	-0.11	-0.33	-0.18	-0.17	-0.06	-0.05	0.05	0.36	
23	1	-0.10	-0.11	-0.31	-0.01	-0.22	-0.07	-0.03	-0.05	0.11	

0 1 -596.923193

B	0.65873400	-1.59597900	-0.44733600
C	-0.79351900	-1.13706700	-0.19297800
C	-1.82575300	-2.08052000	-0.00891400
C	-3.14320400	-1.68335600	0.19837200
C	-3.47588200	-0.33206800	0.18070300
C	-2.47298300	0.62982300	-0.02016600
C	-1.14235400	0.22741800	-0.18360000
H	-1.57296900	-3.13441800	-0.03685800
H	-3.91910600	-2.42421400	0.35236600
H	-4.50234400	-0.01339500	0.31632400
H	-0.37857800	0.98648700	-0.31043500
C	2.52541700	-0.18368800	-1.22795300
C	3.61400800	0.62215800	-0.99623000
C	4.04116100	0.90069800	0.30772800
C	3.28628700	0.36312100	1.35637200
C	2.16527500	-0.39169500	1.10649100
N	1.77056700	-0.70844100	-0.18841400
H	4.92348000	1.49649400	0.49610800
H	2.22865300	-0.49432300	-2.21964600
H	4.15173200	1.00878600	-1.85350000
H	3.55297900	0.55276600	2.38928600
H	1.55278500	-0.80227600	1.89685200
C	-2.80942100	2.02189900	-0.03779500
N	-3.07692400	3.14610600	-0.05244100

	1	2	3
	A	A	A

Frequencies --	26.5983	36.0618	47.3812
Red. masses --	5.1904	3.8915	5.9435
Frc consts --	0.0022	0.0030	0.0079
IR Inten --	7.7955	0.6693	1.9560

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

1	5	-0.02	0.11	-0.21	0.00	0.01	-0.08	-0.01	0.11	0.14
2	6	0.00	0.06	-0.07	0.00	0.01	-0.06	-0.02	0.08	0.08
3	6	0.05	0.04	0.09	0.01	0.00	-0.04	0.00	0.04	-0.03
4	6	0.07	0.00	0.23	0.02	-0.01	0.01	-0.04	-0.02	-0.14
5	6	0.01	-0.01	0.17	0.01	-0.01	0.04	-0.09	-0.04	-0.12
6	6	-0.05	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.03	-0.11	0.01	0.00
7	6	-0.05	0.05	-0.12	0.00	0.01	-0.03	-0.08	0.07	0.09
8	1	0.08	0.04	0.12	0.02	0.00	-0.06	0.05	0.05	-0.05
9	1	0.11	-0.02	0.37	0.03	-0.02	0.02	-0.02	-0.06	-0.23
10	1	0.01	-0.04	0.26	0.02	-0.02	0.09	-0.11	-0.08	-0.21
11	1	-0.09	0.07	-0.24	-0.01	0.01	-0.04	-0.09	0.10	0.18
12	6	0.08	0.10	-0.03	0.16	-0.16	-0.03	0.04	-0.02	0.02
13	6	0.11	0.02	0.09	0.15	-0.17	0.01	0.14	-0.14	-0.05
14	6	0.08	-0.12	0.13	0.00	-0.01	0.03	0.23	-0.16	-0.08
15	6	0.01	-0.17	0.05	-0.16	0.16	0.00	0.21	-0.03	-0.03
16	6	-0.03	-0.08	-0.06	-0.17	0.18	-0.04	0.11	0.09	0.04
17	7	0.01	0.05	-0.10	0.00	0.01	-0.05	0.03	0.07	0.07
18	1	0.10	-0.19	0.21	0.00	-0.02	0.06	0.31	-0.25	-0.13
19	1	0.10	0.19	-0.06	0.28	-0.30	-0.02	-0.03	-0.02	0.04
20	1	0.16	0.07	0.14	0.28	-0.30	0.03	0.15	-0.23	-0.09
21	1	-0.03	-0.27	0.08	-0.29	0.29	0.01	0.27	-0.02	-0.05
22	1	-0.10	-0.09	-0.12	-0.30	0.33	-0.07	0.11	0.17	0.08
23	6	-0.11	0.00	-0.08	-0.01	0.00	0.08	-0.18	-0.01	0.02
24	7	-0.16	-0.02	-0.13	-0.01	0.00	0.12	-0.27	-0.03	0.04

4

5

6

A

A

A

Frequencies --

122.0127

137.5756

171.1262

Red. masses --

6.3043

6.0677

4.9354

Frc consts --

0.0553

0.0677

0.0852

IR Inten --

2.5938

5.7841

8.0273

Atom AN

X

Y

Z

X

Y

Z

X

Y

Z

1

5

0.03

-0.08

0.04

0.00

-0.01

-0.10

0.00

-0.02

-0.05

2

6

0.04

0.06

-0.12

0.04

0.02

0.12

0.05

-0.03

0.22

3	6	0.04	0.08	-0.04	0.00	0.02	-0.10	0.03	0.01	0.29
4	6	0.06	0.09	0.03	0.00	0.03	-0.10	0.00	0.04	0.01
5	6	0.08	0.09	0.02	0.04	0.04	0.06	0.01	0.04	-0.27
6	6	0.07	0.08	-0.08	0.08	0.04	0.26	0.06	0.02	-0.13
7	6	0.06	0.07	-0.17	0.09	0.03	0.36	0.07	-0.02	0.09
8	1	0.04	0.08	-0.01	-0.04	0.02	-0.31	0.02	0.00	0.48
9	1	0.06	0.10	0.11	-0.03	0.03	-0.28	-0.03	0.07	-0.01
10	1	0.09	0.11	0.10	0.03	0.05	-0.02	-0.02	0.07	-0.53
11	1	0.06	0.06	-0.24	0.12	0.03	0.51	0.11	-0.04	0.13
12	6	0.05	-0.20	0.04	0.07	-0.06	-0.05	0.04	0.03	-0.07
13	6	-0.07	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.02	0.04	0.01
14	6	-0.13	0.14	-0.03	-0.08	0.05	0.02	-0.04	-0.01	0.04
15	6	0.00	0.02	0.01	-0.07	-0.02	-0.01	-0.08	-0.05	-0.01
16	6	0.13	-0.18	0.07	-0.02	-0.08	-0.06	-0.06	-0.04	-0.10
17	7	0.08	-0.19	0.08	0.03	-0.06	-0.08	0.01	-0.01	-0.12
18	1	-0.24	0.31	-0.07	-0.13	0.11	0.06	-0.06	0.00	0.10
19	1	0.09	-0.31	0.07	0.13	-0.10	-0.06	0.08	0.06	-0.10
20	1	-0.12	-0.01	-0.04	0.03	0.03	0.02	0.06	0.08	0.05
21	1	0.02	0.07	-0.01	-0.12	-0.02	0.00	-0.14	-0.07	0.01
22	1	0.22	-0.27	0.09	-0.04	-0.11	-0.09	-0.12	-0.04	-0.14
23	6	-0.06	0.05	0.00	0.00	0.02	0.06	0.03	0.01	-0.06
24	7	-0.34	-0.01	0.13	-0.17	-0.02	-0.29	-0.11	-0.02	0.16

0 3 -596.937485

B	-0.72438900	-1.16715800	-0.62050100
C	0.74272300	-0.96585800	-0.21745700
C	1.51478200	-2.03434700	0.28986100
C	2.85881800	-1.87420900	0.61004900
C	3.49065300	-0.64995500	0.41258100
C	2.75290000	0.42405000	-0.10866200
C	1.39604000	0.26734200	-0.41487800
H	1.04745500	-3.00299700	0.43039100
H	3.42292800	-2.70993200	1.00807600

H	4.53909000	-0.51914300	0.64936500
H	0.85427400	1.11456500	-0.82001800
C	-1.90347900	0.55871500	0.72128900
C	-3.04507600	1.23270000	1.05619500
C	-4.27109500	0.94448100	0.42835700
C	-4.27424100	-0.06826700	-0.55193500
C	-3.12843100	-0.73487600	-0.88076900
N	-1.89551400	-0.44833500	-0.26616100
H	-5.17560800	1.47529600	0.69107700
H	-0.95132800	0.74552500	1.19455300
H	-2.98163600	1.99469200	1.82404300
H	-5.18832500	-0.33826100	-1.06684900
H	-3.08860300	-1.51612500	-1.62603400
C	3.38781200	1.68995700	-0.32276400
N	3.89769500	2.71316000	-0.49288300

		1				2				3
		A				A				A
Frequencies --		23.1529				50.4165				58.9474
Red. masses --		5.2360				4.9621				4.6079
Frc consts --		0.0017				0.0074				0.0094
IR Inten --		1.3840				0.8171				0.3665
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.02	0.13	-0.14	0.00	-0.10	-0.03	0.01	0.04	0.17
2	6	0.00	0.09	-0.06	-0.01	-0.10	0.01	0.01	0.03	0.16
3	6	-0.08	0.09	0.08	0.03	-0.04	0.06	0.05	0.00	0.03
4	6	-0.10	0.06	0.16	0.01	0.03	0.08	0.09	-0.04	-0.12
5	6	-0.03	0.02	0.11	-0.04	0.05	0.05	0.09	-0.04	-0.15
6	6	0.05	0.01	-0.02	-0.07	0.00	-0.01	0.04	0.00	0.00
7	6	0.06	0.04	-0.10	-0.06	-0.08	-0.03	0.00	0.03	0.16
8	1	-0.14	0.12	0.13	0.07	-0.06	0.10	0.06	-0.01	0.03
9	1	-0.17	0.07	0.27	0.04	0.07	0.13	0.13	-0.06	-0.23
10	1	-0.04	-0.01	0.17	-0.05	0.11	0.07	0.12	-0.07	-0.28

11	1	0.13	0.04	-0.21	-0.09	-0.12	-0.07	-0.03	0.06	0.26
12	6	-0.05	-0.09	0.07	0.07	-0.17	0.11	-0.14	-0.05	0.16
13	6	-0.08	-0.18	0.16	0.12	-0.09	0.11	-0.18	-0.05	0.05
14	6	-0.07	-0.15	0.12	0.13	0.11	-0.01	-0.10	0.00	-0.12
15	6	-0.02	-0.01	-0.03	0.09	0.21	-0.11	0.01	0.05	-0.18
16	6	0.00	0.09	-0.12	0.04	0.12	-0.11	0.05	0.05	-0.06
17	7	-0.01	0.04	-0.07	0.03	-0.06	0.00	-0.03	0.01	0.10
18	1	-0.09	-0.22	0.20	0.17	0.18	-0.02	-0.12	0.00	-0.21
19	1	-0.05	-0.11	0.09	0.06	-0.33	0.20	-0.20	-0.08	0.29
20	1	-0.11	-0.28	0.27	0.15	-0.18	0.20	-0.27	-0.10	0.11
21	1	-0.01	0.03	-0.07	0.10	0.36	-0.20	0.08	0.09	-0.31
22	1	0.04	0.19	-0.23	0.01	0.20	-0.19	0.13	0.09	-0.10
23	6	0.12	-0.04	-0.08	-0.14	0.03	-0.05	0.04	-0.01	-0.05
24	7	0.19	-0.08	-0.13	-0.22	0.06	-0.09	0.05	-0.03	-0.10

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	120.7761	142.0864	172.1679
Red. masses --	5.3842	6.0653	5.9488
Frc consts --	0.0463	0.0721	0.1039
IR Inten --	1.0181	1.9733	4.2305

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.03	0.04	0.03	0.00	-0.03	-0.06	0.05	0.18	-0.10
2	6	0.02	-0.05	0.09	-0.03	0.02	0.01	0.07	0.07	-0.13
3	6	0.03	-0.07	0.05	0.03	-0.04	-0.21	-0.03	-0.01	-0.15
4	6	0.04	-0.08	0.01	0.00	0.00	-0.07	-0.06	-0.10	0.02
5	6	0.05	-0.08	0.01	-0.07	0.07	0.17	0.04	-0.12	0.17
6	6	0.03	-0.07	0.06	-0.10	0.10	0.27	0.16	-0.07	0.09
7	6	0.02	-0.06	0.11	-0.10	0.10	0.27	0.18	0.02	-0.05
8	1	0.03	-0.07	0.04	0.10	-0.11	-0.47	-0.10	0.01	-0.26
9	1	0.05	-0.09	-0.03	0.03	-0.04	-0.21	-0.16	-0.16	0.04
10	1	0.06	-0.10	-0.03	-0.08	0.08	0.20	0.01	-0.19	0.31
11	1	0.02	-0.05	0.14	-0.13	0.13	0.38	0.28	0.08	-0.07
12	6	0.04	0.21	-0.15	0.04	-0.04	-0.05	-0.06	-0.03	0.14

13	6	-0.03	0.01	0.02	0.07	-0.01	-0.02	-0.07	0.03	0.01
14	6	-0.06	-0.17	0.16	0.05	0.01	0.02	-0.02	0.08	-0.11
15	6	0.01	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.03	0.01	-0.03	0.00
16	6	0.08	0.16	-0.14	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	-0.08	0.12
17	7	0.07	0.18	-0.12	0.00	-0.03	-0.05	0.01	0.01	0.09
18	1	-0.13	-0.36	0.32	0.06	0.02	0.04	-0.01	0.15	-0.24
19	1	0.06	0.33	-0.24	0.06	-0.06	-0.07	-0.09	-0.04	0.21
20	1	-0.06	-0.01	0.03	0.11	-0.01	-0.02	-0.12	0.04	0.00
21	1	0.02	-0.09	0.04	-0.03	0.01	0.06	0.03	-0.08	-0.01
22	1	0.13	0.25	-0.23	-0.06	-0.03	0.00	0.04	-0.15	0.20
23	6	-0.05	-0.04	0.00	-0.02	0.03	0.07	0.08	-0.04	0.05
24	7	-0.24	0.04	-0.11	0.13	-0.11	-0.31	-0.29	0.11	-0.15

54 bph(NH₂)-py

0 1 -560.021491

B	-0.53448500	1.35185100	0.00141200
C	0.85380200	0.72761900	-0.00088100
C	1.04591200	-0.67569400	0.00392700
C	2.30613500	-1.24461300	0.00296200
C	3.45300000	-0.42603100	-0.00235700
C	3.28877600	0.97289700	-0.00900500
C	2.02118900	1.52524400	-0.00725200
H	0.17911100	-1.32909900	0.00941500
H	2.42168400	-2.32445000	0.00320100
H	1.90631400	2.60359200	-0.01012100
C	-2.39155500	0.23721100	-1.18673200
C	-3.60559700	-0.40383300	-1.19275000
C	-4.26575100	-0.73249800	-0.00110100
C	-3.61628900	-0.38786500	1.19186200
C	-2.40282200	0.25437800	1.18813000
N	-1.75635100	0.60443600	0.00124000
H	-5.23310000	-1.21477500	-0.00222600
H	-1.88682600	0.53481200	-2.09484300

H	-4.04096800	-0.64783700	-2.15503200
H	-4.06052500	-0.61848900	2.15339900
H	-1.90794500	0.56716700	2.09656000
H	4.16600700	1.61229100	-0.01797300
N	4.71311200	-0.98508300	-0.04630000
H	4.81161400	-1.95519500	0.20734300
H	5.49893200	-0.40363000	0.19782000

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		26.2607			48.9516			50.2900		
Red. masses --		4.0715			3.6764			5.1127		
Frc consts --		0.0017			0.0052			0.0076		
IR Inten --		1.3847			0.6976			5.1227		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.17	0.00	-0.01	0.09	0.01	-0.18	-0.01
2	6	0.00	0.00	0.10	0.00	-0.01	0.05	0.03	-0.12	0.00
3	6	0.00	0.00	0.07	0.01	-0.01	0.22	0.13	-0.11	-0.02
4	6	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.21	0.17	-0.02	-0.02
5	6	0.00	0.00	-0.08	0.01	0.00	-0.01	0.12	0.05	0.00
6	6	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.20	0.02	0.04	0.02
7	6	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.15	-0.02	-0.05	0.01
8	1	0.00	0.00	0.11	0.01	-0.01	0.38	0.17	-0.17	-0.04
9	1	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.36	0.24	-0.02	-0.03
10	1	0.00	0.00	0.07	-0.01	0.00	-0.27	-0.09	-0.05	0.03
11	6	0.16	-0.13	0.05	0.00	0.11	0.01	-0.06	-0.08	0.00
12	6	0.15	-0.12	-0.05	-0.01	0.12	-0.06	-0.15	0.10	0.01
13	6	0.00	0.00	-0.10	-0.01	0.02	-0.09	-0.21	0.22	0.01
14	6	-0.15	0.12	-0.05	-0.01	-0.11	-0.05	-0.15	0.12	0.00
15	6	-0.16	0.13	0.04	0.00	-0.12	0.01	-0.06	-0.06	0.00
16	7	0.00	0.00	0.09	0.00	-0.01	0.04	-0.02	-0.12	0.00
17	1	0.00	0.00	-0.17	-0.02	0.03	-0.13	-0.28	0.36	0.01
18	1	0.29	-0.26	0.08	0.00	0.20	0.04	-0.02	-0.16	-0.01

19	1	0.28	-0.22	-0.08	-0.01	0.22	-0.08	-0.18	0.14	0.01
20	1	-0.28	0.22	-0.08	-0.01	-0.20	-0.08	-0.18	0.18	0.01
21	1	-0.29	0.26	0.07	0.00	-0.22	0.04	-0.02	-0.12	0.00
22	1	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.01	-0.38	-0.02	0.10	0.04
23	7	0.00	0.00	-0.17	0.01	0.00	-0.05	0.15	0.14	0.00
24	1	0.01	0.00	-0.19	0.04	0.04	0.09	0.22	0.15	-0.02
25	1	0.01	0.00	-0.22	0.03	0.05	-0.21	0.11	0.20	0.01
		4				5			6	
		A				A			A	
Frequencies --		112.8626				155.1406			247.3624	
Red. masses --		5.1129				4.3274			5.2373	
Frc consts --		0.0384				0.0614			0.1888	
IR Inten --		0.4973				1.5281			6.8830	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.18	-0.01	0.06	0.00	-0.02	-0.03	0.00
2	6	0.00	0.00	0.17	0.01	0.13	0.00	0.12	0.18	0.00
3	6	0.00	0.00	0.22	-0.06	0.12	0.00	0.09	0.18	0.00
4	6	0.00	0.00	0.14	-0.09	0.06	0.00	0.05	0.10	0.00
5	6	0.00	0.00	0.01	-0.06	0.01	0.00	0.12	-0.01	0.00
6	6	0.00	0.00	0.15	0.01	0.02	0.00	0.19	0.01	0.00
7	6	0.00	0.00	0.20	0.03	0.09	0.00	0.20	0.10	0.00
8	1	0.00	0.00	0.26	-0.09	0.17	0.00	0.07	0.22	0.00
9	1	0.00	0.00	0.11	-0.14	0.06	0.00	-0.04	0.09	0.00
10	1	0.00	0.00	0.21	0.08	0.09	0.00	0.31	0.12	0.00
11	6	-0.08	-0.02	-0.11	0.13	-0.22	0.01	-0.15	0.00	0.01
12	6	-0.08	-0.05	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.14	-0.05	0.02
13	6	0.00	0.00	0.05	-0.09	0.21	0.00	-0.13	-0.14	0.00
14	6	0.08	0.05	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.14	-0.05	-0.02
15	6	0.08	0.03	-0.11	0.13	-0.22	-0.01	-0.15	0.00	-0.01
16	7	0.00	0.00	-0.16	0.08	-0.14	0.00	-0.05	-0.03	0.00
17	1	0.00	0.00	0.13	-0.20	0.43	0.00	-0.09	-0.20	0.00
18	1	-0.16	-0.02	-0.15	0.21	-0.36	0.01	-0.21	0.04	-0.01
19	1	-0.14	-0.08	0.04	0.02	-0.01	0.00	-0.13	-0.01	0.00

20	1	0.14	0.08	0.04	0.02	-0.01	0.00	-0.14	-0.01	-0.01
21	1	0.16	0.03	-0.15	0.21	-0.36	0.00	-0.22	0.03	0.01
22	1	0.00	0.00	0.12	0.04	-0.02	0.00	0.22	-0.03	0.00
23	7	-0.01	0.00	-0.29	-0.10	-0.06	0.00	0.04	-0.20	0.00
24	1	0.04	-0.02	-0.41	-0.16	-0.07	-0.01	-0.14	-0.23	-0.03
25	1	0.04	-0.02	-0.40	-0.06	-0.12	0.00	0.14	-0.35	0.02

0 3 -560.029963

B	-0.57621600	1.14265000	0.26414600
C	0.85509900	0.61716500	0.13546300
C	1.86705300	1.41178400	-0.44752800
C	3.18262300	0.98427700	-0.53806500
C	3.56777300	-0.25970100	-0.01219800
C	2.58562100	-1.05766700	0.59651500
C	1.26771400	-0.62987600	0.65980000
H	1.60790400	2.39058100	-0.83755200
H	3.92711100	1.61832900	-1.01008000
H	0.54306200	-1.27423700	1.14733500
C	-1.95109100	-0.81814900	-0.43459800
C	-3.16503500	-1.42887900	-0.58440900
C	-4.36030700	-0.77563800	-0.22525000
C	-4.24970000	0.53851200	0.27770300
C	-3.03177300	1.13751200	0.42519400
N	-1.82997000	0.48491900	0.09272500
H	-5.32203900	-1.25622100	-0.33991800
H	-1.02187800	-1.28184800	-0.72820700
H	-3.18490200	-2.43057200	-0.99821800
H	-5.13270500	1.10017100	0.55867300
H	-2.90563200	2.14001900	0.80806600
H	2.86324800	-2.02024200	1.01577000
N	4.87945700	-0.71195600	-0.13474000
H	5.58337400	-0.00353000	-0.27872600
H	5.16927800	-1.42246300	0.52046800

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		32.2051			54.1753			63.4883		
Red. masses --		4.1531			4.2347			4.4857		
Frc consts --		0.0025			0.0073			0.0107		
IR Inten --		1.0089			0.3766			1.7706		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.01	0.03	0.15	0.00	-0.09	0.09	-0.01	0.13	0.01
2	6	-0.01	0.03	0.11	0.01	-0.07	0.11	-0.01	0.12	0.08
3	6	-0.05	-0.05	-0.08	-0.04	-0.01	0.09	0.04	0.11	0.15
4	6	-0.07	-0.08	-0.16	-0.03	0.04	0.02	0.01	0.03	0.09
5	6	-0.04	-0.02	-0.04	0.04	0.03	-0.05	-0.07	-0.05	-0.04
6	6	0.01	0.07	0.16	0.10	-0.02	-0.03	-0.11	-0.03	-0.06
7	6	0.02	0.09	0.23	0.08	-0.07	0.05	-0.08	0.06	0.00
8	1	-0.08	-0.10	-0.19	-0.10	-0.01	0.14	0.09	0.15	0.23
9	1	-0.11	-0.15	-0.31	-0.08	0.09	0.01	0.04	0.02	0.13
10	1	0.06	0.16	0.37	0.13	-0.12	0.06	-0.11	0.07	-0.03
11	6	0.06	0.05	-0.02	-0.04	-0.11	0.19	0.11	0.02	0.07
12	6	0.08	0.04	-0.14	-0.07	-0.03	0.10	0.16	-0.07	0.11
13	6	0.05	0.00	-0.16	-0.06	0.09	-0.12	0.11	-0.12	0.04
14	6	0.00	-0.05	-0.03	-0.03	0.13	-0.22	0.01	-0.06	-0.10
15	6	-0.02	-0.04	0.08	0.00	0.05	-0.11	-0.03	0.03	-0.13
16	7	0.01	0.01	0.08	-0.01	-0.06	0.07	0.02	0.07	-0.02
17	1	0.07	-0.01	-0.26	-0.09	0.16	-0.21	0.14	-0.20	0.07
18	1	0.09	0.08	0.01	-0.04	-0.20	0.35	0.14	0.06	0.11
19	1	0.12	0.07	-0.21	-0.09	-0.07	0.19	0.23	-0.11	0.19
20	1	-0.02	-0.09	-0.03	-0.02	0.22	-0.37	-0.03	-0.09	-0.19
21	1	-0.06	-0.07	0.18	0.02	0.07	-0.18	-0.11	0.08	-0.23
22	1	0.04	0.12	0.25	0.15	-0.02	-0.07	-0.17	-0.08	-0.14
23	7	-0.06	-0.06	-0.12	0.05	0.08	-0.14	-0.12	-0.16	-0.15
24	1	-0.06	-0.09	-0.28	0.01	0.11	-0.16	-0.06	-0.21	-0.13
25	1	0.00	0.02	-0.06	0.11	0.07	-0.19	-0.15	-0.25	-0.23

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		135.1596			165.2783			256.8529		
Red. masses --		4.6630			4.7875			5.4811		
Frc consts --		0.0502			0.0771			0.2131		
IR Inten --		0.7726			2.0006			1.3378		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.07	0.01	-0.01	-0.02	-0.20	0.04	-0.05	0.02
2	6	0.01	-0.06	0.13	0.05	0.11	-0.07	-0.03	0.02	0.08
3	6	-0.02	-0.02	0.11	0.11	0.12	0.04	-0.11	0.05	0.02
4	6	-0.02	0.01	0.06	0.11	0.08	0.11	-0.14	0.02	-0.05
5	6	0.03	0.01	0.02	0.03	0.03	0.04	-0.17	0.03	-0.03
6	6	0.09	0.02	0.12	0.00	0.12	0.12	-0.13	-0.02	-0.03
7	6	0.08	-0.02	0.16	0.02	0.15	0.05	-0.11	-0.01	0.04
8	1	-0.07	-0.03	0.12	0.16	0.13	0.03	-0.16	0.04	0.05
9	1	-0.06	0.03	0.01	0.15	0.06	0.14	-0.13	-0.01	-0.08
10	1	0.11	-0.04	0.19	-0.02	0.19	0.05	-0.13	0.03	0.04
11	6	-0.07	0.05	-0.25	-0.08	-0.15	0.03	0.08	-0.15	-0.07
12	6	-0.07	0.01	-0.03	-0.14	-0.04	-0.03	0.01	-0.02	-0.01
13	6	-0.03	-0.04	0.20	-0.10	0.06	-0.08	0.10	0.11	0.05
14	6	0.00	0.01	0.06	0.01	0.00	0.05	0.22	0.11	0.03
15	6	0.00	0.06	-0.17	0.06	-0.11	0.09	0.26	-0.03	-0.03
16	7	-0.02	0.02	-0.19	0.01	-0.14	-0.02	0.16	-0.16	-0.06
17	1	-0.03	-0.10	0.42	-0.14	0.16	-0.15	0.05	0.20	0.09
18	1	-0.09	0.08	-0.38	-0.12	-0.24	0.06	0.04	-0.22	-0.10
19	1	-0.12	0.01	-0.03	-0.22	-0.03	-0.04	-0.14	-0.02	-0.01
20	1	0.02	0.01	0.13	0.06	0.05	0.12	0.28	0.19	0.05
21	1	0.03	0.09	-0.26	0.13	-0.15	0.18	0.41	-0.04	-0.05
22	1	0.14	0.04	0.13	-0.04	0.12	0.16	-0.10	-0.03	-0.07
23	7	0.02	0.01	-0.16	-0.05	-0.15	-0.13	-0.15	0.09	0.05
24	1	0.00	0.01	-0.25	0.04	-0.26	-0.21	-0.19	0.13	0.08
25	1	0.11	0.01	-0.20	-0.07	-0.23	-0.20	-0.15	0.13	0.09

55 bph(NH₂)-nhcCN

0 1 -630.233722

B	0.07333000	0.15667900	0.25114800
C	-1.41308500	0.04255600	0.14415300
C	-2.23247000	-0.28141600	1.25740900
C	-3.60529400	-0.38808600	1.15537900
C	-4.24405700	-0.17724100	-0.08411800
C	-3.45697700	0.14676300	-1.20841300
C	-2.08525200	0.25194200	-1.09012000
H	-1.75813400	-0.45105400	2.21743400
H	-3.93912600	0.31437100	-2.16631500
H	-1.49617200	0.49930500	-1.96592200
C	3.73282300	-0.04631700	-0.01311500
C	3.55353200	1.26251300	0.27147500
C	1.46098100	0.34865700	0.03465700
N	2.46089500	-0.62477900	-0.33094200
H	2.31123900	-1.55924500	0.02254100
H	4.29764000	2.01959300	0.45776300
N	2.21011700	1.56432500	0.18116600
H	1.82073800	2.34769900	0.67998100
H	-4.20255400	-0.63460700	2.02749400
N	-5.61202300	-0.24824400	-0.18604100
H	-6.02970200	-0.30838100	-1.10043600
H	-6.13381900	-0.68203300	0.55810400
C	4.93955900	-0.75789900	-0.14125400
N	5.92168000	-1.36814000	-0.22742600

1

2

3

A

A

A

Frequencies --	25.6494	34.4981	51.0313
Red. masses --	5.8884	6.6458	4.3842
Frc consts --	0.0023	0.0047	0.0067
IR Inten --	3.2423	1.6840	7.2745

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.07	0.30	0.00	0.24	0.07	-0.01	0.01	-0.12
2	6	0.01	-0.04	0.18	0.00	0.19	0.05	-0.01	0.01	-0.08
3	6	-0.11	0.05	0.12	0.01	0.12	0.03	0.01	0.17	-0.02
4	6	-0.11	0.09	-0.01	0.02	-0.03	-0.01	0.01	0.19	0.03
5	6	0.02	0.02	-0.09	0.04	-0.13	-0.03	-0.02	0.00	0.01
6	6	0.14	-0.07	-0.03	0.03	-0.04	-0.01	-0.03	-0.19	-0.06
7	6	0.13	-0.10	0.10	0.02	0.12	0.03	-0.03	-0.16	-0.10
8	1	-0.21	0.10	0.18	0.00	0.18	0.05	0.03	0.29	-0.01
9	1	0.24	-0.12	-0.09	0.04	-0.10	-0.02	-0.05	-0.34	-0.08
10	1	0.23	-0.17	0.14	0.01	0.17	0.05	-0.05	-0.27	-0.14
11	6	-0.01	0.01	-0.05	-0.03	-0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.04
12	6	-0.02	0.02	-0.10	0.09	-0.01	0.01	0.01	-0.05	0.21
13	6	-0.02	-0.04	0.14	0.00	0.18	0.04	0.01	0.00	0.02
14	7	-0.03	-0.03	0.11	-0.09	0.10	0.00	0.02	0.03	-0.04
15	1	0.02	-0.02	0.15	-0.16	0.10	-0.02	0.00	0.00	-0.12
16	1	-0.02	0.05	-0.21	0.16	-0.08	0.01	0.01	-0.07	0.31
17	7	-0.04	-0.02	0.02	0.11	0.11	0.04	0.02	-0.02	0.21
18	1	-0.01	0.01	-0.01	0.19	0.13	0.07	0.01	-0.09	0.31
19	1	-0.20	0.16	-0.05	0.02	-0.10	-0.02	0.02	0.33	0.08
20	7	0.03	0.06	-0.22	0.05	-0.31	-0.08	-0.02	-0.01	0.05
21	1	0.12	0.01	-0.26	0.09	-0.37	-0.09	-0.04	-0.15	0.07
22	1	-0.05	0.12	-0.24	0.08	-0.37	-0.09	-0.01	0.13	0.13
23	6	-0.01	0.04	-0.14	-0.10	-0.14	-0.04	0.02	0.01	-0.06
24	7	0.00	0.06	-0.22	-0.17	-0.25	-0.07	0.02	0.03	-0.16

4

5

6

A

A

A

Frequencies --

78.4083

109.6683

180.7640

Red. masses --

4.8522

6.1228

6.3966

Frc consts --

0.0176

0.0434

0.1231

IR Inten --

4.5959

6.7629

2.9448

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.03	0.06	-0.12	-0.01	-0.08	0.03	-0.04	0.23	0.06

2	6	-0.03	0.08	-0.08	-0.03	0.16	0.07	-0.03	0.05	0.03
3	6	0.00	0.03	-0.07	-0.05	0.19	0.07	-0.04	-0.06	0.00
4	6	0.01	-0.02	-0.03	-0.04	0.13	0.04	-0.03	-0.13	-0.03
5	6	-0.04	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.03	-0.05	-0.01
6	6	-0.08	0.07	-0.01	-0.01	0.12	0.04	-0.01	-0.13	-0.02
7	6	-0.08	0.10	-0.05	-0.02	0.19	0.07	-0.02	-0.06	0.01
8	1	0.04	0.03	-0.08	-0.07	0.22	0.08	-0.05	-0.05	0.01
9	1	-0.12	0.09	0.01	0.01	0.10	0.03	0.00	-0.17	-0.04
10	1	-0.12	0.14	-0.07	-0.01	0.22	0.09	-0.02	-0.05	0.01
11	6	0.03	-0.05	0.08	-0.01	-0.10	-0.04	-0.07	-0.18	-0.10
12	6	0.04	-0.01	-0.09	-0.05	-0.12	0.03	0.12	-0.17	-0.06
13	6	0.02	-0.05	0.13	-0.01	-0.15	-0.09	-0.02	0.15	0.04
14	7	0.01	-0.15	0.35	0.01	-0.09	-0.17	-0.17	0.00	-0.05
15	1	0.06	-0.03	0.69	0.01	-0.14	-0.30	-0.29	0.02	-0.05
16	1	0.04	0.03	-0.29	-0.07	-0.12	0.13	0.25	-0.29	-0.08
17	7	0.03	-0.04	0.02	-0.04	-0.14	-0.03	0.16	0.03	0.04
18	1	0.06	0.04	-0.08	-0.08	-0.17	-0.02	0.31	0.07	0.10
19	1	0.04	-0.08	-0.02	-0.06	0.11	0.03	-0.03	-0.17	-0.04
20	7	-0.04	-0.08	0.03	0.00	-0.24	-0.08	-0.05	0.14	0.01
21	1	-0.06	-0.07	0.04	0.07	-0.34	-0.10	-0.08	0.23	0.02
22	1	0.01	-0.14	0.03	0.04	-0.33	-0.10	-0.10	0.23	0.03
23	6	0.06	0.01	-0.05	0.06	0.01	0.01	-0.03	-0.12	-0.05
24	7	0.09	0.08	-0.16	0.19	0.19	0.09	0.22	0.25	0.12

03 -630.231068

B	0.04199200	-1.50541700	0.17658100
C	-1.30519900	-0.78857400	0.10006900
C	-2.41439900	-1.34483700	-0.57902300
C	-3.64046700	-0.70168100	-0.65030300
C	-3.83667300	0.54018400	-0.02412600
C	-2.76017700	1.10730600	0.67576300
C	-1.53384200	0.45970900	0.72946400
H	-2.30181400	-2.30874200	-1.06431600

H	-2.89439300	2.05713100	1.18524300
H	-0.73434600	0.92520600	1.29911200
C	3.33778600	0.27584800	-0.08263900
C	3.73277700	-1.00793100	0.17356800
C	1.44046500	-1.01131600	0.14578100
N	1.93889600	0.27226200	-0.08013000
H	1.35685500	1.04814300	-0.35089900
H	4.72800900	-1.40747300	0.26738800
N	2.60668900	-1.76211200	0.31248700
H	2.57520600	-2.75158200	0.50132200
H	-4.46440100	-1.16483300	-1.18528800
N	-5.08649000	1.16013500	-0.04011200
H	-5.08960600	2.15471300	0.13076300
H	-5.70185900	0.89530700	-0.79485300
C	4.12192100	1.42494400	-0.29741200
N	4.74994000	2.38075800	-0.48056400

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		29.1222			36.8679			60.0795		
Red. masses --		4.5662			5.8236			4.4750		
Frc consts --		0.0023			0.0047			0.0095		
IR Inten --		2.3547			1.0857			4.5135		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.07	-0.09	0.00	-0.15	0.00	0.00	0.05	0.14
2	6	-0.02	0.05	-0.06	0.02	-0.10	0.03	-0.02	0.02	0.16
3	6	-0.07	-0.07	0.13	-0.05	-0.10	0.14	0.04	-0.02	0.11
4	6	-0.10	-0.12	0.17	0.00	-0.02	0.12	0.04	-0.03	0.00
5	6	-0.07	-0.04	0.02	0.11	0.07	-0.02	-0.02	-0.01	-0.06
6	6	-0.01	0.09	-0.17	0.18	0.07	-0.13	-0.08	0.01	0.02
7	6	0.01	0.13	-0.20	0.13	-0.02	-0.10	-0.08	0.02	0.13
8	1	-0.09	-0.14	0.25	-0.13	-0.17	0.25	0.08	-0.03	0.14
9	1	0.01	0.15	-0.28	0.27	0.13	-0.23	-0.13	0.02	-0.01

10	1	0.05	0.23	-0.34	0.18	-0.01	-0.17	-0.13	0.04	0.18
11	6	0.06	0.00	0.02	-0.09	0.01	0.01	0.02	0.00	-0.04
12	6	0.01	-0.03	-0.03	-0.01	0.02	-0.07	0.01	-0.05	-0.26
13	6	0.01	0.05	-0.06	-0.01	-0.10	-0.01	0.00	0.03	0.08
14	7	0.06	0.05	0.00	-0.09	-0.06	0.04	0.02	0.05	0.18
15	1	0.09	0.08	0.01	-0.13	-0.09	0.07	0.01	0.10	0.34
16	1	-0.01	-0.07	-0.03	0.01	0.07	-0.11	0.01	-0.10	-0.47
17	7	-0.02	0.01	-0.08	0.03	-0.05	-0.08	0.00	-0.03	-0.18
18	1	-0.06	0.00	-0.13	0.09	-0.06	-0.13	-0.01	-0.06	-0.34
19	1	-0.14	-0.22	0.32	-0.06	-0.03	0.21	0.08	-0.05	-0.06
20	7	-0.09	-0.08	0.07	0.16	0.17	-0.06	-0.01	-0.01	-0.21
21	1	-0.10	-0.06	-0.06	0.25	0.19	-0.18	-0.03	0.00	-0.24
22	1	-0.16	-0.20	0.18	0.12	0.12	-0.01	0.06	-0.03	-0.26
23	6	0.10	-0.02	0.09	-0.17	0.08	0.06	0.03	-0.01	-0.01
24	7	0.15	-0.04	0.15	-0.24	0.14	0.11	0.05	-0.01	0.03

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	105.0135	126.8308	168.7056
Red. masses --	7.1305	7.3515	7.1545
Frc consts --	0.0463	0.0697	0.1200
IR Inten --	1.5594	4.8869	8.4554

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.02	-0.09	0.01	0.07	0.16	0.03	0.10	-0.23
2	6	0.03	0.03	-0.15	0.07	0.19	0.04	-0.03	0.02	-0.03
3	6	0.02	0.05	-0.14	0.13	0.14	-0.02	-0.08	-0.02	0.07
4	6	0.01	0.03	-0.06	0.09	0.06	-0.06	-0.10	-0.05	0.12
5	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.02	-0.02	-0.07	0.00	0.04
6	6	0.05	0.03	-0.09	-0.06	0.13	-0.06	-0.09	-0.06	0.12
7	6	0.06	0.04	-0.16	-0.01	0.21	-0.02	-0.07	-0.03	0.07
8	1	0.01	0.06	-0.16	0.21	0.15	-0.01	-0.09	-0.03	0.07
9	1	0.07	0.03	-0.08	-0.13	0.13	-0.08	-0.09	-0.07	0.15
10	1	0.08	0.05	-0.19	-0.05	0.28	-0.02	-0.07	-0.03	0.06
11	6	0.00	0.00	0.18	0.08	-0.16	-0.10	0.19	-0.06	0.22

12	6	0.01	-0.04	-0.06	0.06	-0.15	-0.04	0.09	-0.11	0.17
13	6	0.01	0.00	0.18	0.06	-0.10	0.02	0.07	0.02	-0.15
14	7	-0.01	0.05	0.46	0.09	-0.15	-0.12	0.19	0.00	0.01
15	1	0.00	0.02	0.36	0.09	-0.11	-0.03	0.28	0.09	0.08
16	1	0.01	-0.09	-0.28	0.06	-0.17	-0.02	0.05	-0.19	0.24
17	7	0.01	-0.04	0.01	0.04	-0.12	0.02	0.02	-0.06	-0.09
18	1	0.01	-0.08	-0.24	0.03	-0.11	0.09	-0.06	-0.06	-0.12
19	1	-0.02	0.03	-0.03	0.14	-0.01	-0.08	-0.10	-0.06	0.14
20	7	-0.03	-0.07	0.17	-0.12	-0.16	0.07	-0.01	0.12	-0.16
21	1	-0.07	-0.08	0.22	-0.26	-0.17	0.11	0.08	0.14	-0.25
22	1	-0.11	-0.08	0.23	-0.12	-0.23	0.10	0.08	0.14	-0.23
23	6	-0.04	-0.02	-0.02	-0.04	-0.06	0.00	0.10	-0.03	0.08
24	7	-0.10	-0.02	-0.26	-0.33	0.15	0.12	-0.23	0.14	-0.20

56 bph(NH₂)-pyCN

0 1 -652.288582

B	-0.08807300	-0.85293400	1.11119400
C	-1.44221300	-0.41110500	0.61018300
C	-2.61292500	-0.54851000	1.39393300
C	-3.85041100	-0.13815200	0.93920000
C	-3.98125000	0.43969900	-0.34067400
C	-2.83021800	0.58552600	-1.14314300
C	-1.59985700	0.17030600	-0.67407700
H	-2.52503700	-0.98820700	2.38114700
H	-4.73090600	-0.25760200	1.56229000
H	-0.72910000	0.29606100	-1.30942400
C	1.98740500	0.35171600	0.57374600
C	3.24542400	0.39243800	0.00604900
C	3.75964500	-0.68494500	-0.74048300
C	2.91384400	-1.79354800	-0.88365900
C	1.66908100	-1.83635300	-0.31551400
N	1.16469800	-0.77118400	0.45308500
H	4.75283800	-0.65367900	-1.16164000

H	1.60349400	1.16223900	1.17502700
H	3.23464300	-2.65684400	-1.45463300
H	1.02726100	-2.70274300	-0.38097600
H	-2.92140800	1.02517700	-2.13155000
N	-5.21373800	0.81838000	-0.81380900
H	-5.97910300	0.90503200	-0.16506900
H	-5.26232400	1.41487300	-1.62373400
C	4.02454500	1.58048700	0.19390800
N	4.65926800	2.53494700	0.33726400

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		24.2719			42.7914			49.7622		
Red. masses --		6.7500			4.7668			4.0906		
Frc consts --		0.0023			0.0051			0.0060		
IR Inten --		2.8871			2.1670			4.0392		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.01	-0.21	-0.04	0.00	0.01	-0.16	0.01	-0.05	0.07
2	6	0.02	-0.12	-0.03	-0.02	0.01	-0.10	0.02	-0.03	0.05
3	6	0.01	-0.06	-0.02	0.04	0.12	0.02	0.03	0.15	0.09
4	6	0.04	0.06	0.00	0.02	0.13	0.10	0.05	0.18	0.06
5	6	0.08	0.12	0.02	-0.08	0.01	0.05	0.06	0.00	-0.02
6	6	0.08	0.05	0.02	-0.15	-0.12	-0.07	0.06	-0.19	-0.07
7	6	0.05	-0.06	-0.01	-0.12	-0.11	-0.14	0.04	-0.19	-0.02
8	1	-0.02	-0.10	-0.04	0.12	0.20	0.05	0.01	0.27	0.14
9	1	0.04	0.11	0.00	0.07	0.23	0.19	0.05	0.33	0.09
10	1	0.06	-0.11	-0.01	-0.17	-0.19	-0.23	0.04	-0.32	-0.05
11	6	-0.10	-0.07	-0.05	-0.01	0.02	-0.11	0.00	-0.04	0.08
12	6	-0.09	0.01	-0.01	0.05	0.00	0.03	-0.05	0.02	-0.01
13	6	0.03	0.02	0.05	0.13	-0.03	0.12	-0.09	0.08	-0.13
14	6	0.13	-0.06	0.08	0.14	-0.03	0.06	-0.08	0.08	-0.14
15	6	0.12	-0.15	0.06	0.08	-0.01	-0.06	-0.04	0.02	-0.06
16	7	0.01	-0.15	-0.01	0.01	0.00	-0.12	-0.01	-0.04	0.03

17	1	0.03	0.09	0.07	0.18	-0.05	0.23	-0.12	0.12	-0.20
18	1	-0.19	-0.07	-0.11	-0.07	0.04	-0.18	0.03	-0.10	0.18
19	1	0.22	-0.06	0.13	0.19	-0.05	0.11	-0.11	0.12	-0.22
20	1	0.21	-0.21	0.10	0.09	-0.02	-0.10	-0.04	0.02	-0.08
21	1	0.11	0.10	0.03	-0.23	-0.21	-0.11	0.07	-0.33	-0.13
22	7	0.11	0.25	0.05	-0.11	0.01	0.14	0.08	0.01	-0.06
23	1	0.12	0.29	0.06	-0.05	0.10	0.20	0.10	0.15	-0.06
24	1	0.15	0.29	0.07	-0.17	-0.07	0.08	0.10	-0.11	-0.15
25	6	-0.20	0.10	-0.06	0.03	0.00	0.08	-0.04	0.01	0.05
26	7	-0.30	0.17	-0.09	0.02	0.00	0.13	-0.04	0.00	0.10

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 102.8005 137.7232 142.6735

Red. masses -- 6.0100 4.5110 5.3551

Frc consts -- 0.0374 0.0504 0.0642

IR Inten -- 2.0769 0.3175 4.1486

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.02	-0.04	-0.04	0.00	-0.01	0.03	-0.02	0.02	-0.08
2	6	0.06	0.20	0.07	0.00	-0.03	0.05	0.01	0.05	-0.12
3	6	0.06	0.19	0.08	-0.01	-0.01	0.03	0.03	0.04	-0.08
4	6	0.04	0.10	0.05	0.00	0.00	0.01	0.01	0.02	-0.01
5	6	0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.01	0.00	-0.07	0.02	-0.01
6	6	0.03	0.14	0.06	0.04	-0.03	0.01	-0.10	0.03	-0.06
7	6	0.05	0.24	0.08	0.02	-0.04	0.04	-0.06	0.06	-0.11
8	1	0.08	0.21	0.08	-0.03	0.00	0.04	0.08	0.04	-0.08
9	1	0.04	0.05	0.04	-0.01	0.02	0.00	0.04	0.01	0.03
10	1	0.05	0.29	0.10	0.03	-0.05	0.05	-0.10	0.08	-0.15
11	6	-0.02	-0.09	-0.07	0.01	-0.02	0.04	0.18	-0.16	0.34
12	6	0.00	-0.07	-0.02	0.07	-0.07	0.17	0.08	-0.07	0.14
13	6	0.04	-0.07	-0.01	0.10	-0.11	0.24	-0.01	0.04	-0.08
14	6	0.04	-0.07	-0.04	-0.03	0.03	-0.06	0.01	0.02	-0.05
15	6	0.03	-0.09	-0.07	-0.13	0.14	-0.26	0.06	-0.05	0.06
16	7	0.00	-0.10	-0.07	-0.03	0.03	-0.05	0.07	-0.07	0.12

17	1	0.05	-0.06	0.02	0.15	-0.17	0.36	-0.08	0.12	-0.24
18	1	-0.05	-0.08	-0.10	-0.01	0.00	0.01	0.26	-0.25	0.50
19	1	0.06	-0.06	-0.04	-0.09	0.09	-0.18	-0.03	0.06	-0.13
20	1	0.04	-0.10	-0.08	-0.27	0.26	-0.54	0.06	-0.04	0.03
21	1	0.02	0.12	0.05	0.06	-0.04	0.01	-0.15	0.03	-0.05
22	7	-0.03	-0.28	-0.10	0.04	0.01	-0.02	-0.10	-0.02	0.06
23	1	-0.09	-0.39	-0.15	0.03	0.04	-0.04	-0.07	-0.04	0.10
24	1	-0.10	-0.36	-0.15	0.07	0.01	-0.03	-0.17	-0.02	0.06
25	6	-0.08	-0.03	0.02	0.01	-0.01	0.03	0.02	-0.01	0.04
26	7	-0.22	0.05	0.11	-0.09	0.09	-0.20	-0.08	0.09	-0.17

0 3 -652.296299

B	0.02812300	-1.59398500	0.04276600
C	1.35680500	-0.84376300	0.02940600
C	2.44952900	-1.33825500	-0.71827400
C	3.68172000	-0.70639600	-0.72962500
C	3.90031500	0.44801100	0.04237000
C	2.83949500	0.93942100	0.82227900
C	1.60339100	0.31310300	0.80574600
H	2.31966800	-2.24088700	-1.30594200
H	4.49348400	-1.11188900	-1.32553900
H	0.81565200	0.72316800	1.42959300
C	-1.64204400	0.24007200	-0.13447700
C	-2.94111000	0.68539600	-0.11366700
C	-4.02260100	-0.21224800	0.09459900
C	-3.69545000	-1.57220700	0.25661200
C	-2.39956900	-2.00005300	0.23660000
N	-1.31879000	-1.10968000	0.05792700
H	-5.04235700	0.14241100	0.11478600
H	-0.81038800	0.90117000	-0.32237500
H	-4.47634000	-2.30827300	0.40295000
H	-2.11078600	-3.03348300	0.35981300
H	2.99323000	1.81735800	1.44209900

N	5.15013900	1.04891200	0.08349600
H	5.77471000	0.85756100	-0.68474700
H	5.18817900	2.00413800	0.40449900
C	-3.18613500	2.08091900	-0.31889400
N	-3.39588200	3.20571800	-0.47928300

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		31.0882			46.2980			51.7245		
Red. masses --		4.4136			5.1632			5.1858		
Frc consts --		0.0025			0.0065			0.0082		
IR Inten --		2.6005			3.0751			0.1437		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	0.07	-0.06	-0.01	-0.05	0.14	0.01	0.10	0.13
2	6	0.02	0.06	-0.04	0.00	-0.05	0.15	0.02	0.07	0.09
3	6	0.07	-0.09	0.13	-0.01	-0.10	0.18	-0.06	0.07	-0.03
4	6	0.09	-0.15	0.15	-0.03	-0.05	0.07	-0.03	0.01	-0.09
5	6	0.07	-0.05	0.01	-0.05	0.05	-0.08	0.09	-0.06	-0.03
6	6	0.02	0.11	-0.16	-0.04	0.08	-0.08	0.17	-0.05	0.08
7	6	-0.01	0.15	-0.18	-0.01	0.03	0.04	0.14	0.01	0.14
8	1	0.08	-0.17	0.24	0.00	-0.16	0.27	-0.15	0.11	-0.07
9	1	0.13	-0.27	0.29	-0.04	-0.09	0.08	-0.10	0.01	-0.19
10	1	-0.04	0.27	-0.30	0.00	0.06	0.03	0.20	0.02	0.22
11	6	-0.05	0.04	-0.02	0.03	-0.02	0.09	-0.04	0.07	0.13
12	6	-0.06	0.00	0.03	0.04	0.00	-0.01	-0.07	0.00	-0.02
13	6	-0.03	-0.03	0.03	0.00	0.00	-0.17	-0.05	-0.06	-0.18
14	6	0.01	-0.03	-0.03	-0.03	-0.01	-0.21	0.00	-0.04	-0.14
15	6	0.02	0.01	-0.07	-0.03	-0.03	-0.10	0.02	0.02	0.01
16	7	0.00	0.05	-0.06	0.00	-0.04	0.05	0.00	0.07	0.11
17	1	-0.04	-0.06	0.06	0.01	0.01	-0.25	-0.07	-0.11	-0.31
18	1	-0.07	0.07	-0.03	0.06	-0.02	0.21	-0.05	0.12	0.26
19	1	0.04	-0.06	-0.04	-0.05	-0.01	-0.33	0.02	-0.08	-0.23
20	1	0.06	0.01	-0.11	-0.06	-0.04	-0.12	0.06	0.04	0.03

21	1	0.00	0.19	-0.26	-0.05	0.15	-0.17	0.27	-0.10	0.12
22	7	0.09	-0.10	0.05	-0.08	0.12	-0.22	0.13	-0.13	-0.09
23	1	0.16	-0.24	0.14	-0.11	0.07	-0.23	0.05	-0.11	-0.16
24	1	0.11	-0.06	-0.08	-0.12	0.16	-0.33	0.20	-0.15	-0.04
25	6	-0.11	0.00	0.08	0.09	0.02	0.08	-0.13	-0.01	-0.02
26	7	-0.16	0.00	0.12	0.15	0.04	0.15	-0.21	-0.03	-0.03
		4				5			6	
		A				A			A	
Frequencies --		116.5057				138.9744			142.2016	
Red. masses --		6.1458				4.8979			6.2087	
Frc consts --		0.0491				0.0557			0.0740	
IR Inten --		1.4473				1.5987			3.7567	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.01	0.03	0.04	-0.01	0.07	0.07	0.00	-0.02	-0.13
2	6	-0.06	0.13	-0.09	-0.03	0.11	0.12	0.01	-0.05	-0.08
3	6	-0.07	0.12	-0.11	-0.09	0.08	0.07	0.05	-0.04	-0.04
4	6	-0.05	0.07	-0.07	-0.06	0.02	0.00	0.04	-0.02	0.01
5	6	0.00	0.02	-0.01	0.03	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
6	6	-0.03	0.11	-0.11	0.08	0.05	0.05	-0.05	-0.01	-0.04
7	6	-0.05	0.16	-0.14	0.05	0.11	0.10	-0.03	-0.04	-0.08
8	1	-0.09	0.13	-0.11	-0.15	0.08	0.08	0.08	-0.04	-0.04
9	1	-0.05	0.03	-0.04	-0.11	-0.01	-0.05	0.07	-0.01	0.05
10	1	-0.05	0.20	-0.16	0.09	0.16	0.12	-0.05	-0.06	-0.09
11	6	-0.05	-0.06	0.13	-0.06	-0.05	-0.10	0.02	0.07	0.37
12	6	-0.05	-0.07	-0.01	-0.05	-0.03	0.09	0.01	0.05	0.29
13	6	-0.06	-0.10	-0.15	-0.03	-0.03	0.25	0.00	0.02	0.10
14	6	-0.04	-0.08	-0.03	-0.03	-0.06	-0.02	0.00	-0.01	-0.13
15	6	-0.02	-0.05	0.14	-0.03	-0.08	-0.25	0.00	0.00	-0.13
16	7	-0.04	-0.04	0.13	-0.04	-0.04	-0.12	0.01	0.03	0.11
17	1	-0.08	-0.13	-0.29	-0.02	-0.02	0.45	-0.01	0.00	0.03
18	1	-0.05	-0.03	0.21	-0.08	-0.05	-0.20	0.02	0.10	0.48
19	1	-0.04	-0.09	-0.05	-0.02	-0.08	-0.06	-0.01	-0.04	-0.34
20	1	-0.01	-0.04	0.24	-0.03	-0.10	-0.46	-0.02	-0.04	-0.36

21	1	-0.02	0.11	-0.11	0.15	0.05	0.04	-0.09	0.00	-0.05
22	7	0.07	-0.14	0.16	0.07	-0.07	-0.07	-0.03	0.04	0.04
23	1	0.14	-0.19	0.24	0.01	-0.11	-0.11	0.01	0.04	0.07
24	1	0.16	-0.16	0.21	0.15	-0.08	-0.07	-0.07	0.04	0.03
25	6	0.07	-0.05	0.01	0.01	-0.03	0.02	0.00	0.02	0.07
26	7	0.33	0.00	0.04	0.18	-0.02	-0.12	-0.01	-0.04	-0.33

57 bphCN-nhc(NH₂)

0 1 -630.222748

B	-0.47152600	0.23872700	0.24800100
C	0.98965700	0.52502500	0.17043500
C	1.91937400	-0.51708700	-0.07422100
C	3.29176900	-0.26326900	-0.10407000
C	3.78127600	1.04729800	0.03181600
C	2.87654000	2.08758100	0.23435500
C	1.51586500	1.83445900	0.34160900
H	1.56980600	-1.52837200	-0.24332300
H	3.24431300	3.10132400	0.34626700
H	0.84090000	2.65340500	0.56375900
C	-4.10963500	-0.07771200	-0.19201000
C	-3.86041500	-1.17314200	0.54506800
C	-1.84374000	-0.14121400	0.15512000
N	-2.88919600	0.53185600	-0.53762300
H	-2.87300500	1.53986100	-0.61391600
H	-4.52717300	-1.96271500	0.84788400
N	-2.45372100	-1.28568000	0.73378400
H	-2.12370300	-1.56217400	1.64630300
H	4.84617400	1.23441200	-0.01788600
C	4.20621300	-1.34605400	-0.31398700
N	4.94576500	-2.21863800	-0.47981300
N	-5.28396500	0.51708200	-0.65602300
H	-5.33356600	0.57919100	-1.66804600
H	-6.11971700	0.08377800	-0.28799700

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		14.4939			33.4706			39.1248		
Red. masses --		6.8287			5.4409			4.5012		
Frc consts --		0.0008			0.0036			0.0041		
IR Inten --		1.2032			1.0119			7.9236		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.01	0.18	0.30	0.00	-0.15	0.02	0.00	0.06	-0.23
2	6	0.00	0.12	0.16	0.00	-0.13	0.05	0.01	0.05	-0.12
3	6	-0.08	0.07	0.09	0.05	-0.07	0.01	-0.01	0.04	-0.14
4	6	-0.07	0.00	-0.03	0.04	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.01
5	6	0.01	-0.03	-0.08	-0.03	0.03	-0.01	0.04	-0.04	0.18
6	6	0.08	0.02	-0.01	-0.08	-0.02	0.04	0.06	-0.03	0.19
7	6	0.08	0.09	0.11	-0.07	-0.11	0.07	0.04	0.02	0.04
8	1	-0.15	0.09	0.13	0.10	-0.09	-0.01	-0.04	0.07	-0.28
9	1	0.14	0.00	-0.05	-0.14	-0.01	0.06	0.09	-0.05	0.32
10	1	0.14	0.12	0.17	-0.11	-0.15	0.11	0.05	0.02	0.05
11	6	0.06	-0.08	-0.10	0.00	0.06	-0.04	-0.03	-0.05	0.02
12	6	0.05	-0.03	-0.02	-0.12	0.15	0.14	0.05	0.05	0.14
13	6	0.03	0.05	0.13	-0.02	-0.07	0.06	-0.01	0.08	-0.08
14	7	0.06	-0.05	-0.02	0.06	-0.09	-0.09	-0.07	-0.04	-0.11
15	1	0.02	-0.05	-0.10	0.14	-0.10	-0.25	-0.11	-0.04	-0.21
16	1	0.06	-0.05	-0.03	-0.19	0.25	0.22	0.09	0.06	0.26
17	7	0.03	0.05	0.12	-0.13	0.07	0.22	0.06	0.13	0.11
18	1	-0.03	0.09	0.15	-0.20	0.22	0.29	0.09	0.32	0.16
19	1	0.02	-0.08	-0.18	-0.05	0.09	-0.03	0.05	-0.08	0.30
20	6	-0.14	-0.05	-0.11	0.10	0.07	-0.08	-0.02	-0.03	-0.02
21	7	-0.20	-0.09	-0.17	0.16	0.13	-0.14	-0.04	-0.04	-0.05
22	7	0.07	-0.17	-0.25	0.06	0.07	-0.19	-0.07	-0.16	0.00
23	1	0.16	-0.24	-0.26	0.11	-0.08	-0.20	-0.12	-0.28	-0.01
24	1	0.06	-0.19	-0.30	0.01	0.19	-0.16	-0.04	-0.15	0.08

4

5

6

		A			A			A		
Frequencies --		95.6894			136.0365			147.9570		
Red. masses --		4.1932			5.5971			5.5422		
Frc consts --		0.0226			0.0610			0.0715		
IR Inten --		0.7206			6.4119			6.9032		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.02	-0.08	-0.02	0.08	-0.03	-0.05	0.16	0.15
2	6	0.02	-0.07	0.00	0.01	-0.02	0.12	-0.01	0.00	0.09
3	6	0.03	-0.06	0.01	0.01	-0.08	0.34	-0.08	-0.03	-0.07
4	6	0.02	-0.04	-0.01	0.01	-0.07	0.23	-0.07	-0.08	-0.16
5	6	0.01	-0.03	-0.03	0.02	-0.05	0.05	-0.02	-0.09	-0.19
6	6	0.00	-0.05	-0.02	0.02	-0.03	-0.08	0.06	-0.07	0.02
7	6	0.00	-0.06	-0.01	0.02	0.00	-0.08	0.07	-0.04	0.21
8	1	0.04	-0.07	0.03	0.01	-0.10	0.48	-0.14	-0.01	-0.08
9	1	-0.02	-0.04	-0.03	0.02	-0.01	-0.24	0.11	-0.10	0.07
10	1	0.00	-0.07	-0.02	0.02	0.05	-0.25	0.12	-0.05	0.42
11	6	-0.04	-0.01	-0.02	-0.04	0.00	-0.01	-0.04	0.00	-0.01
12	6	0.01	-0.06	-0.11	0.03	0.03	0.01	0.01	0.03	0.02
13	6	-0.05	0.17	0.10	-0.02	0.07	-0.12	-0.02	0.07	-0.07
14	7	-0.10	0.22	0.20	-0.06	-0.01	-0.13	-0.05	-0.03	-0.12
15	1	-0.22	0.24	0.45	-0.08	-0.02	-0.22	-0.05	-0.04	-0.28
16	1	0.08	-0.18	-0.28	0.06	0.04	0.10	0.03	0.05	0.11
17	7	0.00	0.11	0.08	0.04	0.06	-0.09	0.02	0.05	-0.08
18	1	-0.10	0.21	0.15	0.11	0.05	-0.12	0.09	-0.01	-0.13
19	1	0.00	-0.02	-0.04	0.01	-0.06	-0.03	-0.02	-0.14	-0.29
20	6	0.06	-0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.04	0.01	-0.03	-0.05
21	7	0.13	0.04	0.00	0.09	0.09	-0.28	0.26	0.13	0.19
22	7	-0.07	-0.14	-0.10	-0.10	-0.04	0.08	-0.09	-0.03	0.06
23	1	0.08	0.03	-0.10	-0.24	-0.14	0.08	-0.23	-0.17	0.06
24	1	-0.06	-0.33	-0.30	-0.05	-0.01	0.24	-0.04	0.03	0.23

0 3 -630.233725

B 0.51478200 -1.21701000 -0.47043500

C	-0.97697000	-1.00832000	-0.20170400
C	-1.57855300	0.26511800	-0.33118500
C	-2.94471600	0.46010800	-0.09740200
C	-3.76471900	-0.61908200	0.26940000
C	-3.19390400	-1.88441400	0.39030600
C	-1.83718800	-2.07650000	0.15673100
H	-0.98080600	1.11669300	-0.63783400
H	-3.81813200	-2.72679000	0.66761000
H	-1.41862700	-3.07281000	0.25025800
C	3.90253000	0.27670000	0.00938900
C	3.16779400	1.09613200	0.81158400
C	1.71877900	-0.41637800	-0.13134400
N	3.02353800	-0.62245700	-0.56353400
H	3.28901800	-1.42538100	-1.11153800
H	3.46837300	1.93868400	1.40932400
N	1.84699500	0.66314100	0.72355400
H	1.07367100	1.03512500	1.24904700
H	-4.82099300	-0.46134000	0.44720700
C	-3.50419700	1.77155800	-0.23211300
N	-3.94762000	2.83445500	-0.33622900
N	5.27086700	0.18182300	-0.23812900
H	5.52216100	0.28368300	-1.21529700
H	5.82182700	0.80892400	0.33179000

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		25.0294			40.8225			45.2009		
Red. masses --		5.3411			5.2241			4.9619		
Frc consts --		0.0020			0.0051			0.0060		
IR Inten --		3.6457			2.4855			1.8662		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.01	0.15	-0.10	0.00	0.11	0.05	0.00	0.00	0.24
2	6	0.00	0.10	-0.03	-0.01	0.08	0.01	-0.01	0.00	0.15

3	6	-0.07	0.07	-0.07	-0.06	0.06	0.04	0.00	0.01	0.15
4	6	-0.07	0.01	-0.03	-0.08	-0.01	0.01	-0.03	-0.01	-0.02
5	6	0.00	-0.01	0.06	-0.04	-0.06	-0.05	-0.08	-0.03	-0.19
6	6	0.06	0.02	0.11	0.02	-0.04	-0.08	-0.09	-0.03	-0.18
7	6	0.06	0.08	0.07	0.03	0.03	-0.05	-0.06	-0.02	-0.01
8	1	-0.11	0.08	-0.12	-0.09	0.10	0.08	0.04	0.03	0.28
9	1	0.11	0.01	0.18	0.05	-0.08	-0.12	-0.13	-0.05	-0.31
10	1	0.11	0.10	0.10	0.08	0.05	-0.08	-0.07	-0.03	-0.01
11	6	0.06	-0.05	0.01	0.08	-0.08	0.02	0.03	0.02	-0.08
12	6	0.12	-0.17	0.19	0.12	0.08	-0.12	0.12	0.01	0.00
13	6	0.03	0.05	-0.02	0.03	0.10	0.00	0.02	0.00	0.17
14	7	0.00	0.08	-0.12	0.03	-0.06	0.08	-0.02	0.00	0.04
15	1	-0.05	0.17	-0.27	-0.01	-0.17	0.20	-0.08	0.02	-0.02
16	1	0.18	-0.29	0.33	0.17	0.13	-0.21	0.17	0.02	-0.04
17	7	0.10	-0.11	0.18	0.08	0.19	-0.14	0.11	0.00	0.16
18	1	0.14	-0.17	0.26	0.10	0.31	-0.20	0.16	0.00	0.23
19	1	0.00	-0.05	0.09	-0.05	-0.11	-0.07	-0.10	-0.04	-0.33
20	6	-0.14	-0.03	-0.08	-0.14	-0.03	0.05	-0.01	0.00	-0.03
21	7	-0.21	-0.06	-0.13	-0.21	-0.06	0.09	0.00	0.00	-0.04
22	7	0.04	-0.05	-0.07	0.09	-0.25	0.11	0.00	0.04	-0.25
23	1	0.00	0.13	-0.07	0.15	-0.41	0.11	-0.12	0.03	-0.28
24	1	0.09	-0.18	0.02	0.12	-0.21	0.05	0.06	0.06	-0.33

4

5

6

A

A

A

Frequencies --

128.7755

137.9199

163.2893

Red. masses --

6.7284

6.3415

3.8195

Frc consts --

0.0657

0.0711

0.0600

IR Inten --

5.6500

2.0930

1.2780

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.03	-0.09	0.00	0.01	-0.08	-0.05	0.01	-0.08	0.04
2	6	0.02	0.04	-0.10	0.04	0.03	0.07	0.04	-0.01	0.15
3	6	0.04	0.05	-0.18	0.11	0.09	0.32	0.07	0.00	0.06
4	6	0.05	0.07	-0.11	0.10	0.10	0.26	0.04	0.02	-0.10

5	6	0.05	0.10	-0.02	0.06	0.08	0.10	-0.02	0.03	-0.21
6	6	0.03	0.10	0.02	-0.01	0.03	-0.10	-0.03	0.05	0.00
7	6	0.02	0.07	-0.02	-0.02	0.00	-0.15	0.00	0.03	0.21
8	1	0.04	0.02	-0.25	0.15	0.11	0.43	0.11	-0.02	0.09
9	1	0.03	0.13	0.09	-0.05	0.01	-0.26	-0.07	0.07	-0.02
10	1	0.01	0.08	0.04	-0.08	-0.04	-0.38	-0.01	0.04	0.36
11	6	0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.02
12	6	-0.04	0.03	-0.08	-0.06	-0.03	-0.03	-0.04	-0.05	0.00
13	6	0.07	-0.20	0.13	0.02	-0.08	-0.07	0.02	-0.02	-0.11
14	7	0.09	-0.21	0.21	0.04	-0.04	-0.03	0.02	0.05	-0.14
15	1	0.13	-0.18	0.18	0.09	-0.03	-0.02	0.07	0.04	-0.11
16	1	-0.10	0.14	-0.20	-0.11	-0.02	-0.03	-0.06	-0.08	0.05
17	7	0.01	-0.14	0.05	-0.04	-0.08	-0.07	-0.03	-0.03	-0.09
18	1	-0.04	-0.04	-0.09	-0.06	-0.13	-0.07	-0.03	-0.16	-0.01
19	1	0.07	0.14	0.04	0.05	0.09	0.06	-0.04	0.04	-0.39
20	6	-0.05	0.04	-0.01	0.00	0.03	0.06	0.01	0.02	-0.04
21	7	-0.31	-0.04	0.18	-0.22	-0.09	-0.28	-0.12	-0.02	0.13
22	7	0.01	0.17	-0.09	0.01	0.05	0.05	0.02	0.01	0.08
23	1	-0.09	0.01	-0.13	0.05	0.12	0.07	0.14	0.37	0.15
24	1	-0.05	0.38	-0.27	-0.04	0.04	0.11	0.00	-0.24	0.38

58 bphCN-py(NH₂)

0 1 -652.283811

B	-0.10505100	-0.87368800	1.17158300
C	1.11693900	-0.09895900	0.62712300
C	1.11085700	1.31056300	0.49603700
C	2.25111200	2.01345200	0.11514000
C	3.41970800	1.33292300	-0.21003200
C	3.44397300	-0.07077200	-0.12161700
C	2.31872200	-0.76954800	0.32462600
H	0.20285000	1.86405500	0.71500400
H	2.22601000	3.09582500	0.04925500
H	2.37232600	-1.84498800	0.44781200

C	-1.61953100	-0.31161200	-0.75306800
C	-2.86901300	-0.15199600	-1.30138900
C	-3.99941900	-0.02663700	-0.47403800
C	-3.77870300	-0.10827200	0.91997700
C	-2.53104700	-0.38116600	1.41101200
N	-1.42280000	-0.48837800	0.60263200
H	-0.72662400	-0.33604600	-1.36070200
H	-4.60542200	-0.02406100	1.61548300
H	-2.34394000	-0.56899000	2.45926800
H	4.30717900	1.86792600	-0.52437300
H	-2.96163700	-0.07510400	-2.37908700
N	-5.26816900	0.10268300	-0.99061800
H	-5.99642900	0.45511900	-0.38969000
H	-5.36555000	0.35084400	-1.96253800
C	4.63926200	-0.78195900	-0.46401600
N	5.60516000	-1.35034000	-0.74728100

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		24.2132			42.8184			57.2242		
Red. masses --		6.6612			5.0050			4.0297		
Frc consts --		0.0023			0.0054			0.0078		
IR Inten --		0.9828			1.0870			4.0447		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.01	0.14	0.16	0.00	0.08	-0.13	-0.01	0.01	-0.09
2	6	0.00	0.10	0.13	0.02	0.06	-0.10	0.01	-0.02	-0.06
3	6	0.08	0.10	0.19	0.09	0.07	-0.06	0.04	0.00	0.05
4	6	0.09	0.05	0.14	0.14	0.03	0.02	0.07	0.01	0.17
5	6	0.03	-0.01	0.03	0.13	-0.02	0.05	0.07	0.02	0.16
6	6	-0.05	-0.01	-0.03	0.06	-0.02	0.01	0.03	0.01	0.02
7	6	-0.05	0.04	0.03	0.00	0.02	-0.07	0.01	-0.01	-0.09
8	1	0.12	0.15	0.27	0.11	0.10	-0.07	0.04	-0.01	0.07
9	1	0.15	0.05	0.18	0.19	0.03	0.05	0.09	0.01	0.27

10	1	-0.11	0.03	-0.02	-0.05	0.01	-0.10	-0.02	-0.03	-0.18
11	6	0.08	0.06	0.07	-0.07	0.23	-0.03	-0.08	-0.16	-0.08
12	6	0.10	-0.04	-0.01	-0.10	0.13	0.00	-0.10	-0.19	-0.03
13	6	0.04	-0.09	-0.08	-0.10	-0.07	0.04	-0.05	-0.02	0.01
14	6	-0.04	-0.03	-0.07	-0.05	-0.13	0.03	0.02	0.18	0.01
15	6	-0.05	0.06	0.02	-0.02	-0.04	-0.02	0.03	0.19	-0.02
16	7	0.00	0.10	0.09	-0.02	0.12	-0.05	-0.01	0.01	-0.06
17	1	0.12	0.10	0.13	-0.08	0.37	-0.05	-0.11	-0.28	-0.12
18	1	-0.08	-0.05	-0.12	-0.05	-0.27	0.05	0.07	0.33	0.04
19	1	-0.10	0.11	0.03	0.03	-0.10	-0.04	0.07	0.34	0.00
20	1	0.04	-0.05	-0.02	0.17	-0.05	0.12	0.09	0.03	0.24
21	1	0.16	-0.08	-0.02	-0.13	0.20	0.01	-0.15	-0.34	-0.04
22	7	0.07	-0.20	-0.16	-0.13	-0.21	0.08	-0.08	-0.06	0.06
23	1	0.00	-0.25	-0.22	-0.16	-0.35	0.12	-0.02	0.09	0.04
24	1	0.10	-0.26	-0.18	-0.19	-0.17	0.10	-0.12	-0.18	0.03
25	6	-0.12	-0.07	-0.16	0.05	-0.07	0.06	0.03	0.02	-0.02
26	7	-0.19	-0.13	-0.27	0.04	-0.11	0.12	0.03	0.03	-0.05

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	102.9540	142.6138	151.6518
Red. masses --	6.3113	6.0898	6.6847
Frc consts --	0.0394	0.0730	0.0906
IR Inten --	0.5795	10.9945	11.0220

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.05	0.09	-0.03	-0.01	-0.02	-0.05	0.05	-0.19	-0.12
2	6	0.00	0.18	0.01	0.03	0.00	0.09	0.00	-0.06	-0.01
3	6	0.05	0.18	0.00	-0.03	-0.02	-0.15	-0.12	-0.06	0.03
4	6	0.08	0.13	0.01	-0.02	-0.02	-0.10	-0.18	0.03	0.04
5	6	0.07	0.09	0.01	0.04	-0.02	0.12	-0.13	0.13	0.01
6	6	0.01	0.09	0.01	0.09	-0.01	0.29	-0.02	0.13	-0.01
7	6	-0.01	0.15	0.02	0.11	0.01	0.35	0.04	0.04	-0.02
8	1	0.07	0.22	0.00	-0.10	-0.04	-0.39	-0.17	-0.15	0.05
9	1	0.13	0.13	0.01	-0.06	-0.03	-0.26	-0.27	0.03	0.06

10	1	-0.04	0.15	0.05	0.13	0.03	0.49	0.12	0.04	-0.05
11	6	-0.03	-0.20	-0.09	-0.03	0.03	-0.07	0.08	0.09	-0.06
12	6	-0.05	-0.13	-0.03	-0.05	0.04	-0.04	0.07	0.11	-0.02
13	6	-0.01	-0.02	0.02	-0.03	0.01	0.00	0.09	0.03	0.02
14	6	0.03	-0.14	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.15	0.14	0.02
15	6	0.04	-0.20	-0.05	0.02	0.00	-0.05	0.15	0.09	-0.03
16	7	0.02	-0.15	-0.09	0.01	0.00	-0.08	0.09	-0.02	-0.08
17	1	-0.06	-0.25	-0.13	-0.05	0.03	-0.10	0.07	0.09	-0.08
18	1	0.05	-0.15	0.04	0.03	0.00	0.02	0.18	0.19	0.04
19	1	0.07	-0.27	-0.07	0.05	-0.02	-0.06	0.18	0.10	-0.03
20	1	0.09	0.06	0.02	0.03	-0.02	0.08	-0.17	0.21	0.01
21	1	-0.09	-0.12	-0.02	-0.08	0.05	-0.03	0.03	0.13	-0.02
22	7	-0.01	0.20	0.07	-0.06	-0.04	0.05	0.04	-0.18	0.08
23	1	0.08	0.29	0.12	-0.04	-0.03	0.08	0.03	-0.24	0.09
24	1	0.01	0.31	0.10	-0.11	-0.02	0.06	-0.04	-0.27	0.06
25	6	-0.06	-0.03	0.03	0.03	0.00	0.07	-0.06	0.05	0.01
26	7	-0.18	-0.24	0.05	-0.07	0.02	-0.33	-0.23	-0.28	0.10

0 3 -652.296782

B	-0.17487200	-1.45297100	-0.46927000
C	1.26539200	-1.05325700	-0.12333500
C	2.18755300	-2.00743400	0.36658900
C	3.51188200	-1.67719000	0.63265900
C	3.97921400	-0.38609200	0.40243200
C	3.09267000	0.57906200	-0.10146100
C	1.75702300	0.24894400	-0.35686100
H	1.84900800	-3.02392000	0.53565700
H	4.19002400	-2.43100500	1.01653300
H	1.10410500	1.01621600	-0.75744200
C	-1.53035900	0.36580100	0.56858000
C	-2.72523700	0.99587000	0.77670800
C	-3.91601400	0.53115600	0.17968000
C	-3.79942200	-0.61554900	-0.64064800

C	-2.59730700	-1.22906800	-0.83696200
N	-1.40705200	-0.76957500	-0.25258700
H	-0.61832700	0.69546200	1.04197000
H	-4.67153400	-1.02743400	-1.13621200
H	-2.48601500	-2.10738600	-1.45611700
H	5.01038000	-0.12151200	0.59999700
H	-2.73759800	1.86773800	1.42188200
N	-5.12613900	1.20263800	0.32921000
H	-5.96095600	0.65791100	0.16882900
H	-5.20706300	1.80016800	1.13898400
C	3.55424800	1.91156900	-0.35195900
N	3.92240200	2.98918700	-0.55094500

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		28.3286			43.6788			57.8623		
Red. masses --		5.3095			5.0668			4.4428		
Frc consts --		0.0025			0.0057			0.0088		
IR Inten --		1.5933			0.6209			1.8262		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	0.10	-0.15	0.01	-0.09	-0.05	0.00	0.06	0.13
2	6	-0.01	0.06	-0.05	-0.01	-0.08	0.00	0.00	0.04	0.13
3	6	-0.08	0.07	0.10	0.02	-0.02	0.06	0.03	0.01	0.02
4	6	-0.10	0.04	0.20	0.00	0.05	0.09	0.06	-0.03	-0.11
5	6	-0.03	0.01	0.14	-0.05	0.06	0.05	0.07	-0.04	-0.13
6	6	0.04	0.00	-0.01	-0.08	0.00	-0.01	0.04	0.00	-0.01
7	6	0.05	0.03	-0.10	-0.06	-0.07	-0.03	0.00	0.04	0.13
8	1	-0.13	0.09	0.15	0.06	-0.03	0.09	0.03	0.01	0.01
9	1	-0.16	0.05	0.32	0.02	0.10	0.14	0.09	-0.05	-0.20
10	1	0.11	0.02	-0.21	-0.09	-0.11	-0.07	-0.02	0.07	0.22
11	6	-0.02	-0.02	0.00	0.06	-0.18	0.14	-0.11	-0.05	0.20
12	6	-0.04	-0.09	0.09	0.09	-0.11	0.14	-0.13	-0.08	0.13
13	6	-0.04	-0.07	0.07	0.10	0.06	0.00	-0.07	-0.02	-0.05

14	6	-0.01	0.03	-0.07	0.06	0.14	-0.12	0.02	0.06	-0.14
15	6	0.01	0.09	-0.16	0.02	0.07	-0.12	0.04	0.07	-0.06
16	7	0.00	0.06	-0.11	0.03	-0.08	-0.01	-0.02	0.03	0.10
17	1	-0.02	-0.03	0.00	0.06	-0.30	0.23	-0.16	-0.10	0.32
18	1	0.00	0.06	-0.10	0.06	0.26	-0.22	0.07	0.10	-0.27
19	1	0.03	0.17	-0.26	0.00	0.14	-0.22	0.11	0.13	-0.13
20	1	-0.04	-0.01	0.21	-0.07	0.12	0.08	0.10	-0.07	-0.25
21	1	-0.06	-0.15	0.18	0.12	-0.19	0.25	-0.21	-0.14	0.21
22	7	-0.06	-0.14	0.19	0.14	0.14	0.00	-0.08	-0.03	-0.13
23	1	-0.04	-0.16	0.15	0.11	0.23	-0.12	-0.07	-0.02	-0.27
24	1	-0.07	-0.25	0.26	0.14	0.06	0.06	-0.18	-0.10	-0.09
25	6	0.12	-0.04	-0.08	-0.15	0.02	-0.05	0.06	-0.01	-0.05
26	7	0.19	-0.07	-0.14	-0.21	0.03	-0.10	0.09	-0.03	-0.10

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 96.4970 144.2271 161.1218

Red. masses -- 5.8520 6.0431 6.5801

Frc consts -- 0.0321 0.0741 0.1006

IR Inten -- 0.1321 2.6322 5.2712

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	-0.03	0.14	0.00	-0.03	-0.05	0.04	0.18	-0.14
2	6	0.02	-0.08	0.14	-0.03	0.02	0.03	0.07	0.03	-0.14
3	6	0.06	-0.07	0.08	0.04	-0.04	-0.20	-0.01	-0.05	-0.15
4	6	0.07	-0.06	-0.02	0.00	-0.01	-0.08	-0.03	-0.11	0.04
5	6	0.05	-0.06	-0.04	-0.06	0.06	0.16	0.06	-0.11	0.19
6	6	0.00	-0.06	0.04	-0.10	0.09	0.28	0.16	-0.07	0.10
7	6	-0.01	-0.07	0.13	-0.10	0.09	0.29	0.17	0.00	-0.04
8	1	0.08	-0.08	0.09	0.10	-0.10	-0.46	-0.06	-0.05	-0.26
9	1	0.11	-0.06	-0.08	0.04	-0.04	-0.23	-0.10	-0.17	0.06
10	1	-0.03	-0.08	0.17	-0.12	0.12	0.39	0.25	0.06	-0.06
11	6	0.03	0.18	-0.15	0.03	-0.03	-0.07	-0.03	0.06	0.10
12	6	0.01	0.11	-0.10	0.05	-0.01	-0.04	-0.08	0.00	0.09
13	6	0.00	0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.04	-0.01	0.03

14	6	0.05	0.08	-0.10	-0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.05	0.08
15	6	0.08	0.15	-0.15	-0.02	-0.03	-0.02	0.04	0.02	0.09
16	7	0.05	0.12	-0.07	-0.01	-0.04	-0.06	0.04	0.11	0.03
17	1	0.03	0.24	-0.19	0.04	-0.05	-0.08	-0.05	0.10	0.11
18	1	0.07	0.08	-0.13	-0.04	-0.02	0.05	0.03	-0.11	0.11
19	1	0.11	0.20	-0.20	-0.05	-0.05	0.00	0.08	0.00	0.12
20	1	0.07	-0.05	-0.12	-0.07	0.07	0.18	0.05	-0.17	0.34
21	1	-0.01	0.13	-0.12	0.08	0.00	-0.05	-0.13	-0.02	0.12
22	7	-0.07	-0.16	0.19	0.05	0.02	0.04	-0.05	0.01	-0.14
23	1	-0.02	-0.26	0.24	0.03	0.04	0.07	-0.03	-0.01	-0.18
24	1	-0.06	-0.24	0.24	0.09	0.03	0.04	-0.14	0.06	-0.19
25	6	-0.09	-0.04	-0.01	-0.02	0.03	0.07	0.05	-0.04	0.04
26	7	-0.24	0.00	-0.07	0.12	-0.09	-0.31	-0.34	0.05	-0.17

59 bphCN-nhcCN

0 1 -667.132677

B	0.19244000	-0.22560100	0.32116200
C	-1.27020400	-0.41852200	0.03305000
C	-2.21573700	0.59832700	0.29542900
C	-3.57084300	0.41097600	0.01093000
C	-4.02623800	-0.82659600	-0.47362200
C	-3.11357200	-1.85251000	-0.70405700
C	-1.75596500	-1.64371000	-0.49225400
H	-1.88932800	1.53683700	0.72608100
H	-5.08199000	-0.97078900	-0.66680900
H	-3.46301000	-2.80454900	-1.08655100
H	-1.05043300	-2.42948300	-0.73694000
C	3.76655000	-0.83305400	0.85734600
C	3.83470500	0.21403500	0.00507400
C	1.61338600	-0.34832400	0.23129300
N	2.45285000	-1.25042200	0.93776300
H	2.11184700	-1.79582000	1.71138700
H	4.56415000	-1.34877100	1.36518800

N	2.52886800	0.44668700	-0.51402700
H	2.27196900	1.39170000	-0.75663500
C	-4.50426500	1.47111300	0.24898900
N	-5.25839800	2.32570400	0.43843700
C	4.96557200	0.92358000	-0.43995500
N	5.88157400	1.53188500	-0.80429700

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		17.3690			34.6209			39.9353		
Red. masses --		7.7732			6.9026			5.1290		
Frc consts --		0.0014			0.0049			0.0048		
IR Inten --		1.3298			5.9835			11.5442		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.23	-0.17	-0.01	-0.08	0.31	0.00	0.10	0.07
2	6	-0.02	-0.16	-0.06	0.01	-0.07	0.19	0.01	0.08	0.07
3	6	0.07	-0.06	-0.08	0.02	-0.05	0.16	-0.03	0.06	0.01
4	6	0.04	0.02	0.00	0.05	0.02	-0.03	-0.02	0.00	0.01
5	6	-0.08	0.02	0.12	0.06	0.08	-0.18	0.02	-0.05	0.09
6	6	-0.17	-0.07	0.16	0.05	0.06	-0.13	0.05	-0.03	0.16
7	6	-0.14	-0.16	0.06	0.03	-0.01	0.05	0.05	0.03	0.13
8	1	0.17	-0.06	-0.17	0.00	-0.10	0.27	-0.07	0.10	-0.04
9	1	-0.10	0.08	0.19	0.08	0.14	-0.33	0.02	-0.09	0.09
10	1	-0.27	-0.08	0.26	0.06	0.10	-0.25	0.09	-0.07	0.22
11	1	-0.22	-0.24	0.08	0.03	-0.02	0.08	0.07	0.04	0.17
12	6	0.02	0.02	-0.03	0.07	-0.07	-0.09	0.00	-0.18	-0.22
13	6	-0.02	0.06	0.02	-0.05	-0.01	-0.03	0.02	-0.03	-0.03
14	6	0.01	-0.11	-0.09	-0.01	-0.09	0.17	0.00	0.06	-0.02
15	7	0.05	-0.08	-0.10	0.09	-0.10	0.02	-0.02	-0.11	-0.22
16	1	0.06	-0.12	-0.12	0.18	-0.18	0.01	-0.02	-0.26	-0.33
17	1	0.04	0.05	-0.02	0.14	-0.08	-0.21	-0.01	-0.33	-0.36
18	7	-0.01	-0.01	-0.03	-0.11	-0.02	0.13	0.00	0.15	0.09
19	1	-0.07	-0.01	0.03	-0.17	-0.02	0.16	0.04	0.20	0.25

20	6	0.15	0.12	-0.04	0.06	0.05	-0.08	-0.06	-0.01	-0.09
21	7	0.23	0.20	-0.07	0.08	0.08	-0.13	-0.09	-0.03	-0.17
22	6	-0.05	0.16	0.10	-0.13	0.07	-0.10	0.04	-0.01	0.05
23	7	-0.08	0.25	0.17	-0.20	0.14	-0.17	0.06	0.01	0.13

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	88.9056	125.1110	146.5381
Red. masses --	6.4509	6.6080	7.7573
Frc consts --	0.0300	0.0609	0.0981
IR Inten --	2.5924	15.0995	8.0157

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.04	-0.10	-0.07	-0.02	0.05	0.05	-0.06	0.21	0.14
2	6	-0.04	-0.13	-0.02	-0.04	-0.10	0.19	0.00	0.05	0.01
3	6	-0.01	-0.11	0.00	-0.06	-0.14	0.30	-0.06	0.02	-0.17
4	6	-0.02	-0.05	-0.02	-0.03	-0.08	0.14	-0.04	-0.08	-0.20
5	6	-0.06	-0.03	-0.05	0.00	-0.01	-0.06	0.05	-0.14	-0.14
6	6	-0.09	-0.06	-0.05	0.00	0.00	-0.09	0.13	-0.12	0.03
7	6	-0.08	-0.11	-0.04	-0.01	-0.04	0.04	0.10	-0.04	0.13
8	1	0.01	-0.13	0.02	-0.07	-0.20	0.43	-0.14	0.07	-0.22
9	1	-0.06	0.01	-0.06	0.02	0.04	-0.21	0.07	-0.22	-0.18
10	1	-0.12	-0.04	-0.06	0.02	0.05	-0.24	0.21	-0.18	0.11
11	1	-0.11	-0.13	-0.04	0.00	-0.01	-0.02	0.16	-0.05	0.30
12	6	0.00	0.02	-0.05	-0.05	0.13	-0.04	-0.10	-0.03	-0.04
13	6	0.00	0.13	0.08	-0.04	0.05	-0.12	-0.07	-0.05	-0.06
14	6	-0.02	0.15	0.09	-0.03	0.06	-0.12	-0.08	0.08	0.00
15	7	-0.01	0.10	0.01	-0.04	0.09	-0.07	-0.13	0.05	-0.01
16	1	0.01	-0.02	-0.07	-0.05	0.19	0.00	-0.14	0.06	-0.01
17	1	0.01	-0.10	-0.20	-0.06	0.20	0.04	-0.13	-0.05	-0.03
18	7	-0.03	0.32	0.24	-0.03	-0.03	-0.22	-0.06	-0.01	-0.05
19	1	-0.01	0.40	0.51	-0.04	-0.06	-0.31	-0.02	-0.02	-0.14
20	6	0.05	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.02	0.05	-0.05	-0.06
21	7	0.13	0.06	0.03	0.10	0.10	-0.16	0.35	0.14	0.30
22	6	0.06	-0.03	-0.04	0.04	0.01	-0.01	-0.06	-0.03	0.00

23 7 0.14 -0.22 -0.15 0.20 -0.10 0.21 -0.06 0.02 0.08

0 3 -667.140235

B	-0.23892300	-1.14093900	-0.58519600
C	1.24601600	-0.96212300	-0.26595900
C	1.87671500	0.29591600	-0.39083900
C	3.23864200	0.46154800	-0.11219500
C	4.01731400	-0.63166700	0.29764000
C	3.41489900	-1.88196100	0.41633100
C	2.06348200	-2.04671700	0.13534100
H	1.30874800	1.15702200	-0.72589600
H	5.07025200	-0.49615000	0.51017000
H	4.00939400	-2.73392800	0.72662400
H	1.61992500	-3.03248300	0.22380200
C	-2.90003600	0.94824000	0.98313800
C	-3.64745700	0.23331000	0.09009600
C	-1.46265200	-0.42767000	-0.15515400
N	-1.60162400	0.55501200	0.83174000
H	-0.82095200	0.89558200	1.37037700
H	-3.21560900	1.69166200	1.69540000
N	-2.76395100	-0.59746400	-0.59894300
H	-3.01577100	-1.25122500	-1.32318500
C	3.83449600	1.75741300	-0.24242000
N	4.30725800	2.80760500	-0.34221500
C	-5.03614200	0.26961900	-0.14573000
N	-6.17497200	0.28895800	-0.34955600

1	2	3
A	A	A

Frequencies --	21.9107	37.1437	40.6791
Red. masses --	6.5550	7.4169	5.6913
Frc consts --	0.0019	0.0060	0.0055
IR Inten --	3.5423	4.1833	1.3328

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	0.21	-0.08	-0.01	0.07	-0.08	0.01	-0.03	-0.24
2	6	0.00	0.14	-0.02	-0.01	0.05	-0.07	-0.01	-0.02	-0.13
3	6	0.09	0.09	-0.06	0.04	0.03	-0.03	-0.01	-0.02	-0.15
4	6	0.10	0.00	-0.03	0.03	-0.02	0.04	-0.05	0.02	0.02
5	6	0.01	-0.03	0.04	-0.02	-0.05	0.06	-0.09	0.06	0.21
6	6	-0.08	0.02	0.09	-0.07	-0.04	0.02	-0.09	0.06	0.22
7	6	-0.08	0.10	0.06	-0.06	0.02	-0.04	-0.05	0.02	0.06
8	1	0.16	0.11	-0.10	0.09	0.05	-0.05	0.02	-0.06	-0.29
9	1	0.01	-0.10	0.07	-0.03	-0.09	0.12	-0.12	0.10	0.34
10	1	-0.15	-0.01	0.15	-0.11	-0.06	0.04	-0.12	0.10	0.37
11	1	-0.15	0.13	0.09	-0.10	0.03	-0.07	-0.05	0.02	0.08
12	6	-0.14	-0.17	0.16	0.01	0.17	-0.18	0.13	-0.12	0.04
13	6	-0.08	-0.06	0.02	-0.02	0.01	-0.02	0.06	-0.01	0.01
14	6	-0.03	0.09	-0.01	0.00	0.11	-0.12	0.03	-0.06	-0.16
15	7	-0.12	-0.08	0.15	0.03	0.24	-0.24	0.11	-0.14	-0.06
16	1	-0.15	-0.12	0.22	0.05	0.35	-0.34	0.15	-0.21	-0.08
17	1	-0.20	-0.30	0.27	0.03	0.24	-0.24	0.19	-0.17	0.12
18	7	-0.01	0.10	-0.08	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.11
19	1	0.04	0.20	-0.19	-0.05	-0.16	0.15	-0.06	0.09	-0.15
20	6	0.20	-0.05	-0.08	0.09	-0.04	0.09	-0.06	0.02	-0.01
21	7	0.29	-0.09	-0.12	0.14	-0.06	0.14	-0.06	0.02	-0.02
22	6	-0.07	-0.09	-0.02	-0.05	-0.15	0.13	0.05	0.06	0.10
23	7	-0.06	-0.12	-0.06	-0.08	-0.30	0.27	0.03	0.12	0.18

4

5

6

A

A

A

Frequencies --

109.1679

126.6921

143.8238

Red. masses --

7.9864

7.7047

6.5200

Frc consts --

0.0561

0.0729

0.0795

IR Inten --

1.0278

2.8596

5.5873

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	0.04	0.03	0.03	-0.06	0.04	-0.03	-0.01	-0.09
2	6	0.00	-0.08	0.10	0.01	0.02	0.18	-0.05	0.02	-0.06

3	6	-0.01	-0.08	0.12	-0.05	0.06	0.32	-0.10	0.07	0.18
4	6	0.00	-0.07	0.06	-0.01	0.06	0.17	-0.11	0.07	0.24
5	6	0.03	-0.08	0.00	0.06	0.04	-0.02	-0.12	0.05	0.20
6	6	0.03	-0.08	0.00	0.09	0.02	-0.08	-0.06	0.00	-0.07
7	6	0.02	-0.09	0.05	0.08	0.01	0.01	-0.02	-0.03	-0.25
8	1	-0.03	-0.08	0.16	-0.09	0.08	0.44	-0.11	0.09	0.25
9	1	0.04	-0.08	-0.06	0.08	0.04	-0.16	-0.13	0.05	0.27
10	1	0.05	-0.09	-0.04	0.15	0.00	-0.23	-0.04	-0.03	-0.17
11	1	0.03	-0.10	0.04	0.13	-0.02	-0.10	0.03	-0.07	-0.51
12	6	0.01	0.00	0.10	-0.06	-0.10	-0.12	0.09	0.04	0.05
13	6	0.06	0.16	-0.08	-0.04	-0.06	-0.17	0.04	0.02	0.11
14	6	0.06	0.19	-0.07	-0.03	-0.07	-0.11	0.01	0.00	0.01
15	7	0.03	0.05	0.06	-0.06	-0.09	-0.10	0.08	0.01	0.00
16	1	-0.01	-0.09	0.20	-0.08	-0.14	-0.04	0.11	0.02	-0.05
17	1	-0.03	-0.17	0.25	-0.08	-0.13	-0.10	0.14	0.07	0.04
18	7	0.10	0.35	-0.24	-0.02	-0.03	-0.19	-0.01	-0.01	0.10
19	1	0.12	0.38	-0.27	0.00	-0.04	-0.19	-0.05	-0.01	0.11
20	6	-0.10	-0.04	-0.02	0.03	0.03	0.03	-0.04	0.01	0.06
21	7	-0.29	0.04	-0.14	0.15	-0.04	-0.18	0.11	-0.09	-0.28
22	6	0.04	-0.02	0.00	-0.06	0.01	-0.01	0.06	0.00	0.03
23	7	0.02	-0.28	0.07	-0.12	0.20	0.31	0.09	-0.12	-0.18

60 bphCN-pyCN

0 1 -689.186593

B	-0.01356700	-1.76655300	0.16530600
C	1.37711800	-1.16320300	-0.09175400
C	2.42140900	-1.95707500	-0.60950000
C	3.68717900	-1.42614900	-0.83782600
C	3.95156800	-0.09663500	-0.52441800
C	2.93531700	0.71430600	0.00667200
C	1.65572800	0.18502300	0.20548800
H	2.21952500	-2.99922800	-0.82857900
H	4.47500500	-2.04751100	-1.24686600

H	0.87751100	0.82931700	0.59884000
C	-1.93958100	-0.42708400	-0.58347000
C	-3.12720800	0.23213400	-0.32698300
C	-3.60338600	0.40129100	0.98531000
C	-2.81469100	-0.13399700	2.00982200
C	-1.65534000	-0.81588700	1.74388100
N	-1.18528900	-0.98967500	0.43912800
H	-1.57068100	-0.57034300	-1.58851500
H	-3.11751600	-0.03555800	3.04503200
H	-1.07223500	-1.29689600	2.51593600
H	4.93817600	0.32164600	-0.68370600
H	-4.53763000	0.90619200	1.18009000
C	3.20685700	2.08195400	0.33392800
C	-3.86109300	0.75582700	-1.44052700
N	3.42331200	3.18476900	0.60192200
N	-4.45910600	1.17949300	-2.33283400

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		16.1943			18.6555			40.4739		
Red. masses --		5.7401			8.1452			6.2950		
Frc consts --		0.0009			0.0017			0.0061		
IR Inten --		5.7070			1.7042			1.0997		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.02	0.00	-0.24	-0.01	0.08	-0.02	0.01	0.14	0.00
2	6	0.02	-0.01	-0.08	0.00	0.05	-0.04	0.03	0.10	0.02
3	6	0.08	-0.04	0.10	-0.04	0.05	-0.13	-0.01	0.03	0.06
4	6	0.12	-0.07	0.25	-0.03	0.02	-0.13	0.03	-0.05	0.06
5	6	0.08	-0.05	0.21	0.03	-0.01	-0.03	0.09	-0.05	0.03
6	6	0.01	-0.01	0.02	0.08	-0.02	0.07	0.12	0.02	-0.01
7	6	-0.02	0.00	-0.11	0.06	0.02	0.05	0.09	0.09	-0.02
8	1	0.10	-0.05	0.11	-0.08	0.07	-0.20	-0.06	0.04	0.08
9	1	0.17	-0.09	0.39	-0.07	0.03	-0.21	0.00	-0.10	0.10

10	1	-0.06	0.02	-0.24	0.09	0.02	0.12	0.12	0.14	-0.05
11	6	-0.09	0.00	-0.09	-0.08	-0.05	-0.04	-0.01	0.13	0.01
12	6	-0.05	0.02	0.01	-0.08	-0.05	-0.03	-0.10	-0.03	0.01
13	6	0.06	0.03	0.05	0.00	0.08	-0.02	-0.20	-0.21	-0.01
14	6	0.13	0.02	-0.02	0.08	0.20	-0.01	-0.20	-0.20	-0.01
15	6	0.11	0.02	-0.11	0.08	0.21	-0.01	-0.11	-0.06	0.00
16	7	0.00	0.01	-0.15	0.00	0.08	-0.03	-0.02	0.09	0.01
17	1	-0.19	-0.04	-0.12	-0.15	-0.15	-0.05	0.06	0.26	0.02
18	1	0.22	0.02	0.01	0.14	0.30	0.00	-0.26	-0.32	-0.02
19	1	0.19	0.04	-0.15	0.14	0.31	0.00	-0.11	-0.07	-0.01
20	1	0.10	-0.06	0.32	0.04	-0.04	-0.02	0.11	-0.11	0.04
21	1	0.08	0.04	0.13	0.00	0.08	-0.01	-0.27	-0.33	-0.02
22	6	-0.03	0.01	-0.02	0.14	-0.06	0.18	0.20	0.02	-0.06
23	6	-0.14	0.03	0.07	-0.17	-0.19	-0.04	-0.10	-0.01	0.01
24	7	-0.06	0.02	-0.06	0.19	-0.09	0.28	0.29	0.01	-0.11
25	7	-0.21	0.04	0.12	-0.24	-0.30	-0.04	-0.10	0.01	0.02

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	118.5907	125.5233	140.3127
Red. masses --	6.3546	6.8373	5.3088
Frc consts --	0.0527	0.0635	0.0616
IR Inten --	1.5236	3.7391	2.2693

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	-0.07	0.01	0.04	0.01	0.05	-0.01	-0.02	-0.01
2	6	0.01	0.00	0.19	0.10	-0.09	0.17	-0.03	0.01	-0.03
3	6	-0.01	0.05	0.08	0.04	-0.06	0.01	-0.02	0.01	0.00
4	6	-0.05	0.09	-0.04	0.01	-0.03	-0.11	-0.01	0.01	0.03
5	6	-0.06	0.08	-0.04	0.04	-0.04	-0.08	-0.02	0.01	0.03
6	6	-0.02	0.04	0.11	0.10	-0.09	0.11	-0.04	0.02	0.00
7	6	0.01	0.00	0.24	0.14	-0.13	0.26	-0.04	0.02	-0.03
8	1	-0.01	0.05	0.05	0.02	-0.04	-0.07	-0.01	0.01	0.00
9	1	-0.08	0.12	-0.15	-0.04	0.01	-0.26	0.00	0.01	0.05
10	1	0.03	-0.03	0.34	0.18	-0.15	0.39	-0.05	0.02	-0.05

11	6	-0.11	-0.24	-0.10	0.13	0.19	-0.04	0.09	0.16	0.01
12	6	0.00	-0.06	-0.07	0.06	0.08	-0.07	0.13	0.22	0.03
13	6	0.10	0.10	-0.05	-0.03	-0.04	-0.09	0.14	0.21	0.03
14	6	0.05	0.01	-0.06	-0.03	-0.02	-0.07	-0.02	-0.07	0.01
15	6	-0.04	-0.13	-0.08	0.01	0.06	-0.05	-0.13	-0.25	-0.02
16	7	-0.06	-0.16	-0.08	0.07	0.10	-0.04	-0.01	-0.03	-0.01
17	1	-0.19	-0.36	-0.11	0.20	0.27	-0.03	0.11	0.20	0.02
18	1	0.08	0.06	-0.05	-0.08	-0.07	-0.08	-0.09	-0.21	0.00
19	1	-0.07	-0.17	-0.08	-0.02	0.03	-0.04	-0.30	-0.54	-0.07
20	1	-0.10	0.13	-0.16	0.01	-0.01	-0.22	-0.02	0.01	0.06
21	1	0.18	0.25	-0.03	-0.08	-0.13	-0.11	0.19	0.30	0.05
22	6	0.06	0.05	0.01	-0.02	-0.04	0.02	0.00	0.01	0.00
23	6	-0.03	0.01	-0.02	-0.04	0.04	-0.02	0.04	0.05	0.01
24	7	0.25	0.05	-0.17	-0.28	0.04	-0.11	0.08	0.00	-0.01
25	7	-0.10	0.14	0.09	-0.26	0.00	0.10	-0.12	-0.29	-0.04

0 3 -689.200742

B	0.12199000	-1.70152800	-0.34867900
C	-1.24691500	-1.14525200	0.05943900
C	-2.03576300	-1.79203400	1.03580700
C	-3.29909500	-1.32030900	1.37574100
C	-3.83224500	-0.20609500	0.73463600
C	-3.07810400	0.44280100	-0.25443800
C	-1.79804700	-0.01897500	-0.58273100
H	-1.64884600	-2.67629400	1.53041600
H	-3.87869500	-1.82820100	2.13786100
H	-1.24021200	0.50162100	-1.35303500
C	1.64897500	0.15854500	0.22558700
C	2.90457400	0.71634500	0.24367700
C	4.01772100	0.03414900	-0.31020700
C	3.77676400	-1.23427300	-0.86901400
C	2.52562700	-1.77948700	-0.88162500
N	1.41100800	-1.10426000	-0.33924800

H	0.78957200	0.65315800	0.65191100
H	4.58900900	-1.80370000	-1.30330800
H	2.30172200	-2.74941100	-1.30080100
H	-4.82007500	0.15996500	0.98471000
H	5.00239500	0.47743500	-0.29380300
C	-3.61761100	1.58376900	-0.93160000
C	3.07204000	2.00562400	0.84405900
N	-4.05220100	2.50363300	-1.47950700
N	3.22228700	3.04408500	1.32639100

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		14.9756			41.3725			46.7373		
Red. masses --		7.2696			7.2225			5.6690		
Frc consts --		0.0010			0.0073			0.0073		
IR Inten --		1.3025			0.1703			1.1636		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	-0.08	0.11	0.00	-0.14	-0.01	0.00	-0.01	-0.19
2	6	-0.01	-0.08	0.04	0.02	-0.10	0.02	0.01	0.00	-0.17
3	6	-0.12	-0.16	-0.10	0.03	0.02	0.10	0.10	0.02	-0.08
4	6	-0.13	-0.16	-0.17	0.08	0.14	0.13	0.15	0.05	0.05
5	6	-0.04	-0.07	-0.10	0.13	0.14	0.09	0.10	0.06	0.10
6	6	0.07	0.01	0.04	0.12	0.02	0.00	0.01	0.03	0.01
7	6	0.09	0.01	0.11	0.07	-0.10	-0.03	-0.04	-0.01	-0.13
8	1	-0.19	-0.23	-0.17	-0.01	0.03	0.14	0.14	0.02	-0.10
9	1	-0.22	-0.22	-0.28	0.08	0.23	0.19	0.22	0.07	0.12
10	1	0.17	0.08	0.22	0.07	-0.19	-0.09	-0.11	-0.03	-0.19
11	6	-0.03	0.00	-0.01	-0.09	-0.10	0.02	-0.04	-0.01	-0.13
12	6	-0.05	0.04	-0.06	-0.13	-0.01	-0.01	-0.04	-0.03	0.01
13	6	-0.03	0.04	-0.03	-0.11	0.10	-0.10	0.03	-0.08	0.20
14	6	0.00	-0.01	0.07	-0.04	0.11	-0.13	0.07	-0.09	0.22
15	6	0.01	-0.05	0.12	0.00	0.01	-0.10	0.06	-0.07	0.06
16	7	0.00	-0.04	0.07	-0.02	-0.09	-0.03	0.01	-0.03	-0.10

17	1	-0.04	0.01	-0.03	-0.10	-0.18	0.09	-0.09	0.03	-0.27
18	1	0.01	-0.02	0.10	-0.02	0.19	-0.20	0.12	-0.13	0.35
19	1	0.04	-0.08	0.19	0.05	0.01	-0.13	0.10	-0.08	0.07
20	1	-0.05	-0.07	-0.15	0.17	0.23	0.12	0.14	0.09	0.21
21	1	-0.05	0.07	-0.07	-0.14	0.17	-0.13	0.03	-0.10	0.32
22	6	0.17	0.11	0.12	0.19	0.01	-0.05	-0.04	0.05	0.08
23	6	-0.08	0.09	-0.15	-0.21	-0.03	0.06	-0.11	0.01	-0.05
24	7	0.25	0.18	0.18	0.26	0.02	-0.10	-0.08	0.06	0.14
25	7	-0.11	0.13	-0.23	-0.29	-0.04	0.12	-0.19	0.05	-0.10
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		114.1334			127.6969			141.5061		
Red. masses --		5.8148			6.7560			5.9163		
Frc consts --		0.0446			0.0649			0.0698		
IR Inten --		3.5024			2.1694			2.5942		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.03	-0.01	-0.01	0.02	0.04	0.07	-0.02	0.02	-0.09
2	6	0.04	0.07	-0.06	0.07	0.12	0.15	-0.01	-0.01	-0.02
3	6	0.03	0.06	-0.07	-0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.03	-0.03
4	6	0.03	0.05	-0.07	-0.05	-0.04	-0.05	0.01	-0.02	0.00
5	6	0.03	0.05	-0.06	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.04
6	6	0.03	0.07	-0.05	0.06	0.12	0.13	0.00	0.02	0.04
7	6	0.04	0.09	-0.05	0.13	0.21	0.25	0.00	0.02	0.02
8	1	0.03	0.05	-0.09	-0.07	-0.06	-0.08	-0.02	-0.06	-0.07
9	1	0.03	0.03	-0.08	-0.12	-0.13	-0.17	0.01	-0.03	-0.01
10	1	0.05	0.10	-0.03	0.19	0.29	0.35	-0.01	0.03	0.03
11	6	0.09	-0.17	0.24	0.07	0.02	-0.14	0.02	-0.11	0.24
12	6	0.04	-0.05	0.02	0.09	-0.05	-0.05	0.02	-0.12	0.27
13	6	0.00	0.07	-0.21	0.10	-0.12	0.05	0.01	-0.07	0.19
14	6	0.03	0.00	-0.08	0.05	-0.08	-0.02	-0.03	0.06	-0.09
15	6	0.08	-0.11	0.14	0.01	-0.01	-0.12	-0.05	0.11	-0.21
16	7	0.08	-0.13	0.17	0.03	0.02	-0.10	-0.01	-0.01	0.02
17	1	0.12	-0.25	0.40	0.07	0.07	-0.20	0.02	-0.15	0.29

18	1	0.02	0.04	-0.15	0.03	-0.11	-0.01	-0.06	0.15	-0.27
19	1	0.10	-0.15	0.22	-0.02	0.02	-0.17	-0.10	0.23	-0.48
20	1	0.03	0.04	-0.07	-0.07	-0.07	-0.11	0.02	0.01	0.06
21	1	-0.05	0.17	-0.42	0.13	-0.19	0.14	0.02	-0.09	0.24
22	6	-0.07	0.05	-0.01	0.00	0.02	0.02	0.01	0.00	0.01
23	6	-0.03	-0.03	0.00	-0.03	-0.05	-0.02	0.01	-0.02	0.07
24	7	-0.26	0.01	0.09	-0.11	-0.13	-0.15	0.03	-0.03	-0.07
25	7	-0.15	0.00	-0.03	-0.34	-0.04	0.05	0.01	0.15	-0.31

61 bph(NH₂)-nhc(NH₂)

0 1 -593.316258

B	-0.36074700	-0.14289700	0.10458000
C	1.13361400	-0.06581600	0.04149500
C	1.82924500	1.10363800	0.43844800
C	3.20766000	1.19053300	0.38754200
C	3.97181300	0.10150300	-0.07560100
C	3.30563800	-1.07311000	-0.47713100
C	1.92671500	-1.14769400	-0.41533000
H	1.25755900	1.95386400	0.79257000
H	3.88475000	-1.92067900	-0.83004500
H	1.43398400	-2.06216800	-0.72643300
C	-3.85424400	-0.22569700	1.05037900
C	-3.95918200	0.19415600	-0.21911000
C	-1.75832800	-0.27476200	0.15309000
N	-2.51492300	-0.67503400	1.32633400
H	-2.47140600	-1.67624700	1.50579200
H	-4.59447500	-0.18278700	1.83395900
N	-2.69932300	0.13429300	-0.88462100
H	-2.72867500	-0.47460500	-1.70313400
H	3.71070600	2.09875800	0.70422700
N	-5.05468100	0.70602400	-0.91429300
H	-4.82565000	1.14918900	-1.79134800
H	-5.86899300	0.11303200	-0.96772400

N	5.34797800	0.16809300	-0.09396400
H	5.85204800	-0.50877600	-0.64404200
H	5.78294300	1.07477100	-0.03360900

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		32.1875			36.5564			46.9157		
Red. masses --		4.8396			5.0574			3.6688		
Frc consts --		0.0030			0.0040			0.0048		
IR Inten --		2.8306			1.7558			3.4666		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	0.22	0.02	0.00	-0.03	0.22	0.00	0.06	0.05
2	6	0.01	0.14	0.00	0.00	-0.03	0.18	0.00	0.04	0.04
3	6	0.10	0.06	0.07	0.02	-0.04	0.17	0.03	0.08	-0.10
4	6	0.11	-0.04	0.07	0.02	-0.02	0.04	0.03	0.06	-0.15
5	6	0.03	-0.07	0.00	-0.01	0.02	-0.10	0.01	-0.01	-0.02
6	6	-0.07	0.00	-0.07	-0.03	0.02	-0.08	-0.02	-0.06	0.15
7	6	-0.07	0.11	-0.06	-0.02	0.00	0.06	-0.02	-0.02	0.16
8	1	0.17	0.09	0.12	0.04	-0.07	0.26	0.05	0.13	-0.19
9	1	-0.14	-0.02	-0.13	-0.05	0.05	-0.18	-0.03	-0.12	0.26
10	1	-0.15	0.16	-0.11	-0.04	0.00	0.07	-0.04	-0.05	0.27
11	6	-0.02	-0.09	-0.02	-0.10	-0.01	-0.07	-0.04	-0.20	-0.06
12	6	-0.05	-0.10	-0.02	0.04	0.00	-0.08	-0.01	0.00	0.00
13	6	0.01	0.16	0.02	0.00	-0.01	0.15	0.00	0.03	0.01
14	7	0.03	0.10	0.01	-0.13	0.00	0.07	-0.03	-0.16	-0.08
15	1	0.17	0.12	0.07	-0.14	0.01	0.10	0.02	-0.18	-0.20
16	1	-0.05	-0.19	-0.04	-0.18	-0.01	-0.15	-0.07	-0.36	-0.09
17	7	-0.02	0.09	0.02	0.11	0.01	0.06	0.02	0.16	0.04
18	1	0.09	0.14	-0.02	0.19	0.02	0.04	0.09	0.31	-0.07
19	1	0.18	-0.10	0.13	0.03	-0.02	0.03	0.04	0.10	-0.28
20	7	-0.11	-0.26	-0.04	0.11	0.00	-0.20	-0.01	0.06	0.04
21	1	-0.14	-0.17	-0.01	0.21	0.02	-0.16	0.01	0.23	0.13
22	1	0.01	-0.42	-0.13	0.13	-0.01	-0.31	0.04	0.01	-0.12

23	7	0.03	-0.18	0.01	-0.02	0.06	-0.26	0.01	-0.03	-0.05
24	1	-0.02	-0.19	-0.04	-0.07	0.10	-0.36	-0.01	-0.12	0.05
25	1	0.11	-0.23	0.07	-0.03	0.07	-0.28	0.02	-0.03	-0.18
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		88.3742			113.9447			206.7283		
Red. masses --		3.7751			5.1172			1.2199		
Frc consts --		0.0174			0.0391			0.0307		
IR Inten --		0.7929			3.6094			44.8098		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.03	-0.16	-0.05	0.00	0.03	-0.09	0.00	0.00	0.01
2	6	0.03	-0.15	-0.05	0.02	-0.05	0.14	0.00	0.02	0.01
3	6	-0.04	-0.11	-0.04	0.02	-0.06	0.17	0.00	0.02	0.01
4	6	-0.05	-0.03	-0.01	0.02	-0.05	0.13	0.00	0.01	0.00
5	6	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
6	6	0.10	-0.02	0.00	0.02	-0.05	0.12	-0.01	0.01	0.00
7	6	0.10	-0.10	-0.04	0.02	-0.07	0.18	-0.01	0.02	0.01
8	1	-0.10	-0.15	-0.05	0.03	-0.07	0.20	0.01	0.02	0.01
9	1	0.16	0.01	0.01	0.02	-0.04	0.11	-0.02	0.01	-0.01
10	1	0.16	-0.13	-0.05	0.02	-0.08	0.22	-0.02	0.02	0.01
11	6	-0.06	-0.03	-0.02	0.09	0.06	0.00	0.03	0.05	0.00
12	6	-0.04	0.02	0.00	-0.04	0.01	-0.01	0.02	0.02	0.00
13	6	0.00	0.11	0.04	0.00	0.06	-0.20	0.01	-0.06	-0.02
14	7	-0.03	0.14	0.04	0.10	0.05	-0.13	-0.01	-0.01	-0.01
15	1	0.10	0.17	0.18	0.11	0.04	-0.17	-0.03	0.01	0.07
16	1	-0.10	-0.15	-0.05	0.16	0.08	0.06	0.02	0.06	-0.01
17	7	0.00	0.22	0.08	-0.10	0.02	-0.13	0.01	-0.06	-0.02
18	1	0.11	0.41	-0.06	-0.16	0.02	-0.12	-0.03	-0.07	-0.01
19	1	-0.11	0.00	0.00	0.02	-0.04	0.11	0.01	0.01	0.00
20	7	-0.10	-0.09	-0.02	-0.13	-0.05	0.09	-0.05	0.00	0.04
21	1	-0.08	0.18	0.13	-0.26	-0.06	0.05	0.04	0.53	0.33
22	1	0.11	-0.35	-0.34	-0.12	-0.07	0.22	0.27	-0.38	-0.59
23	7	0.02	0.11	0.03	0.01	0.09	-0.23	0.00	-0.02	0.00

24	1	0.08	0.14	0.04	-0.05	0.13	-0.34	-0.01	-0.03	0.00
25	1	-0.04	0.13	0.04	-0.05	0.12	-0.34	0.01	-0.02	0.00

0 3 -593.320901

B	-0.36775300	-1.38408400	0.25082900
C	1.02780400	-0.76338600	0.14622200
C	1.35765700	0.46239900	0.77649100
C	2.62442500	1.02730900	0.69660800
C	3.64510500	0.39289400	-0.02629300
C	3.35109800	-0.82847200	-0.65199400
C	2.08407100	-1.38653600	-0.55992800
H	0.60421400	0.97571700	1.36797500
H	4.13037500	-1.34479700	-1.20565300
H	1.89616700	-2.33678300	-1.04931000
C	-4.01189000	-0.53904000	0.14534800
C	-3.47231000	0.65946600	-0.20788500
C	-1.72610000	-0.79540200	0.15954600
N	-2.94761000	-1.40554800	0.38270000
H	-3.01675600	-2.36658200	0.67197500
H	-5.04113500	-0.83797100	0.23687900
N	-2.09901700	0.50321600	-0.20526300
H	-1.43176500	1.24293000	-0.35157400
H	2.83377200	1.96303000	1.20788500
N	-4.04234700	1.90674000	-0.47703300
H	-3.84679900	2.25151400	-1.41092300
H	-5.03780400	1.92945300	-0.30185900
N	4.94068300	0.92625300	-0.06224400
H	5.50627900	0.63118900	-0.84502600
H	5.00108200	1.92269400	0.08968900

1	2	3
A	A	A

Frequencies -- 26.3075 37.2692 62.4495

Red. masses --	3.9038	5.1490	4.0589
Frc consts --	0.0016	0.0042	0.0093
IR Inten --	0.3869	1.6793	3.9588

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.03	0.11	-0.01	-0.17	0.06	0.00	0.06	0.12
2	6	0.00	0.02	0.06	-0.03	-0.12	0.06	0.01	0.03	0.14
3	6	0.08	-0.08	0.21	-0.09	-0.10	0.05	0.07	0.04	0.09
4	6	0.08	-0.09	0.18	-0.14	0.00	0.00	0.08	0.02	0.00
5	6	0.00	0.00	-0.02	-0.12	0.07	-0.04	0.02	-0.01	-0.05
6	6	-0.08	0.10	-0.17	-0.05	0.04	-0.01	-0.03	-0.04	0.02
7	6	-0.08	0.10	-0.13	0.00	-0.06	0.04	-0.03	-0.01	0.11
8	1	0.14	-0.16	0.35	-0.11	-0.15	0.08	0.11	0.07	0.12
9	1	-0.14	0.17	-0.32	-0.03	0.09	-0.03	-0.07	-0.07	-0.01
10	1	-0.14	0.18	-0.25	0.05	-0.07	0.06	-0.08	-0.03	0.16
11	6	0.00	0.01	0.01	0.04	0.08	-0.05	-0.02	-0.08	-0.25
12	6	0.00	-0.02	-0.07	0.15	0.05	-0.01	-0.03	-0.01	-0.02
13	6	0.00	0.01	0.06	0.02	-0.10	0.03	0.00	0.04	0.06
14	7	0.00	0.02	0.09	-0.03	-0.01	-0.03	-0.01	-0.05	-0.18
15	1	-0.01	0.04	0.15	-0.12	-0.01	-0.05	0.00	-0.10	-0.36
16	1	0.00	0.01	0.01	0.01	0.16	-0.10	-0.01	-0.14	-0.43
17	7	0.00	-0.02	-0.04	0.14	-0.06	0.04	-0.02	0.07	0.17
18	1	0.00	-0.02	-0.07	0.21	-0.12	0.08	-0.04	0.11	0.34
19	1	0.14	-0.17	0.29	-0.19	0.02	-0.02	0.12	0.03	-0.05
20	7	0.00	-0.04	-0.17	0.26	0.10	0.00	-0.06	-0.01	0.05
21	1	0.03	-0.11	-0.19	0.35	0.11	0.02	0.08	0.13	0.13
22	1	0.00	-0.04	-0.21	0.26	0.17	-0.06	-0.09	-0.09	-0.11
23	7	0.01	-0.02	-0.06	-0.17	0.18	-0.11	0.02	-0.02	-0.18
24	1	-0.07	0.09	-0.16	-0.18	0.21	-0.13	-0.05	-0.06	-0.21
25	1	0.04	-0.04	0.08	-0.25	0.19	-0.13	0.03	-0.01	-0.23

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	118.7658	147.5285	185.6721
Red. masses --	4.4256	5.7804	1.1118

Frc consts		0.0368			0.0741			0.0226		
IR Inten		5.3631			2.8919			36.1971		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.04	-0.01	0.00	0.01	0.20	0.00	0.01	-0.02
2	6	0.04	-0.04	0.11	-0.06	0.16	0.08	0.00	0.00	0.00
3	6	0.06	-0.06	0.14	-0.01	0.19	-0.01	0.01	0.00	0.01
4	6	0.05	-0.05	0.10	0.03	0.13	-0.07	0.01	-0.01	0.01
5	6	0.02	0.00	0.01	-0.01	0.02	-0.03	0.01	0.00	0.00
6	6	0.03	-0.04	0.08	-0.12	0.06	-0.06	0.01	-0.01	0.01
7	6	0.04	-0.06	0.13	-0.14	0.13	0.00	0.01	0.00	0.01
8	1	0.07	-0.07	0.16	0.04	0.25	0.00	0.01	0.00	0.01
9	1	0.02	-0.04	0.06	-0.17	0.01	-0.08	0.01	-0.01	0.02
10	1	0.04	-0.07	0.15	-0.21	0.14	0.02	0.01	0.00	0.01
11	6	0.00	0.03	0.11	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.01	0.03
12	6	-0.04	0.02	0.00	0.06	-0.05	0.00	-0.01	0.00	0.00
13	6	0.00	0.01	-0.19	-0.03	-0.15	-0.06	-0.01	-0.01	-0.02
14	7	0.01	0.00	-0.10	-0.06	-0.11	-0.11	0.00	0.00	0.01
15	1	0.05	0.08	0.17	-0.10	-0.03	0.14	0.00	0.01	0.02
16	1	0.00	0.05	0.25	-0.03	0.06	0.08	-0.01	0.02	0.08
17	7	-0.04	-0.02	-0.28	0.04	-0.17	-0.18	-0.01	-0.01	-0.05
18	1	-0.06	0.02	-0.19	0.08	-0.17	0.01	0.00	-0.02	-0.05
19	1	0.06	-0.04	0.09	0.09	0.13	-0.10	0.01	-0.01	0.01
20	7	-0.06	0.04	0.11	0.17	0.03	0.13	-0.02	-0.01	0.04
21	1	-0.36	-0.03	0.02	0.15	0.08	0.14	0.56	0.34	0.30
22	1	0.00	0.10	0.45	0.18	0.13	0.20	-0.14	-0.23	-0.62
23	7	-0.03	0.09	-0.17	0.07	-0.18	0.07	0.00	0.01	-0.01
24	1	-0.11	0.10	-0.23	0.08	-0.26	0.10	-0.01	0.01	-0.02
25	1	-0.09	0.11	-0.23	0.23	-0.19	0.10	-0.01	0.01	-0.02

62 bph(NH₂)-py(NH₂)

0 1 -615.376843

B 0.01118900 1.60796000 0.12995900

C -1.30800800 0.81776700 0.07177400

C	-2.52324100	1.42048200	0.46840800
C	-3.73476700	0.75398600	0.40332100
C	-3.79800600	-0.55555900	-0.10754700
C	-2.60690800	-1.17481000	-0.52692800
C	-1.39858000	-0.50479800	-0.42277900
H	-2.49202700	2.44179900	0.83249600
H	-4.64730800	1.24241500	0.73182700
H	-0.49657200	-1.01597700	-0.74547800
C	2.19728300	1.07546800	-0.93411000
C	3.40618300	0.43035300	-0.98369300
C	3.79584100	-0.46264100	0.03422800
C	2.85685200	-0.69095300	1.05210600
C	1.62122700	-0.08730200	1.02449100
N	1.26941100	0.84316800	0.06136700
H	1.92175800	1.83904400	-1.64799700
H	4.08061000	0.66465100	-1.79977900
H	3.07794700	-1.37565700	1.86412800
H	0.87366700	-0.28335200	1.77977100
H	-2.64213300	-2.18591900	-0.92286300
N	-5.00396700	-1.23853600	-0.15371900
H	-5.84557300	-0.68407200	-0.12116200
H	-5.06181700	-2.02529300	-0.78169600
N	5.07796300	-1.01119400	0.07211400
H	5.18487800	-1.83405400	0.64787700
H	5.53953000	-1.10941500	-0.82087500

	1			2			3		
	A			A			A		
Frequencies --	33.8103			43.6652			58.3919		
Red. masses --	4.2608			5.2619			3.5201		
Frc consts --	0.0029			0.0059			0.0071		
IR Inten --	4.7478			2.6171			0.9119		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

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

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	116.2805	129.8964	226.1551
Red. masses --	5.0953	5.0742	5.2675
Frc consts --	0.0406	0.0504	0.1587
IR Inten --	12.5340	1.9581	8.2638

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.07	-0.11	0.03	0.06	0.16	0.00	0.00	0.07
2	6	0.03	-0.01	0.17	-0.01	0.14	0.03	-0.11	0.11	0.15
3	6	0.01	-0.03	0.17	-0.04	0.10	-0.03	-0.19	0.06	0.07
4	6	0.02	-0.04	0.10	-0.01	0.05	-0.07	-0.18	0.02	-0.07
5	6	0.04	-0.01	0.01	0.08	0.02	-0.01	-0.10	-0.01	-0.04
6	6	0.07	-0.04	0.16	0.11	0.08	-0.01	-0.05	0.10	-0.03
7	6	0.06	-0.03	0.23	0.06	0.15	0.00	-0.08	0.14	0.07
8	1	-0.01	-0.03	0.17	-0.09	0.10	-0.02	-0.28	0.05	0.11
9	1	0.00	-0.04	0.04	-0.04	0.00	-0.10	-0.21	-0.01	-0.12
10	1	0.08	-0.03	0.28	0.09	0.19	0.02	-0.06	0.18	0.09
11	6	0.03	0.00	-0.11	-0.13	-0.15	-0.05	0.10	-0.04	-0.07
12	6	0.03	-0.02	-0.04	-0.11	-0.11	-0.06	0.17	0.04	0.04
13	6	-0.04	0.00	0.00	-0.03	-0.03	-0.01	0.15	0.01	0.03
14	6	-0.11	-0.01	-0.07	-0.06	-0.14	-0.07	0.10	0.06	0.00
15	6	-0.10	0.00	-0.15	-0.08	-0.17	-0.06	0.08	0.01	-0.08
16	7	-0.01	0.03	-0.15	-0.06	-0.09	0.02	0.02	-0.04	-0.12
17	1	0.07	0.00	-0.13	-0.17	-0.19	-0.08	0.14	-0.09	-0.13
18	1	0.07	-0.04	-0.01	-0.14	-0.13	-0.09	0.19	0.06	0.06
19	1	-0.17	-0.02	-0.06	-0.05	-0.17	-0.09	0.06	0.09	0.03
20	1	-0.16	-0.01	-0.22	-0.08	-0.21	-0.07	0.08	0.01	-0.07
21	1	0.10	-0.04	0.16	0.16	0.08	0.00	0.04	0.11	-0.06
22	7	0.01	0.06	-0.25	0.14	-0.09	0.06	0.00	-0.18	0.01
23	1	0.04	0.11	-0.39	0.08	-0.17	0.07	-0.10	-0.33	0.00
24	1	0.09	0.11	-0.33	0.19	-0.14	0.11	0.13	-0.24	0.07
25	7	-0.04	0.01	0.11	0.06	0.20	0.09	0.08	-0.17	0.01
26	1	-0.07	0.04	0.15	0.18	0.25	0.13	-0.06	-0.22	-0.03
27	1	0.06	0.03	0.16	0.14	0.26	0.12	0.06	-0.22	0.01

03 -615.387633

B	0.05391100	1.28245500	0.24437400
C	-1.34222600	0.66449400	0.12100700
C	-2.39722400	1.37224400	-0.49733100

C	-3.68324000	0.86026900	-0.58315100
C	-3.99483000	-0.38825300	-0.02202600
C	-2.97038200	-1.10257500	0.61885500
C	-1.68279200	-0.58909900	0.68120800
H	-2.19587600	2.35164900	-0.91891300
H	-4.46112300	1.43089900	-1.08186800
H	-0.92477300	-1.17055600	1.19674600
C	1.55590600	-0.61879100	-0.36593600
C	2.80295800	-1.16660900	-0.47655000
C	3.96138400	-0.44399700	-0.11984600
C	3.75886100	0.88564900	0.32327600
C	2.50803500	1.41639300	0.43115300
N	1.34444400	0.69205700	0.11283100
H	0.66409400	-1.15058400	-0.65933500
H	2.88444800	-2.17740400	-0.86276400
H	4.60510500	1.51157300	0.58517300
H	2.32940200	2.42590700	0.77204400
H	-3.19063700	-2.06792100	1.06546800
N	-5.27607800	-0.92860700	-0.14310500
H	-6.01980100	-0.26532100	-0.30318800
H	-5.52532400	-1.62780200	0.54077900
N	5.24649200	-0.97341400	-0.28951200
H	5.96155500	-0.55891800	0.29212600
H	5.30067000	-1.98240300	-0.27359300

	1			2			3				
	A			A			A				
Frequencies --	29.3804			46.7658			58.9191				
Red. masses --	4.1555			4.3960			4.2275				
Frc consts --	0.0021			0.0057			0.0086				
IR Inten --	1.4294			1.0580			0.6984				
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
	1	5	0.00	0.02	0.13	0.00	0.12	-0.03	0.00	0.08	0.05

2	6	0.00	0.03	0.09	0.01	0.09	-0.03	0.00	0.07	0.11
3	6	0.06	-0.06	-0.10	-0.03	0.02	-0.02	-0.02	0.09	0.16
4	6	0.08	-0.09	-0.17	-0.01	-0.05	0.01	0.01	0.04	0.09
5	6	0.03	-0.02	-0.05	0.07	-0.06	0.03	0.05	-0.04	-0.05
6	6	-0.03	0.07	0.15	0.12	0.01	0.03	0.07	-0.04	-0.07
7	6	-0.04	0.10	0.22	0.09	0.08	0.00	0.04	0.02	0.01
8	1	0.09	-0.11	-0.21	-0.09	0.03	-0.04	-0.05	0.13	0.25
9	1	0.12	-0.16	-0.33	-0.05	-0.10	0.01	-0.01	0.05	0.12
10	1	-0.08	0.17	0.36	0.14	0.13	-0.01	0.05	0.01	-0.01
11	6	-0.05	0.02	0.05	-0.07	0.14	-0.19	-0.07	0.00	0.15
12	6	-0.06	0.02	-0.04	-0.10	0.06	-0.14	-0.09	-0.05	0.14
13	6	-0.03	0.00	-0.08	-0.08	-0.06	0.04	-0.05	-0.04	-0.01
14	6	0.00	-0.03	0.01	-0.02	-0.08	0.11	0.01	0.03	-0.17
15	6	0.01	-0.02	0.10	0.01	0.01	0.05	0.03	0.07	-0.16
16	7	-0.01	0.01	0.10	-0.01	0.10	-0.07	-0.01	0.05	0.02
17	1	-0.07	0.04	0.09	-0.08	0.23	-0.32	-0.09	-0.01	0.24
18	1	-0.09	0.03	-0.08	-0.14	0.09	-0.23	-0.13	-0.10	0.25
19	1	0.02	-0.05	0.00	0.01	-0.15	0.21	0.04	0.04	-0.31
20	1	0.04	-0.04	0.16	0.06	-0.01	0.10	0.07	0.12	-0.28
21	1	-0.06	0.13	0.25	0.18	0.00	0.05	0.10	-0.09	-0.16
22	7	0.05	-0.05	-0.12	0.10	-0.14	0.05	0.10	-0.11	-0.18
23	1	0.06	-0.08	-0.28	0.06	-0.18	0.05	0.06	-0.15	-0.16
24	1	-0.01	0.03	-0.06	0.15	-0.14	0.07	0.10	-0.20	-0.26
25	7	-0.04	0.00	-0.19	-0.10	-0.16	0.13	-0.07	-0.10	-0.01
26	1	0.00	-0.03	-0.22	-0.13	-0.26	0.24	-0.03	-0.04	-0.11
27	1	-0.05	0.00	-0.24	-0.19	-0.16	0.07	-0.10	-0.10	0.12

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	105.1394	151.9525	213.3461
Red. masses --	4.9829	5.0419	1.0829
Frc consts --	0.0325	0.0686	0.0290
IR Inten --	1.2058	1.8043	16.4751

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

1	5	0.00	-0.10	0.13	0.01	-0.02	-0.19	0.00	0.00	-0.01
2	6	-0.01	-0.08	0.17	-0.06	0.11	-0.02	0.00	0.00	-0.01
3	6	0.06	-0.04	0.10	-0.11	0.12	0.07	-0.01	0.00	0.00
4	6	0.05	0.00	0.01	-0.10	0.08	0.11	-0.01	0.00	0.01
5	6	-0.04	0.02	-0.01	-0.02	0.03	0.04	-0.01	0.00	0.00
6	6	-0.11	0.00	0.10	-0.01	0.12	0.13	-0.01	0.00	0.01
7	6	-0.09	-0.05	0.18	-0.03	0.16	0.09	-0.01	0.00	0.00
8	1	0.12	-0.06	0.10	-0.15	0.13	0.07	-0.01	0.00	0.00
9	1	0.10	0.02	-0.05	-0.13	0.05	0.13	-0.01	0.00	0.01
10	1	-0.14	-0.08	0.22	0.00	0.20	0.10	-0.01	0.00	0.00
11	6	0.04	0.04	-0.21	0.06	-0.13	-0.05	0.01	0.01	0.00
12	6	0.05	0.05	-0.15	0.10	-0.07	-0.02	0.00	0.01	-0.02
13	6	0.03	0.02	-0.01	0.05	-0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
14	6	0.01	0.05	-0.10	-0.03	-0.06	0.08	0.01	-0.01	0.02
15	6	0.01	0.05	-0.17	-0.05	-0.11	0.02	0.01	0.00	0.01
16	7	0.02	0.00	-0.10	-0.02	-0.12	-0.10	0.01	0.01	0.00
17	1	0.05	0.06	-0.27	0.09	-0.18	-0.07	0.01	0.02	-0.02
18	1	0.08	0.06	-0.18	0.15	-0.07	-0.01	0.01	0.03	-0.07
19	1	0.00	0.07	-0.12	-0.07	-0.04	0.17	0.01	-0.02	0.07
20	1	-0.01	0.06	-0.22	-0.11	-0.14	0.07	0.01	0.00	0.04
21	1	-0.18	0.01	0.10	0.02	0.13	0.16	-0.01	0.00	0.01
22	7	-0.04	0.05	-0.14	0.07	-0.15	-0.16	-0.01	-0.01	-0.01
23	1	0.00	0.07	-0.22	-0.01	-0.26	-0.25	-0.01	-0.01	-0.01
24	1	-0.14	0.06	-0.16	0.07	-0.23	-0.24	-0.01	-0.01	-0.01
25	7	0.04	-0.03	0.22	0.11	0.11	-0.01	-0.01	-0.05	-0.02
26	1	-0.05	-0.04	0.34	0.05	0.12	0.05	0.14	0.42	-0.54
27	1	0.00	-0.03	0.28	0.20	0.11	-0.12	0.06	-0.04	0.70

63 bome

0 1 -139.937378

B	-1.54345700	0.20317200	0.00000100
O	-0.34338100	-0.25204700	-0.00000100
C	1.04970600	0.08668900	0.00000100

H	1.50015900	-0.34434300	0.89237500
H	1.50021700	-0.34459200	-0.89222400
H	1.16572100	1.16931400	-0.00014900

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		34.3799			140.8552			892.1100		
Red. masses --		2.2114			6.0402			7.1977		
Frc consts --		0.0015			0.0706			3.3751		
IR Inten --		0.0300			11.9721			33.5018		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.20	0.23	0.35	0.00	0.38	-0.11	0.00
2	8	0.00	0.00	-0.22	-0.03	-0.43	0.00	0.23	0.17	0.00
3	6	0.00	0.00	0.08	-0.13	0.17	0.00	-0.55	-0.10	0.00
4	1	-0.26	0.39	0.40	0.04	0.35	0.00	-0.40	-0.08	-0.05
5	1	0.26	-0.39	0.40	0.04	0.35	0.00	-0.40	-0.08	0.05
6	1	0.00	0.00	-0.37	-0.55	0.21	0.00	-0.31	-0.12	0.00

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		1170.1065			1176.6440			1424.7169		
Red. masses --		1.2441			1.2456			1.5740		
Frc consts --		1.0036			1.0161			1.8824		
IR Inten --		0.3651			0.8377			167.9430		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.05	0.00
2	8	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.10	0.03	0.00
3	6	0.02	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.14	0.02	0.00
4	1	0.31	0.34	0.09	-0.64	-0.05	0.16	-0.50	-0.15	0.22
5	1	0.31	0.34	-0.09	0.64	0.05	0.16	-0.50	-0.15	-0.22
6	1	-0.73	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.32	-0.56	0.08	0.00

0 3 -139.831869

B	1.39235400	0.19746400	0.54506300
---	------------	------------	------------

O	0.34741800	-0.40364800	0.00171200
C	-1.00546000	0.13745700	0.01091300
H	-1.64508500	-0.58247800	0.52228600
H	-1.02143900	1.10180500	0.52292500
H	-1.32462900	0.24482300	-1.02615400

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		117.8065			427.5281			849.9906		
Red. masses --		1.5249			4.6838			8.0466		
Frc consts --		0.0125			0.5044			3.4253		
IR Inten --		1.4105			9.9419			24.2814		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.03	-0.07	0.12	-0.32	0.24	0.06	0.19	0.09	0.09
2	8	0.03	0.07	-0.12	0.05	-0.28	-0.14	0.35	-0.23	-0.05
3	6	-0.01	-0.02	0.03	0.17	0.10	0.09	-0.56	0.19	-0.01
4	1	0.18	0.19	0.55	0.01	0.30	0.18	-0.40	0.12	0.06
5	1	0.08	0.22	-0.40	0.64	0.06	0.17	-0.22	0.15	0.03
6	1	-0.30	-0.52	0.07	0.01	0.31	0.16	-0.37	0.19	-0.05

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		1142.5217			1159.9628			1334.4685		
Red. masses --		1.2391			1.3268			3.6399		
Frc consts --		0.9530			1.0518			3.8191		
IR Inten --		0.8489			4.5064			91.8582		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.00	0.07	0.02	0.03	0.30	0.17	0.15
2	8	-0.01	-0.03	0.05	-0.03	0.04	0.02	-0.21	-0.13	-0.11
3	6	0.02	0.06	-0.11	-0.03	-0.12	-0.07	0.11	0.00	0.02
4	1	0.60	-0.24	0.18	-0.32	0.30	0.17	-0.30	0.18	-0.19
5	1	-0.06	-0.14	0.26	0.70	-0.17	0.05	-0.66	0.06	-0.10
6	1	-0.65	0.09	0.10	-0.30	0.37	0.06	-0.37	0.00	0.15

0 1 -366.137361

B	1.15969600	0.00008500	0.50132600
O	2.18211800	-0.00031500	-0.38145500
C	3.54237300	0.00010200	0.06387700
H	3.58421300	0.00043200	1.15599100
H	4.03727600	-0.88961300	-0.33334900
H	4.03663100	0.89023700	-0.33339900
C	-2.48902400	0.67487000	-0.01682600
C	-2.48909000	-0.67478900	-0.01663100
C	-0.30062600	-0.00003500	0.03058900
N	-1.15694100	1.08121400	-0.02684900
H	-0.84259500	2.03257100	0.05687900
H	-3.30623800	1.37454300	-0.02420700
H	-3.30633100	-1.37442400	-0.02391200
N	-1.15699000	-1.08121300	-0.02689800
H	-0.84265800	-2.03254700	0.05718400

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		46.9785			90.3351			100.9431		
Red. masses --		3.0215			4.7514			1.1948		
Frc consts --		0.0039			0.0228			0.0072		
IR Inten --		7.5422			30.8183			0.2254		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.24	0.00	-0.03	0.00	-0.23	0.00	-0.06	0.00
2	8	0.00	-0.09	0.00	0.12	0.00	-0.04	0.00	0.02	0.00
3	6	0.00	-0.16	0.00	0.03	0.00	0.24	0.00	0.06	0.00
4	1	0.00	0.20	0.00	-0.19	0.00	0.25	0.00	0.61	0.00
5	1	-0.14	-0.37	0.30	0.11	0.00	0.34	-0.12	-0.22	0.48
6	1	0.14	-0.37	-0.30	0.11	0.00	0.34	0.12	-0.22	-0.48
7	6	-0.07	-0.08	0.03	-0.03	0.00	0.23	0.02	0.02	0.02
8	6	0.07	-0.08	-0.03	-0.03	0.00	0.23	-0.02	0.02	-0.02

C	3.50381200	-0.02442400	0.00019200
H	3.76167600	-0.60676500	0.89112700
H	3.76203300	-0.60824500	-0.88966700
H	4.07940800	0.90305800	-0.00045600
C	-2.26892700	0.91317100	-0.00002800
C	-2.59892300	-0.40028200	-0.00010200
C	-0.30929300	-0.28251500	0.00008500
N	-0.88426200	0.99133200	0.00023600
H	-0.33421200	1.83270100	-0.00034500
H	-2.90046700	1.78474900	-0.00012600
H	-3.56667300	-0.87053600	-0.00000600
N	-1.41818500	-1.12594000	0.00016800
H	-1.33831200	-2.12796000	-0.00043600

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	43.9662	82.6121	95.2798
Red. masses --	1.2998	2.4583	3.9181
Frc consts --	0.0015	0.0099	0.0210
IR Inten --	2.6815	13.4553	1.0887

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.11	0.00	-0.19	0.00
2	8	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.10	-0.14	-0.03	0.00
3	6	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	0.18	-0.07	0.25	0.00
4	1	0.00	0.48	0.41	-0.25	-0.30	0.06	0.05	0.31	0.00
5	1	0.00	-0.48	0.41	0.25	0.30	0.06	0.05	0.31	0.00
6	1	0.00	0.00	-0.41	0.00	0.00	0.66	-0.26	0.37	0.00
7	6	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.09	0.16	0.08	0.00
8	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.16	-0.01	0.12	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.12	0.00	-0.17	0.00
10	7	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.14	0.17	-0.10	0.00
11	1	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.07	0.30	-0.18	0.00
12	1	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	0.14	0.28	0.16	0.00

13	1	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.29	-0.07	0.25	0.00
14	7	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.02	-0.10	-0.04	0.00
15	1	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.13	-0.24	-0.05	0.00
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		128.1375			254.4083			283.1381		
Red. masses --		4.4748			3.0508			3.9456		
Frc consts --		0.0433			0.1163			0.1864		
IR Inten --		2.5611			24.5746			12.3078		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	0.32	0.03	0.11	0.00
2	8	0.00	0.00	0.29	0.00	0.00	-0.17	-0.12	0.28	0.00
3	6	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.02	-0.22	-0.17	0.00
4	1	0.30	0.21	-0.05	-0.10	-0.05	-0.02	-0.44	-0.27	0.00
5	1	-0.30	-0.21	-0.05	0.10	0.05	-0.02	-0.44	-0.27	0.00
6	1	0.00	0.00	-0.51	0.00	0.00	0.09	0.12	-0.38	0.00
7	6	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	0.07	0.12	-0.01	0.00
8	6	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	-0.02	0.06	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.00	0.10	0.03	-0.08	0.00
10	7	0.00	0.00	-0.26	0.00	0.00	-0.10	0.11	-0.06	0.00
11	1	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	0.87	0.17	-0.10	0.00
12	1	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	0.07	0.15	0.01	0.00
13	1	0.00	0.00	0.30	0.00	0.00	-0.16	0.04	0.05	0.00
14	7	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00	-0.13	0.03	-0.05	0.00
15	1	0.00	0.00	0.24	0.00	0.00	0.05	0.00	-0.06	0.00

65 bome-nhc(NH₂)

0 1 -421.492583

B	-1.60834700	-0.01333000	0.48439100
O	-2.63631700	-0.13413700	-0.38293700
C	-3.97747000	-0.32094400	0.08039500
H	-4.00332600	-0.33856400	1.17290200
H	-4.59227000	0.49908300	-0.29911200

H	-4.35472600	-1.26468600	-0.32143800
C	2.09223200	-0.19926700	-0.00174000
C	1.92012100	1.14227000	-0.01628500
C	-0.16833600	0.19072100	0.01094600
N	0.82339300	-0.77757100	-0.04335400
H	0.65836100	-1.73675200	0.21263200
H	2.64008400	1.94036800	-0.05549400
N	0.53521000	1.37225400	-0.05123900
H	0.10421700	2.26728900	0.09909100
N	3.21975600	-1.02483600	0.07359000
H	3.37078900	-1.57827000	-0.76406600
H	4.06135400	-0.51433300	0.30413900

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	45.2024	70.5913	91.8789
Red. masses --	3.3342	4.4369	1.1697
Frc consts --	0.0040	0.0130	0.0058
IR Inten --	6.6767	35.4736	0.7712

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	-0.23	-0.01	0.05	0.00	-0.19	0.00	-0.04	-0.01
2	8	-0.03	0.11	0.00	-0.10	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.00
3	6	-0.04	0.19	0.01	-0.01	-0.03	0.24	-0.01	0.06	0.01
4	1	0.01	-0.16	0.01	0.20	-0.10	0.24	-0.08	0.61	0.02
5	1	0.08	0.42	0.31	-0.08	0.00	0.42	-0.10	-0.22	-0.47
6	1	-0.23	0.39	-0.28	-0.09	0.00	0.25	0.13	-0.20	0.48
7	6	0.04	0.03	0.00	0.01	0.00	0.06	0.01	0.00	0.00
8	6	-0.07	0.01	-0.02	0.03	0.00	0.16	-0.02	0.00	0.03
9	6	0.00	-0.16	-0.01	0.01	0.02	-0.22	0.00	-0.04	-0.01
10	7	0.08	-0.08	0.02	0.01	0.00	-0.25	0.02	-0.02	-0.02
11	1	0.16	-0.07	0.11	-0.01	0.01	-0.23	0.04	-0.03	-0.05
12	1	-0.14	0.07	-0.03	0.04	-0.01	0.32	-0.03	0.02	0.05
13	7	-0.09	-0.11	-0.03	0.03	0.03	-0.10	-0.02	-0.03	0.02

14	1	-0.17	-0.12	-0.15	0.04	-0.01	0.15	-0.04	-0.04	0.06
15	7	0.11	0.13	0.04	-0.01	-0.02	0.18	0.03	0.03	-0.01
16	1	0.13	0.08	0.07	0.11	0.05	0.16	0.07	0.08	-0.04
17	1	0.07	0.21	-0.02	-0.04	-0.04	0.34	0.01	0.04	0.03
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		156.2906			185.2767			228.8882		
Red. masses --		2.2007			1.2765			4.7785		
Frc consts --		0.0317			0.0258			0.1475		
IR Inten --		2.9379			32.8967			21.1572		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.02	-0.11	0.00	0.01	0.01	-0.03	0.04	-0.03	0.29
2	8	-0.03	0.23	0.00	0.01	-0.10	-0.02	0.13	-0.03	0.18
3	6	0.02	-0.14	0.00	0.00	0.06	0.01	-0.03	0.04	-0.13
4	1	0.03	-0.13	0.00	0.01	0.11	0.01	-0.24	0.05	-0.14
5	1	-0.20	-0.32	-0.03	0.08	0.12	-0.01	0.17	0.07	-0.29
6	1	0.30	-0.26	0.03	-0.12	0.09	0.05	0.07	0.06	-0.22
7	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.02	-0.04	0.00	-0.15
8	6	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.05	-0.03	0.00	-0.06
9	6	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.03
10	7	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.04	0.01	-0.28
11	1	-0.01	0.06	0.19	0.00	0.01	0.02	-0.06	-0.01	-0.38
12	1	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.05	-0.03	0.01	0.10
13	7	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.04	-0.01	0.00
14	1	0.00	0.04	-0.23	0.00	-0.01	0.14	-0.04	-0.03	0.12
15	7	-0.02	-0.01	0.05	0.00	0.02	0.00	-0.05	0.02	0.20
16	1	-0.29	-0.39	0.25	-0.40	-0.45	0.24	0.05	-0.26	0.40
17	1	0.07	0.06	-0.43	0.12	0.12	-0.67	-0.08	0.08	0.15

0 3 -421.490908

B	-1.64648000	0.62379800	-0.01223500
O	-2.46414800	-0.48075100	-0.00937300
C	-3.87946900	-0.36250800	0.04307600

H	-4.19717300	0.14340000	0.96098100
H	-4.25814100	0.19853400	-0.81774700
H	-4.29774800	-1.37063200	0.02617800
C	1.96734700	-0.32515300	0.01446100
C	2.07586300	1.02789200	0.02871900
C	-0.16223500	0.52707900	-0.05230600
N	0.62011100	-0.63961300	-0.08639100
H	0.23914100	-1.53898500	0.16327200
H	2.95182900	1.65263600	0.01912500
N	0.77994000	1.54823700	-0.04177500
H	0.52662400	2.50309200	0.14801200
N	2.91355000	-1.35133300	0.10492500
H	2.93296100	-1.95577700	-0.71021000
H	3.84384500	-1.01015400	0.30552900

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		52.7477			78.7871			91.1029		
Red. masses --		1.5719			3.8188			1.8677		
Frc consts --		0.0026			0.0140			0.0091		
IR Inten --		4.6730			2.4768			8.2190		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.07	0.01	-0.13	0.02	0.01	-0.03	-0.06
2	8	0.00	0.00	-0.11	-0.14	-0.02	0.00	-0.02	0.00	-0.04
3	6	0.01	-0.01	0.14	-0.13	0.24	-0.04	-0.02	0.05	0.12
4	1	0.15	-0.46	0.44	-0.07	0.13	0.04	0.13	0.46	-0.05
5	1	-0.11	0.43	0.48	0.01	0.46	0.05	-0.13	-0.33	-0.07
6	1	-0.01	0.01	-0.29	-0.31	0.32	-0.23	-0.04	0.05	0.63
7	6	0.00	0.00	0.02	0.09	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.02
8	6	0.00	0.00	0.03	-0.03	0.03	-0.04	-0.01	0.00	0.12
9	6	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.16	0.04	0.00	-0.03	-0.10
10	7	0.00	0.00	-0.03	0.10	-0.10	0.05	0.03	-0.02	-0.14
11	1	-0.01	0.00	-0.04	0.20	-0.13	0.10	0.03	-0.03	-0.19

12	1	0.00	0.00	0.06	-0.08	0.10	-0.08	-0.02	0.02	0.23
13	7	0.00	0.00	-0.02	-0.07	-0.08	0.01	-0.02	-0.01	0.00
14	1	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.09	-0.09	-0.05	-0.05	0.17
15	7	-0.01	0.00	0.05	0.19	0.11	-0.02	0.02	0.02	0.04
16	1	0.02	0.00	0.05	0.25	0.12	-0.03	0.12	0.07	0.00
17	1	-0.01	0.00	0.08	0.15	0.20	-0.02	0.00	0.02	0.16
			4			5			6	
			A			A			A	
Frequencies --		134.1371			206.3329			239.9175		
Red. masses --		3.4805			1.0819			5.1502		
Frc consts --		0.0369			0.0271			0.1747		
IR Inten --		1.5788			35.0028			3.2232		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	-0.02	0.10	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.03	0.34
2	8	0.01	-0.01	0.26	0.00	-0.02	-0.01	-0.02	0.05	-0.14
3	6	0.00	0.02	-0.09	0.00	0.02	0.00	-0.02	-0.04	-0.01
4	1	-0.23	-0.27	-0.01	0.03	0.03	0.00	0.02	0.00	-0.02
5	1	0.24	0.31	-0.01	0.01	0.02	0.00	-0.13	-0.12	-0.02
6	1	-0.03	0.03	-0.53	-0.02	0.03	0.01	0.05	-0.07	0.09
7	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.21
8	6	-0.01	0.00	0.09	0.00	0.01	0.03	0.02	-0.02	-0.21
9	6	0.01	-0.01	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.10
10	7	0.01	-0.01	-0.23	0.01	-0.01	-0.04	-0.01	-0.01	-0.22
11	1	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.02	0.05	0.04	0.04	0.03
12	1	-0.01	0.00	0.22	0.00	0.01	0.03	0.01	-0.01	-0.13
13	7	-0.01	0.01	-0.10	-0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.13
14	1	-0.03	-0.07	0.27	-0.02	-0.02	0.10	0.05	0.08	-0.40
15	7	-0.01	0.00	0.08	0.00	0.03	0.03	0.01	0.03	0.22
16	1	0.10	0.03	0.06	-0.49	-0.40	0.33	0.21	-0.22	0.41
17	1	-0.04	0.00	0.23	0.13	0.08	-0.67	-0.05	0.10	0.36

B	-1.42313500	-0.48267800	0.59347200
O	-2.24593300	0.09956300	-0.30901400
C	-3.66535900	0.08062700	-0.13382700
H	-4.11246100	-0.42832700	-0.99035300
H	-3.93046600	-0.43749600	0.79007300
H	-4.02330100	1.11225300	-0.10323900
C	0.51653900	1.05818700	0.15262600
C	1.86410900	1.31406000	0.00798300
C	2.76264800	0.25651500	-0.15159900
C	2.24845400	-1.04640800	-0.15850700
C	0.90323100	-1.25702500	0.04280100
N	0.02869800	-0.22012100	0.20356100
H	3.82459700	0.43707900	-0.25657900
H	-0.22092500	1.84245600	0.25331200
H	2.20331200	2.34289100	-0.00304800
H	2.89651500	-1.90314600	-0.29513900
H	0.46725400	-2.24371700	0.12793500

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		51.4165			96.2100			106.3326		
Red. masses --		3.2677			2.3599			1.4397		
Frc consts --		0.0051			0.0129			0.0096		
IR Inten --		7.8965			8.4687			3.8959		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.01	-0.19	-0.11	0.01	0.05	-0.08	0.01	0.07	-0.01
2	8	0.01	0.08	0.05	-0.08	-0.01	-0.02	-0.04	-0.03	-0.02
3	6	0.02	0.17	0.09	-0.06	-0.04	0.15	-0.04	-0.08	0.04
4	1	-0.06	0.49	-0.06	-0.13	-0.43	0.41	-0.08	0.38	-0.21
5	1	0.00	-0.11	-0.07	0.08	0.33	0.39	0.00	-0.55	-0.21
6	1	0.11	0.19	0.44	-0.12	-0.05	-0.25	-0.03	-0.09	0.60
7	6	-0.09	-0.08	-0.14	0.03	0.02	-0.10	0.04	0.04	-0.04
8	6	-0.10	0.01	-0.04	0.05	-0.01	0.05	0.06	-0.01	0.00

9	6	-0.01	0.07	0.08	0.05	-0.02	0.15	0.03	-0.04	0.04
10	6	0.09	0.03	0.10	0.02	-0.01	0.05	-0.02	-0.02	0.03
11	6	0.09	-0.06	0.03	0.00	0.01	-0.10	-0.03	0.03	-0.01
12	7	0.00	-0.12	-0.09	0.00	0.02	-0.14	0.00	0.06	-0.03
13	1	-0.02	0.15	0.15	0.07	-0.04	0.29	0.04	-0.07	0.08
14	1	-0.17	-0.14	-0.25	0.04	0.03	-0.16	0.07	0.07	-0.07
15	1	-0.17	0.04	-0.07	0.07	-0.01	0.10	0.09	-0.02	0.00
16	1	0.16	0.08	0.19	0.02	-0.02	0.10	-0.04	-0.04	0.05
17	1	0.15	-0.08	0.06	-0.02	0.01	-0.16	-0.06	0.04	-0.01
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		175.1989			251.3227			314.4243		
Red. masses --		3.9888			4.3337			4.6411		
Frc consts --		0.0721			0.1613			0.2703		
IR Inten --		7.7291			19.1563			4.5305		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.01	-0.11	-0.07	0.00	0.07	0.33	0.11	0.07	-0.02
2	8	0.00	0.33	0.19	0.04	-0.08	0.20	0.23	0.07	-0.12
3	6	-0.02	-0.21	-0.08	0.02	0.04	-0.16	0.27	-0.08	0.11
4	1	0.33	-0.41	-0.15	0.22	0.11	-0.30	0.17	-0.13	0.19
5	1	0.00	-0.30	-0.13	-0.29	0.03	-0.25	0.52	-0.14	0.15
6	1	-0.43	-0.34	-0.19	0.09	0.07	-0.22	0.15	-0.13	0.21
7	6	0.01	0.01	-0.05	-0.04	-0.02	-0.17	-0.12	0.04	-0.07
8	6	0.03	-0.02	-0.02	-0.02	0.01	-0.03	-0.12	0.02	-0.01
9	6	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.17	-0.16	-0.03	0.12
10	6	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.01	-0.05	-0.14	-0.04	-0.04
11	6	-0.01	0.00	0.03	-0.03	0.01	-0.19	-0.13	-0.03	-0.05
12	7	0.01	0.02	-0.02	0.00	-0.02	-0.04	-0.02	0.02	0.06
13	1	0.01	-0.05	0.01	0.03	0.00	0.38	-0.14	-0.05	0.25
14	1	0.01	0.02	-0.12	-0.06	-0.03	-0.25	-0.17	0.00	-0.15
15	1	0.05	-0.02	-0.04	-0.03	0.01	-0.04	-0.08	0.00	-0.04
16	1	-0.02	-0.04	0.04	0.00	0.02	-0.09	-0.13	-0.02	-0.10
17	1	-0.04	0.02	0.10	-0.04	0.00	-0.34	-0.19	0.00	-0.07

03 -388.210382

B	1.36190900	-0.64574300	-0.00098600
O	2.32319100	0.30051700	-0.00321700
C	3.72006400	0.00051600	0.00196100
H	4.15647500	0.37532800	0.93009200
H	3.89264700	-1.07528800	-0.07551800
H	4.18525500	0.50863900	-0.84469300
C	-0.46381400	1.03418700	0.00030800
C	-1.79250100	1.34991900	0.00032800
C	-2.78590800	0.34794200	0.00025200
C	-2.34798400	-0.99791300	0.00019700
C	-1.02068400	-1.30793500	0.00010200
N	-0.02769400	-0.31082300	0.00012200
H	-3.83778900	0.59735500	0.00017000
H	0.32600400	1.76983400	0.00029700
H	-2.06749100	2.39856300	0.00035300
H	-3.06318000	-1.81192400	0.00020100
H	-0.64817900	-2.32245600	0.00002600

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		24.7534			79.1652			125.2621		
Red. masses --		1.0503			3.3879			3.6359		
Frc consts --		0.0004			0.0125			0.0336		
IR Inten --		0.1351			2.4230			1.4751		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.00	-0.16	0.00
2	8	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.11	-0.11	-0.04	-0.02
3	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.26	-0.05	0.28	0.01
4	1	0.12	0.51	-0.28	-0.22	0.14	0.31	-0.15	0.39	0.01
5	1	-0.01	-0.04	0.54	0.02	-0.01	0.47	0.21	0.32	0.02
6	1	-0.11	-0.46	-0.36	0.20	-0.13	0.29	-0.15	0.38	0.01

7	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.16	0.12	-0.12	0.01
8	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.03	0.16	0.01	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.20	0.06	0.11	-0.01
10	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.11	-0.06	0.07	0.00
11	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.09	-0.09	-0.06	0.01
12	7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.00	-0.16	0.01
13	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.36	0.09	0.20	-0.02
14	1	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.28	0.19	-0.19	0.02
15	1	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.05	0.26	0.04	0.01
16	1	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.18	-0.14	0.14	-0.01
17	1	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.16	-0.19	-0.10	0.01

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 128.1191 244.3050 292.8518

Red. masses -- 4.6440 5.3255 4.3676

Frc consts -- 0.0449 0.1873 0.2207

IR Inten -- 3.7735 0.9612 10.0797

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.49	0.00	0.11	0.00
2	8	-0.01	0.00	0.38	0.00	0.00	-0.16	-0.16	0.29	0.00
3	6	0.00	0.02	-0.13	0.00	0.00	-0.05	-0.24	-0.15	0.00
4	1	0.29	-0.14	-0.20	-0.03	0.01	-0.04	-0.11	-0.30	0.00
5	1	-0.01	0.04	-0.39	0.01	0.00	-0.03	-0.61	-0.21	0.01
6	1	-0.28	0.18	-0.19	0.03	-0.01	-0.04	-0.07	-0.32	-0.01
7	6	0.01	-0.01	-0.22	0.00	0.00	-0.14	0.11	-0.06	0.00
8	6	0.01	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.01	0.00
9	6	0.00	0.01	0.16	0.00	0.00	0.19	0.13	0.01	0.00
10	6	-0.01	0.00	0.07	0.00	0.00	-0.15	0.05	-0.02	0.00
11	6	-0.01	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.18	0.03	-0.08	0.00
12	7	0.00	-0.01	-0.14	0.00	0.00	0.15	0.01	-0.08	0.00
13	1	0.01	0.02	0.32	0.00	0.00	0.35	0.14	0.04	0.00
14	1	0.01	-0.01	-0.36	0.00	0.00	-0.33	0.16	-0.12	0.00
15	1	0.02	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.10	0.17	0.00	0.00

16	1	-0.01	0.01	0.14	0.00	0.00	-0.40	-0.01	0.03	0.00
17	1	-0.01	-0.01	-0.15	0.00	0.00	-0.44	0.02	-0.08	0.00

67 bnme2

0 1 -159.318037

B		0.00000000	0.00000000	1.64233400
N		0.00000000	0.00000000	0.26707600
C		0.00000000	1.24891300	-0.49587500
C		0.00000000	-1.24891300	-0.49587500
H		0.00000000	2.09744700	0.19075400
H		0.89110900	1.31098900	-1.12805200
H		-0.89110900	1.31098900	-1.12805200
H		0.00000000	-2.09744700	0.19075400
H		-0.89110900	-1.31098900	-1.12805200
H		0.89110900	-1.31098900	-1.12805200

		1		2		3
		A2		B1		B2
Frequencies --		214.1003		223.7735		280.3509
Red. masses --		1.0306		1.1631		5.2519
Frc consts --		0.0278		0.0343		0.2432
IR Inten --		0.0000		1.6883		25.0554

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	0.00	0.50	0.00
2	7	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.23	0.00
3	6	0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.20
4	6	-0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.20
5	1	-0.37	0.00	0.00	-0.43	0.00	0.00	0.00	-0.22	0.37
6	1	0.24	0.18	0.30	0.18	0.19	0.29	0.01	0.05	0.23
7	1	0.24	-0.18	-0.30	0.18	-0.19	-0.29	-0.01	0.05	0.23
8	1	0.37	0.00	0.00	-0.43	0.00	0.00	0.00	-0.22	-0.37
9	1	-0.24	-0.18	0.30	0.18	0.19	-0.29	0.01	0.05	-0.23
10	1	-0.24	0.18	-0.30	0.18	-0.19	0.29	-0.01	0.05	-0.23

		4			5			6		
		B1			A1			A1		
Frequencies --		286.1457			353.3067			819.0357		
Red. masses --		3.2235			2.3450			4.4920		
Frc consts --		0.1555			0.1725			1.7754		
IR Inten --		0.1472			1.6711			4.6605		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.16	0.00	0.00	0.28
2	7	-0.37	0.00	0.00	0.00	0.00	0.14	0.00	0.00	0.12
3	6	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.10	0.00	0.30	-0.15
4	6	0.08	0.00	0.00	0.00	0.16	-0.10	0.00	-0.30	-0.15
5	1	0.37	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.36	0.00	0.38	-0.26
6	1	0.15	-0.34	0.05	-0.01	-0.37	-0.14	0.00	0.20	-0.15
7	1	0.15	0.34	-0.05	0.01	-0.37	-0.14	0.00	0.20	-0.15
8	1	0.37	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.36	0.00	-0.38	-0.26
9	1	0.15	-0.34	-0.05	0.01	0.37	-0.14	0.00	-0.20	-0.15
10	1	0.15	0.34	0.05	-0.01	0.37	-0.14	0.00	-0.20	-0.15

0 3 -159.245543

B	0.00000000	0.00000000	1.67671200
N	0.00000000	0.00000000	0.30693900
C	0.00000000	1.22354500	-0.51464900
C	0.00000000	-1.22354500	-0.51464900
H	0.00000000	2.09583900	0.13552200
H	0.88791300	1.25243800	-1.15684800
H	-0.88791300	1.25243800	-1.15684800
H	0.00000000	-2.09583900	0.13552200
H	-0.88791300	-1.25243800	-1.15684800
H	0.88791300	-1.25243800	-1.15684800

		1		2		3	
		A2		B1		B1	
Frequencies --		169.3882		192.4961		357.1839	

Red. masses --	1.0310	1.1797	2.9584
Frc consts --	0.0174	0.0258	0.2224
IR Inten --	0.0000	0.0569	5.9455

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	0.16	0.00	0.00
2	7	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.35	0.00	0.00
3	6	0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00
4	6	-0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00
5	1	-0.36	0.00	0.00	-0.41	0.00	0.00	0.39	0.00	0.00
6	1	0.24	0.18	0.30	0.19	0.19	0.30	0.12	-0.34	0.05
7	1	0.24	-0.18	-0.30	0.19	-0.19	-0.30	0.12	0.34	-0.05
8	1	0.36	0.00	0.00	-0.41	0.00	0.00	0.39	0.00	0.00
9	1	-0.24	-0.18	0.30	0.19	0.19	-0.30	0.12	-0.34	-0.05
10	1	-0.24	0.18	-0.30	0.19	-0.19	0.30	0.12	0.34	0.05

4	5	6
A1	B2	A1

Frequencies --	408.9729	470.3760	829.9398
Red. masses --	2.3110	4.8112	4.5615
Frc consts --	0.2277	0.6272	1.8512
IR Inten --	0.3253	0.3269	3.0162

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.14	0.00	0.47	0.00	0.00	0.00	0.28
2	7	0.00	0.00	0.14	0.00	-0.19	0.00	0.00	0.00	0.16
3	6	0.00	-0.17	-0.10	0.00	-0.09	0.20	0.00	0.28	-0.17
4	6	0.00	0.17	-0.10	0.00	-0.09	-0.20	0.00	-0.28	-0.17
5	1	0.00	0.02	-0.36	0.00	-0.24	0.40	0.00	0.38	-0.29
6	1	-0.01	-0.38	-0.12	0.01	0.07	0.21	0.00	0.17	-0.16
7	1	0.01	-0.38	-0.12	-0.01	0.07	0.21	0.00	0.17	-0.16
8	1	0.00	-0.02	-0.36	0.00	-0.24	-0.40	0.00	-0.38	-0.29
9	1	0.01	0.38	-0.12	0.01	0.07	-0.21	0.00	-0.17	-0.16
10	1	-0.01	0.38	-0.12	-0.01	0.07	-0.21	0.00	-0.17	-0.16

0 1 -215.866539

B	-0.64564200	-0.98594300	-0.00011300
N	0.45357000	-0.10344600	-0.00008400
C	1.79005100	-0.69836500	0.00004500
C	0.51764900	1.35645800	0.00000100
H	1.68826000	-1.78235200	-0.00003300
H	2.35440700	-0.38903500	-0.88912100
H	2.35418900	-0.38914400	0.88938700
H	-0.47129600	1.81970400	-0.00025700
H	1.05101500	1.72251300	0.88521900
H	1.05149500	1.72259000	-0.88489500
N	-2.07461200	-0.13240100	0.00001500
H	-2.13822500	0.90783500	-0.00108600
H	-2.58084500	-0.49090300	-0.80955500
H	-2.57970300	-0.48911800	0.81111800

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	66.8324	127.2108	183.7544
Red. masses --	1.0432	1.3747	1.3923
Frc consts --	0.0027	0.0131	0.0277
IR Inten --	1.7179	17.6897	13.3077

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	-0.14
2	7	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.02
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.10
4	6	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.06
5	1	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.20
6	1	0.03	0.03	0.03	-0.10	-0.02	-0.13	0.19	0.23	0.30
7	1	-0.03	-0.03	0.03	0.10	0.02	-0.13	-0.19	-0.23	0.30
8	1	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.56	0.00	0.00	0.34
9	1	-0.07	-0.03	0.09	0.42	-0.03	-0.21	0.34	0.00	-0.26
10	1	0.07	0.03	0.09	-0.42	0.03	-0.21	-0.34	0.00	-0.27

11	7	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.06
12	1	0.00	0.00	-0.52	0.00	0.00	-0.28	0.00	0.00	0.14
13	1	-0.25	-0.41	0.34	0.09	-0.14	-0.09	-0.13	0.06	0.11
14	1	0.25	0.41	0.34	-0.09	0.14	-0.09	0.13	-0.06	0.11

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	227.5859	296.7759	324.2536
Red. masses --	1.3696	2.9763	2.6230
Frc consts --	0.0418	0.1544	0.1625
IR Inten --	14.4730	12.2425	0.0053

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.17	0.02	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.10
2	7	0.00	0.00	-0.06	0.01	0.14	0.00	0.00	0.00	0.33
3	6	0.00	0.00	-0.03	-0.09	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.08
4	6	0.00	0.00	-0.01	0.19	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.07
5	1	0.00	0.00	-0.55	-0.32	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.46
6	1	0.19	0.42	0.24	-0.03	-0.23	0.00	-0.18	0.32	-0.09
7	1	-0.19	-0.42	0.24	-0.03	-0.23	0.00	0.18	-0.32	-0.09
8	1	0.00	0.00	-0.13	0.21	0.20	0.00	0.00	0.00	-0.37
9	1	-0.11	-0.03	0.08	0.23	0.08	0.00	-0.12	0.30	-0.12
10	1	0.11	0.03	0.08	0.23	0.08	0.00	0.12	-0.30	-0.12
11	7	0.00	0.00	-0.02	-0.11	-0.20	0.00	0.00	0.00	-0.03
12	1	0.00	0.00	-0.09	-0.37	-0.20	0.00	0.00	0.00	-0.03
13	1	0.14	-0.05	-0.08	-0.01	-0.34	0.00	-0.07	-0.01	0.02
14	1	-0.14	0.05	-0.08	-0.01	-0.34	0.00	0.07	0.01	0.02

0 3 -215.817100

B	-0.82745300	-0.00025600	-0.70739400
N	0.44403300	-0.00001300	-0.03680100
C	1.25822800	-1.20978400	0.07525700
C	1.25790700	1.20994100	0.07517300
H	0.62438600	-2.09230100	-0.01431100
H	2.02440900	-1.26224800	-0.71475500

H	1.77984600	-1.24590300	1.04234100
H	0.62382000	2.09234500	-0.01387600
H	1.77990200	1.24599400	1.04206100
H	2.02375300	1.26284100	-0.71513800
N	-2.19397100	-0.00003900	0.16938200
H	-2.28998300	0.82516200	0.77428700
H	-2.98704200	-0.00112400	-0.47034200
H	-2.28907400	-0.82405800	0.77605700

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		72.2951			121.4246			128.1287		
Red. masses --		2.3484			1.1301			1.4564		
Frc consts --		0.0072			0.0098			0.0141		
IR Inten --		12.7264			1.6692			10.6786		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.19	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.02	0.00	0.05
2	7	0.00	0.09	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.02	0.00	0.15
3	6	-0.13	0.00	0.07	0.05	0.01	0.01	0.02	0.00	-0.03
4	6	0.13	0.00	-0.07	-0.05	0.01	-0.01	0.02	0.00	-0.03
5	1	-0.22	0.06	0.10	0.08	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.29
6	1	-0.12	-0.12	0.10	0.06	0.03	0.02	-0.27	-0.08	-0.31
7	1	-0.16	-0.01	0.09	0.04	0.03	0.02	0.37	0.11	-0.22
8	1	0.22	0.06	-0.10	-0.08	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	0.29
9	1	0.16	-0.01	-0.09	-0.04	0.03	-0.02	0.37	-0.11	-0.22
10	1	0.12	-0.12	-0.10	-0.06	0.03	-0.02	-0.27	0.08	-0.31
11	7	0.00	-0.17	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.03	0.00	-0.07
12	1	0.00	-0.42	0.35	0.35	-0.18	0.35	-0.09	0.00	-0.08
13	1	0.00	0.08	0.00	0.00	0.64	0.00	0.02	0.00	-0.14
14	1	0.00	-0.42	-0.35	-0.35	-0.18	-0.35	-0.09	0.00	-0.08
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		189.9658			232.2049			312.9296		

Red. masses --	1.0312	1.9355	2.4362
Frc consts --	0.0219	0.0615	0.1406
IR Inten --	0.0203	13.3273	4.8473

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.16	0.04	0.00	-0.07
2	7	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.07	-0.10	0.00	0.24
3	6	0.00	0.00	0.03	0.08	0.02	-0.06	-0.06	0.00	-0.06
4	6	0.00	0.00	-0.03	0.08	-0.02	-0.06	-0.06	0.00	-0.06
5	1	0.05	0.00	-0.37	0.16	0.00	-0.38	-0.03	0.01	-0.40
6	1	0.27	0.19	0.28	0.21	0.28	0.05	-0.01	0.28	-0.03
7	1	-0.32	-0.19	0.20	-0.07	-0.18	0.02	-0.13	-0.30	-0.03
8	1	-0.05	0.00	0.37	0.16	0.00	-0.38	-0.03	-0.01	-0.40
9	1	0.32	-0.19	-0.20	-0.07	0.18	0.02	-0.13	0.30	-0.03
10	1	-0.27	0.19	-0.28	0.21	-0.28	0.05	-0.01	-0.28	-0.03
11	7	0.00	0.01	0.00	-0.16	0.00	-0.03	0.16	0.00	-0.03
12	1	-0.01	0.02	-0.02	-0.32	0.01	-0.06	0.30	-0.01	0.00
13	1	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.23	0.03	0.00	0.13
14	1	0.01	0.02	0.02	-0.32	-0.01	-0.06	0.30	0.01	0.00

69 bnme2-nhc

0 1 -385.544547

B	0.74666100	0.00197500	-0.64792600
N	2.00493300	0.00025500	-0.08074600
C	2.27059000	-0.00424300	1.36498600
C	3.23717800	0.00274300	-0.87206900
H	1.32796100	-0.00627800	1.90865900
H	2.85126300	-0.89027700	1.65017900
H	2.85073800	0.88029000	1.65583000
H	2.98185400	0.00594400	-1.92939400
H	3.84283000	0.88937300	-0.64432400
H	3.84291500	-0.88520600	-0.64973500
C	-2.83214500	0.67217800	-0.00315500
C	-2.83215900	-0.67214700	-0.00667500

C	-0.63762400	0.00041600	-0.14474500
N	-1.49633700	1.09945700	0.02258700
H	-1.22315400	2.01399600	-0.29232900
H	-3.65298900	1.36603600	0.05487800
H	-3.65296000	-1.36633300	0.04783100
N	-1.49626100	-1.09953700	0.01688500
H	-1.22314600	-2.01233500	-0.30309800

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		68.0437			77.6910			113.0314		
Red. masses --		4.0868			3.5018			2.8435		
Frc consts --		0.0111			0.0125			0.0214		
IR Inten --		38.7868			4.4489			0.6397		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.03	0.00	0.24	0.00	-0.22	0.00	0.00	0.07	0.00
2	7	0.05	0.00	0.05	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00
3	6	0.26	0.00	0.01	0.00	0.17	0.00	0.00	0.19	0.00
4	6	-0.07	0.00	-0.14	0.00	0.11	0.00	0.00	-0.23	0.00
5	1	0.34	0.00	0.15	0.00	0.05	0.00	0.00	0.33	0.00
6	1	0.30	0.00	-0.08	0.16	0.30	0.09	-0.06	0.19	0.13
7	1	0.30	0.00	-0.08	-0.15	0.30	-0.09	0.06	0.19	-0.13
8	1	-0.23	0.00	-0.10	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.31	0.00
9	1	-0.04	0.00	-0.23	-0.15	0.23	-0.09	0.13	-0.29	-0.09
10	1	-0.04	0.00	-0.23	0.15	0.23	0.09	-0.13	-0.30	0.09
11	6	-0.05	0.00	-0.20	0.08	0.10	0.05	-0.03	-0.04	0.09
12	6	-0.05	0.00	-0.20	-0.08	0.10	-0.05	0.03	-0.04	-0.09
13	6	-0.03	0.00	0.15	0.00	-0.17	0.00	0.00	0.06	0.00
14	7	-0.05	0.01	0.08	0.14	-0.08	0.09	-0.04	0.00	0.14
15	1	-0.03	-0.02	0.00	0.25	-0.08	0.19	-0.07	0.07	0.32
16	1	-0.07	-0.01	-0.33	0.17	0.19	0.10	-0.05	-0.08	0.18
17	1	-0.06	0.01	-0.33	-0.17	0.19	-0.10	0.05	-0.08	-0.18
18	7	-0.05	-0.01	0.08	-0.14	-0.08	-0.09	0.04	0.00	-0.14

19	1	-0.03	0.02	0.00	-0.25	-0.07	-0.19	0.07	0.07	-0.31
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		180.5008			189.7513			206.8856		
Red. masses --		1.0777			1.1351			4.6105		
Frc consts --		0.0207			0.0241			0.1163		
IR Inten --		0.0044			0.0088			0.1696		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.04	0.00	0.15
2	7	0.00	0.05	0.00	0.00	0.07	0.00	0.06	0.00	0.11
3	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.00	0.24	0.00	0.08
4	6	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
5	1	0.00	0.54	0.00	0.00	0.04	0.00	0.31	0.00	0.21
6	1	-0.49	-0.31	0.06	-0.02	0.01	-0.02	0.28	0.00	0.00
7	1	0.49	-0.31	-0.06	0.02	0.01	0.02	0.28	0.00	0.00
8	1	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.53	0.00	-0.08	0.00	0.03
9	1	-0.02	0.05	-0.06	0.30	-0.32	0.39	0.02	0.00	-0.04
10	1	0.02	0.05	0.06	-0.30	-0.32	-0.39	0.02	0.00	-0.04
11	6	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.07	0.00	0.15
12	6	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.07	0.00	0.15
13	6	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.04	0.00	-0.06	0.00	-0.19
14	7	0.01	-0.02	0.00	0.02	-0.02	-0.01	-0.08	0.01	-0.22
15	1	0.03	-0.02	0.01	0.04	-0.03	-0.01	-0.14	0.02	-0.23
16	1	0.02	0.02	0.00	0.03	0.03	-0.01	-0.06	0.00	0.34
17	1	-0.02	0.02	0.00	-0.03	0.03	0.01	-0.06	0.00	0.34
18	7	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	-0.02	0.01	-0.08	-0.01	-0.22
19	1	-0.03	-0.02	-0.01	-0.04	-0.03	0.01	-0.14	-0.02	-0.23

0 3 -385.526247

B	-0.76445700	-0.77657700	-0.04630800
N	-2.01357600	-0.10962500	-0.03756900
C	-3.25952100	-0.82112900	0.19804400
C	-2.18791200	1.32573300	-0.20603300

H	-3.06106200	-1.88957900	0.28081500
H	-3.74539200	-0.48699100	1.12680300
H	-3.96973000	-0.66070300	-0.62591500
H	-1.27187600	1.78150800	-0.58413500
H	-2.98016200	1.53623400	-0.93696200
H	-2.46971000	1.82280000	0.73521000
C	2.95126100	-0.44737300	-0.00944200
C	2.62970800	0.85668300	0.14284900
C	0.65285700	-0.32271600	-0.03192100
N	1.77325800	-1.15881500	-0.14560900
H	1.68735500	-2.15941900	-0.19746900
H	3.91842800	-0.91699000	-0.06440300
H	3.26810300	1.71765700	0.24505700
N	1.23930000	0.96225200	0.07147100
H	0.73509800	1.73449900	0.47350500

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		48.2142			75.4161			101.5810		
Red. masses --		2.7204			2.0486			3.5136		
Frc consts --		0.0037			0.0069			0.0214		
IR Inten --		0.3405			3.7835			4.8705		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.04	0.12	-0.01	-0.13	0.08
2	7	0.02	0.00	0.06	-0.01	0.02	0.11	0.03	-0.04	-0.04
3	6	0.00	0.05	0.13	-0.02	-0.04	-0.14	-0.05	0.10	-0.10
4	6	0.03	-0.03	-0.22	-0.07	0.00	-0.01	0.21	0.00	0.03
5	1	-0.01	0.07	0.34	0.03	-0.02	0.03	-0.18	0.07	-0.19
6	1	-0.03	0.23	0.05	-0.28	0.03	-0.31	-0.02	0.08	-0.08
7	1	0.04	-0.10	0.08	0.18	-0.18	-0.35	-0.03	0.25	-0.10
8	1	0.08	-0.09	-0.17	0.03	0.07	0.31	0.20	-0.13	-0.14
9	1	0.13	-0.16	-0.37	0.17	-0.09	-0.30	0.10	0.12	0.19
10	1	-0.11	0.13	-0.35	-0.45	0.00	-0.12	0.46	0.02	0.09

11	6	0.00	0.03	-0.08	0.01	-0.02	-0.10	0.00	0.10	-0.14
12	6	-0.03	0.00	0.11	0.05	-0.02	-0.08	-0.10	0.08	-0.13
13	6	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.03	0.09	-0.02	-0.10	0.14
14	7	0.01	0.02	-0.14	-0.02	0.00	0.03	0.04	-0.01	0.10
15	1	0.03	0.02	-0.30	-0.04	0.00	-0.04	0.12	-0.01	-0.09
16	1	0.01	0.06	-0.18	-0.01	-0.05	-0.19	0.03	0.18	-0.27
17	1	-0.04	0.00	0.21	0.08	-0.03	-0.14	-0.16	0.13	-0.22
18	7	-0.03	-0.02	0.17	0.05	0.01	0.05	-0.11	-0.05	0.09
19	1	-0.04	-0.11	0.33	0.11	0.01	0.12	-0.13	-0.08	0.14
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		137.7396			189.5976			220.1646		
Red. masses --		2.7608			1.0822			2.1594		
Frc consts --		0.0309			0.0229			0.0617		
IR Inten --		4.9158			0.8369			2.9772		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.08	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.20
2	7	0.05	0.00	0.17	0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.03	0.09
3	6	-0.03	0.06	-0.05	0.01	0.03	0.03	-0.04	-0.03	-0.06
4	6	0.11	0.00	0.07	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.04	-0.07
5	1	-0.06	0.08	0.28	-0.06	-0.01	-0.33	-0.10	-0.08	-0.52
6	1	-0.30	0.30	-0.29	0.20	-0.21	0.22	0.05	-0.39	0.11
7	1	0.22	-0.15	-0.31	-0.13	0.33	0.21	-0.08	0.36	0.06
8	1	0.18	-0.02	0.22	0.13	0.08	0.41	0.04	-0.18	-0.29
9	1	0.25	-0.01	-0.09	0.29	0.01	-0.32	-0.04	-0.09	0.04
10	1	-0.06	0.03	0.00	-0.42	-0.08	-0.09	0.27	0.13	-0.10
11	6	-0.01	0.04	0.12	0.00	0.02	0.01	-0.02	-0.02	0.02
12	6	-0.08	0.03	0.06	-0.02	0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.05
13	6	0.00	-0.06	-0.13	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	0.06	0.01
14	7	0.04	-0.01	-0.10	0.02	-0.01	0.01	-0.04	0.03	-0.13
15	1	0.09	-0.03	0.20	0.04	-0.01	0.03	-0.09	0.02	0.20
16	1	0.02	0.09	0.23	0.01	0.04	0.02	-0.04	-0.06	0.04
17	1	-0.13	0.06	0.11	-0.04	0.03	-0.02	0.06	-0.05	0.07

18	7	-0.08	-0.02	-0.15	-0.02	-0.01	-0.02	0.03	0.06	-0.05
19	1	-0.14	-0.08	-0.10	-0.03	-0.05	0.04	0.06	0.03	0.05

70 bnme₂-nhc(Me)₂

0 1 -464.132902

B	-0.91254900	-0.00024100	-0.56315300
N	-2.19421300	-0.00021200	-0.04913800
C	-2.52528400	-0.00028600	1.38236200
C	-3.38922500	-0.00014200	-0.89574800
H	-1.60824200	-0.00013400	1.96807700
H	-3.11855900	0.88504600	1.64402400
H	-3.11825800	-0.88582000	1.64401800
H	-3.08630600	-0.00012700	-1.94034500
H	-4.00423400	-0.88746500	-0.69822000
H	-4.00415500	0.88722800	-0.69818100
C	2.63795600	-0.67417000	0.06324100
C	2.63758700	0.67501900	0.06326200
C	0.46409000	-0.00014700	-0.00438400
N	1.31099200	-1.10553400	0.11362200
H	3.46041000	-1.36781600	0.10749800
H	3.45973500	1.36903400	0.10746700
N	1.31042200	1.10573700	0.11374100
C	0.85429900	-2.43766100	-0.20570400
H	0.38335600	-2.44191800	-1.20163400
H	0.11725600	-2.78232000	0.52386900
C	0.85315200	2.43763200	-0.20568700
H	0.11578800	2.78189600	0.52375700
H	0.38235600	2.44176100	-1.20169200
H	1.69810100	3.12661900	-0.19715000
H	1.69963300	-3.12617800	-0.19735500

1

2

3

A

A

A

Frequencies --	54.0262	71.0583	88.6513
Red. masses --	2.9680	3.9679	2.5226
Frc consts --	0.0051	0.0118	0.0117
IR Inten --	2.2573	23.4078	0.5964

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.14	0.00	-0.02	0.00	-0.23	0.00	0.00	0.00
2	7	0.00	0.03	0.00	0.04	0.00	-0.05	0.00	0.02	0.00
3	6	0.00	0.22	0.00	0.25	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.00
4	6	0.00	0.09	0.00	-0.08	0.00	0.13	0.00	0.26	0.00
5	1	0.00	0.16	0.00	0.33	0.00	-0.13	0.00	-0.34	0.00
6	1	0.12	0.33	-0.09	0.29	0.00	0.09	0.05	-0.20	0.14
7	1	-0.12	0.33	0.09	0.29	0.00	0.09	-0.05	-0.20	-0.14
8	1	0.00	-0.08	0.00	-0.24	0.00	0.08	0.00	0.38	0.00
9	1	-0.12	0.20	0.11	-0.05	0.00	0.22	-0.10	0.29	-0.13
10	1	0.12	0.20	-0.11	-0.05	0.00	0.22	0.10	0.29	0.13
11	6	0.04	0.04	-0.01	-0.04	0.00	0.20	0.02	0.03	0.01
12	6	-0.04	0.04	0.01	-0.04	0.00	0.20	-0.02	0.03	-0.01
13	6	0.00	-0.10	0.00	-0.03	0.00	-0.16	0.00	-0.04	0.00
14	7	0.07	-0.05	-0.02	-0.05	0.01	-0.08	0.03	-0.01	0.02
15	1	0.09	0.09	-0.01	-0.05	0.00	0.33	0.04	0.05	0.02
16	1	-0.09	0.09	0.01	-0.05	0.00	0.33	-0.04	0.05	-0.02
17	7	-0.07	-0.05	0.02	-0.05	-0.01	-0.08	-0.03	-0.01	-0.02
18	6	0.16	-0.07	-0.06	-0.01	-0.02	-0.02	0.07	-0.04	0.09
19	1	0.07	-0.05	-0.02	-0.07	-0.04	0.01	0.17	-0.15	0.05
20	1	0.25	-0.18	-0.02	0.04	-0.04	0.03	0.00	0.03	0.05
21	6	-0.16	-0.07	0.06	-0.01	0.02	-0.02	-0.07	-0.04	-0.09
22	1	-0.25	-0.18	0.02	0.04	0.04	0.03	0.00	0.03	-0.05
23	1	-0.07	-0.05	0.02	-0.07	0.04	0.01	-0.17	-0.15	-0.05
24	1	-0.22	0.00	0.18	0.02	-0.02	-0.06	-0.08	-0.03	-0.25
25	1	0.22	0.00	-0.18	0.02	0.02	-0.06	0.08	-0.03	0.25

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	105.7641	128.6786	147.2813
----------------	----------	----------	----------

Red. masses --	2.3307	1.1467	1.1384
Frc consts --	0.0154	0.0112	0.0145
IR Inten --	7.2558	0.4687	1.8928

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03
2	7	-0.01	0.00	0.04	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.02
3	6	-0.03	0.00	0.04	0.00	-0.04	0.00	-0.05	0.00	0.01
4	6	0.00	0.00	0.03	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.01
5	1	-0.03	0.00	0.05	0.00	-0.01	0.00	-0.06	0.00	0.03
6	1	-0.03	0.00	0.03	-0.04	-0.07	0.02	-0.05	0.00	-0.01
7	1	-0.03	0.00	0.03	0.04	-0.07	-0.02	-0.05	0.00	-0.01
8	1	0.01	0.00	0.03	0.00	0.06	0.00	0.04	0.00	0.00
9	1	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.03	0.01	0.00	-0.03
10	1	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.03	0.01	0.00	-0.03
11	6	-0.01	0.00	0.08	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.04
12	6	-0.01	0.00	0.08	0.00	0.01	0.02	0.01	0.00	0.04
13	6	-0.01	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
14	7	-0.01	-0.01	0.05	0.00	0.01	-0.04	0.01	0.00	-0.01
15	1	-0.01	0.00	0.11	0.00	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.05
16	1	-0.01	0.00	0.11	0.00	0.01	0.03	0.01	0.00	0.05
17	7	-0.01	0.01	0.05	0.00	0.01	0.04	0.01	0.00	-0.01
18	6	0.04	0.03	-0.21	-0.02	0.00	0.05	0.01	0.01	-0.05
19	1	0.29	0.14	-0.33	-0.38	0.05	0.22	-0.32	0.14	0.11
20	1	-0.16	-0.02	-0.43	0.27	-0.12	0.29	0.28	-0.18	0.14
21	6	0.04	-0.03	-0.21	0.02	0.00	-0.05	0.01	-0.01	-0.05
22	1	-0.16	0.02	-0.43	-0.27	-0.12	-0.29	0.28	0.18	0.14
23	1	0.29	-0.14	-0.33	0.38	0.05	-0.22	-0.32	-0.14	0.11
24	1	0.01	-0.01	-0.05	-0.03	0.06	0.33	0.07	-0.08	-0.46
25	1	0.01	0.01	-0.05	0.03	0.06	-0.33	0.07	0.08	-0.46

0 3 -464.105330

B	0.88351800	0.79862600	-0.17629800
N	2.19205200	0.24527100	-0.03378200

C	2.53704400	-0.67948300	1.03901200
C	3.35112300	0.94932000	-0.56264700
H	1.63861800	-1.12040400	1.47138000
H	3.18683900	-1.48877300	0.67729200
H	3.07547600	-0.16339000	1.84923200
H	3.03985800	1.63692800	-1.34890600
H	3.86723700	1.53071000	0.21850900
H	4.07626200	0.24243400	-0.98708700
C	-2.74477400	0.05576300	0.16585600
C	-2.27542800	-1.21387600	0.12682300
C	-0.48060600	0.19028000	-0.07601300
N	-1.67271900	0.91479700	0.04866400
H	-3.75140100	0.41612500	0.29660600
H	-2.80620200	-2.14857300	0.19945500
N	-0.89124700	-1.16014100	-0.00146900
C	-1.74673900	2.36005200	0.02759400
H	-1.61745500	2.75107200	-0.98654000
H	-0.94885000	2.77129600	0.65181500
C	-0.14239600	-2.24682500	-0.61341800
H	0.92260100	-2.09585700	-0.46000400
H	-0.33102100	-2.29494400	-1.69375800
H	-0.43744800	-3.19401200	-0.15716000
H	-2.71805000	2.67338200	0.41351700

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		38.7747			63.7230			75.3058		
Red. masses --		2.2371			2.0305			1.5630		
Frc consts --		0.0020			0.0049			0.0052		
IR Inten --		4.8603			0.8274			0.4822		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.03	-0.08	0.00	-0.03	-0.02
2	7	-0.02	-0.08	-0.05	-0.02	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.04

3	6	-0.04	0.13	0.14	-0.13	-0.03	0.00	0.04	0.00	-0.04
4	6	-0.01	-0.13	-0.10	0.04	-0.02	0.10	-0.01	0.10	0.05
5	1	-0.04	0.07	0.08	-0.17	-0.06	-0.11	0.06	-0.11	-0.11
6	1	0.11	0.17	0.35	-0.08	-0.02	0.05	0.14	0.08	-0.02
7	1	-0.22	0.32	0.15	-0.22	-0.05	0.07	-0.07	0.03	0.01
8	1	0.03	-0.35	-0.31	0.13	-0.01	0.07	-0.01	0.06	0.01
9	1	-0.13	0.11	-0.19	-0.02	-0.04	0.15	-0.13	0.16	0.08
10	1	0.08	-0.19	0.16	0.07	-0.03	0.16	0.09	0.16	0.11
11	6	0.00	-0.01	0.00	0.03	-0.02	0.11	-0.01	0.03	-0.02
12	6	0.01	0.00	-0.06	0.06	-0.01	0.12	-0.04	0.01	0.00
13	6	0.00	0.02	-0.02	0.01	0.03	-0.07	0.00	-0.03	-0.04
14	7	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.06
15	1	0.00	-0.02	0.02	0.03	-0.04	0.18	0.00	0.05	-0.03
16	1	0.02	-0.01	-0.11	0.09	-0.02	0.20	-0.06	0.03	0.01
17	7	0.01	0.02	-0.08	0.05	0.02	0.00	-0.04	-0.02	-0.02
18	6	0.00	0.01	0.13	-0.04	0.00	-0.06	0.07	0.00	0.07
19	1	0.02	0.08	0.16	-0.12	-0.03	-0.08	0.40	0.10	0.15
20	1	-0.02	-0.04	0.18	0.00	0.04	-0.13	-0.12	-0.07	0.36
21	6	0.06	0.02	-0.01	0.01	0.04	-0.10	-0.04	-0.07	0.07
22	1	0.06	0.15	-0.09	0.03	0.25	-0.50	-0.03	0.11	-0.19
23	1	0.00	-0.10	0.01	-0.37	-0.16	-0.02	-0.26	-0.34	0.12
24	1	0.18	0.04	0.10	0.33	0.05	0.15	0.18	-0.01	0.35
25	1	-0.01	-0.03	0.13	-0.01	-0.01	0.00	-0.05	-0.01	-0.21

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 93.6105 96.7876 132.0300

Red. masses -- 1.4891 1.4133 1.9001

Frc consts -- 0.0077 0.0078 0.0195

IR Inten -- 0.6078 1.5278 8.2799

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

4	6	0.01	-0.09	-0.05	0.02	0.01	0.03	-0.04	-0.01	-0.03
5	1	-0.06	0.13	0.10	-0.08	0.06	0.00	0.12	-0.19	-0.07
6	1	-0.24	-0.17	-0.12	-0.04	0.03	0.08	0.23	0.10	0.02
7	1	0.18	-0.15	-0.10	-0.09	0.07	0.03	-0.06	0.04	0.06
8	1	-0.01	0.06	0.09	0.06	-0.02	-0.01	-0.07	-0.13	-0.13
9	1	0.24	-0.28	-0.06	-0.03	0.03	0.04	-0.12	0.13	-0.09
10	1	-0.17	-0.15	-0.27	0.05	0.00	0.09	0.03	0.00	0.08
11	6	0.00	-0.02	-0.03	0.02	-0.01	0.05	-0.01	0.00	0.01
12	6	0.03	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.08	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.00	0.01	0.10
14	7	-0.02	0.01	-0.05	0.01	-0.01	-0.05	0.00	0.00	0.07
15	1	-0.01	-0.05	-0.06	0.02	0.00	0.08	-0.01	-0.01	-0.01
16	1	0.06	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.13	0.00	0.00	-0.03
17	7	0.03	0.02	0.01	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.04
18	6	-0.05	0.01	0.04	0.03	-0.01	0.03	-0.02	0.00	-0.13
19	1	0.28	0.08	0.12	0.36	0.05	0.10	0.34	-0.14	-0.14
20	1	-0.27	-0.01	0.34	-0.18	-0.04	0.31	-0.27	0.12	0.11
21	6	0.06	0.03	0.04	-0.03	0.00	-0.06	0.00	0.07	-0.10
22	1	0.06	0.13	-0.05	-0.04	-0.27	0.25	0.00	0.12	-0.20
23	1	-0.02	-0.07	0.06	0.23	0.29	-0.12	-0.11	0.14	-0.08
24	1	0.17	0.04	0.14	-0.34	-0.05	-0.35	0.09	0.03	-0.14
25	1	-0.19	-0.05	-0.26	-0.10	-0.04	-0.27	-0.18	0.02	-0.54

71 bnme2-py

0 1 -407.605793

B	1.06711000	0.00039700	-0.92115300
N	2.14016100	-0.00004900	-0.04356100
C	2.04609000	-0.00077600	1.42245600
C	3.52257800	0.00039600	-0.52009700
H	1.00398200	-0.00089900	1.73867400
H	2.53970400	-0.88614800	1.83899600
H	2.53976900	0.88412300	1.83992200
H	3.52446500	0.00064700	-1.60836100

H	4.05614900	0.88818700	-0.15867300
H	4.05655000	-0.88730000	-0.15905400
C	-1.01154000	-1.18288700	-0.26272200
C	-2.34399900	-1.19400700	0.07218200
C	-3.05689500	-0.00007800	0.24361700
C	-2.34400100	1.19399600	0.07296100
C	-1.01156600	1.18309900	-0.26197700
N	-0.30991800	0.00017200	-0.45217300
H	-4.11193200	-0.00014400	0.48012200
H	-0.45060600	-2.08873700	-0.44503100
H	-2.82930500	-2.15503000	0.19665200
H	-2.82931200	2.15492500	0.19810800
H	-0.45071200	2.08906500	-0.44397700

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	56.8037	80.4211	97.1953
Red. masses --	3.4601	3.9051	2.7278
Frc consts --	0.0066	0.0149	0.0152
IR Inten --	2.9309	6.6857	0.1003

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.19	0.00	0.02	0.00	-0.13	0.00	-0.08	0.00
2	7	0.00	0.02	0.00	-0.07	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00
3	6	0.00	0.22	0.00	-0.24	0.00	-0.03	0.00	-0.18	0.00
4	6	0.00	0.06	0.00	-0.01	0.00	0.15	0.00	0.26	0.00
5	1	0.00	0.21	0.00	-0.27	0.00	-0.14	0.00	-0.43	0.00
6	1	0.05	0.30	0.12	-0.29	0.00	0.03	0.18	-0.13	-0.10
7	1	-0.05	0.30	-0.12	-0.29	0.00	0.03	-0.18	-0.13	0.10
8	1	0.00	-0.10	0.00	0.12	0.00	0.15	0.00	0.34	0.00
9	1	-0.07	0.16	-0.13	-0.06	0.00	0.22	-0.16	0.33	0.06
10	1	0.07	0.16	0.13	-0.06	0.00	0.22	0.16	0.33	-0.06
11	6	-0.11	-0.08	-0.13	0.03	0.00	-0.13	-0.05	-0.05	0.07
12	6	-0.11	0.01	-0.12	0.08	0.00	0.09	-0.06	0.04	0.06

13	6	0.00	0.06	0.00	0.12	0.00	0.23	0.00	0.08	0.00
14	6	0.11	0.01	0.12	0.08	0.00	0.09	0.06	0.04	-0.06
15	6	0.11	-0.08	0.13	0.03	0.00	-0.13	0.05	-0.04	-0.07
16	7	0.00	-0.12	0.00	0.01	0.00	-0.17	0.00	-0.09	0.00
17	1	0.00	0.13	0.00	0.16	0.00	0.41	0.00	0.14	0.00
18	1	-0.20	-0.11	-0.24	0.01	0.00	-0.21	-0.09	-0.08	0.13
19	1	-0.20	0.04	-0.21	0.10	0.00	0.14	-0.11	0.07	0.12
20	1	0.20	0.04	0.21	0.09	0.00	0.14	0.11	0.07	-0.12
21	1	0.20	-0.11	0.24	0.01	0.00	-0.21	0.09	-0.08	-0.13
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		171.1889			197.6040			207.4190		
Red. masses --		1.0878			1.1311			3.7938		
Frc consts --		0.0188			0.0260			0.0962		
IR Inten --		0.0505			0.0035			13.5086		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.16
2	7	0.00	0.05	0.00	0.00	0.07	0.00	0.04	0.00	0.11
3	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.03	0.00	0.22	0.00	0.13
4	6	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.03
5	1	0.00	0.53	0.00	0.00	0.01	0.00	0.26	0.00	0.25
6	1	-0.49	-0.33	-0.06	0.01	0.02	-0.02	0.27	0.00	0.06
7	1	0.49	-0.33	0.06	-0.01	0.02	0.02	0.27	0.00	0.06
8	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.53	0.00	-0.10	0.00	-0.03
9	1	0.00	0.05	-0.03	0.21	-0.33	0.45	0.04	0.00	-0.08
10	1	0.00	0.05	0.03	-0.21	-0.33	-0.45	0.04	0.00	-0.08
11	6	-0.01	-0.02	0.01	-0.02	-0.02	0.00	-0.09	-0.01	-0.20
12	6	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.05	0.00	-0.03
13	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.19
14	6	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.05	0.00	-0.03
15	6	0.01	-0.02	-0.01	0.02	-0.02	-0.01	-0.09	0.01	-0.20
16	7	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.04	0.00	-0.07
17	1	0.00	0.02	0.00	0.00	0.03	0.00	0.04	0.00	0.39

18	1	-0.02	-0.02	0.01	-0.03	-0.03	0.01	-0.14	-0.01	-0.34
19	1	-0.02	0.01	0.01	-0.03	0.01	0.01	-0.05	0.00	-0.06
20	1	0.02	0.01	-0.01	0.03	0.01	-0.01	-0.05	0.00	-0.06
21	1	0.02	-0.02	-0.01	0.03	-0.03	-0.01	-0.14	0.01	-0.34

0 3 -407.599794

B	1.01021700	-0.82510300	-0.08872000
N	2.19779300	-0.09228600	0.01197200
C	2.34568800	1.24718400	0.58267900
C	3.47292400	-0.70932600	-0.34425400
H	1.41345500	1.58139400	1.03427200
H	3.11269700	1.23379000	1.36577100
H	2.65498500	1.97881000	-0.17521400
H	3.30135500	-1.71886700	-0.71629700
H	3.98187500	-0.13117200	-1.12544500
H	4.13848700	-0.76356400	0.52700000
C	-1.38196500	-1.33487500	0.16815800
C	-2.69676500	-0.98408700	0.22691000
C	-3.10798100	0.35847800	0.03279500
C	-2.10114700	1.29597000	-0.27910500
C	-0.78529600	0.93328600	-0.34230100
N	-0.36274300	-0.39053000	-0.07359900
H	-4.14843900	0.64535300	0.09257300
H	-1.03232700	-2.34669700	0.31651900
H	-3.42429400	-1.76220300	0.42569100
H	-2.35620100	2.32680200	-0.49847700
H	-0.01078000	1.62179800	-0.64069700

	1	2	3
	A	A	A

Frequencies --	58.6658	75.0329	122.3562
Red. masses --	3.0665	3.5490	2.1686
Frc consts --	0.0062	0.0118	0.0191

IR Inten	--	0.4382			0.3031			1.2534		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	-0.06	-0.05	0.00	0.00	-0.12	0.01	-0.08	0.08
2	7	-0.03	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	-0.03	0.07
3	6	-0.13	-0.09	0.21	-0.08	0.03	-0.06	-0.12	0.05	-0.09
4	6	0.01	0.13	-0.11	0.04	-0.03	0.23	0.00	0.08	-0.02
5	1	-0.18	-0.19	0.18	-0.14	0.06	-0.19	-0.04	-0.10	0.17
6	1	-0.18	-0.18	0.26	-0.18	0.07	0.04	0.12	0.26	-0.32
7	1	-0.10	0.04	0.34	0.02	-0.01	-0.06	-0.49	0.06	-0.24
8	1	0.07	0.18	-0.26	0.09	-0.04	0.23	0.07	0.00	0.16
9	1	-0.03	0.29	-0.02	0.18	-0.07	0.29	-0.19	0.02	-0.20
10	1	0.01	0.04	-0.11	-0.11	-0.01	0.34	0.14	0.30	-0.12
11	6	-0.01	0.00	0.09	0.01	-0.02	-0.14	-0.05	-0.04	-0.06
12	6	0.00	0.06	0.12	0.03	0.01	0.08	-0.03	0.03	-0.06
13	6	0.05	0.06	0.03	0.04	0.04	0.23	0.05	0.07	0.02
14	6	0.07	-0.01	-0.12	0.01	0.02	0.08	0.10	0.02	0.05
15	6	0.05	-0.06	-0.15	-0.01	-0.02	-0.15	0.08	-0.06	0.03
16	7	0.01	-0.05	-0.04	0.00	-0.02	-0.19	0.01	-0.08	0.02
17	1	0.06	0.11	0.06	0.05	0.07	0.42	0.07	0.12	0.03
18	1	-0.04	0.00	0.16	0.00	-0.04	-0.26	-0.11	-0.07	-0.12
19	1	-0.02	0.11	0.23	0.03	0.02	0.12	-0.08	0.06	-0.13
20	1	0.10	-0.02	-0.20	-0.01	0.02	0.12	0.16	0.04	0.08
21	1	0.07	-0.13	-0.25	-0.04	-0.04	-0.28	0.11	-0.10	0.04

4

5

6

A

A

A

Frequencies	--	177.6224			196.7380			227.8559		
Red. masses	--	1.4995			1.8930			1.6518		
Frc consts	--	0.0279			0.0432			0.0505		
IR Inten	--	0.7249			3.1057			1.0455		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.03	0.06	0.00	-0.01	0.14	-0.01	0.04	0.09
2	7	0.01	0.00	0.10	-0.03	0.08	-0.04	0.01	0.00	0.10
3	6	0.07	0.00	0.06	0.08	0.06	-0.03	0.08	0.03	0.03

4	6	-0.03	-0.01	-0.07	-0.04	0.04	-0.02	-0.05	-0.04	-0.04
5	1	0.04	0.12	-0.10	0.00	0.31	-0.37	0.20	-0.07	0.35
6	1	-0.04	-0.04	0.17	-0.20	-0.08	0.24	0.36	0.12	-0.25
7	1	0.26	-0.07	0.07	0.52	-0.06	0.04	-0.27	0.06	-0.09
8	1	-0.05	-0.16	0.36	-0.07	0.14	-0.26	-0.16	0.11	-0.39
9	1	-0.32	-0.25	-0.44	0.08	0.18	0.15	0.04	0.16	0.16
10	1	0.23	0.38	-0.25	-0.13	-0.19	0.03	-0.07	-0.41	-0.05
11	6	0.00	0.00	-0.05	-0.06	-0.06	-0.05	0.01	0.00	-0.06
12	6	0.01	-0.01	0.00	-0.05	0.00	-0.05	0.01	-0.02	0.01
13	6	-0.01	-0.01	0.05	0.02	0.04	0.04	0.00	-0.01	0.06
14	6	-0.03	-0.01	-0.02	0.06	-0.01	0.01	-0.03	-0.01	-0.05
15	6	-0.03	0.00	-0.07	0.03	-0.08	-0.01	-0.03	0.00	-0.09
16	7	-0.01	0.01	-0.04	-0.02	-0.08	0.05	-0.01	0.02	-0.03
17	1	0.00	-0.01	0.11	0.04	0.09	0.06	0.00	-0.01	0.14
18	1	0.02	0.00	-0.09	-0.11	-0.08	-0.11	0.03	0.00	-0.11
19	1	0.01	-0.02	0.01	-0.09	0.03	-0.13	0.02	-0.03	0.01
20	1	-0.05	-0.02	-0.04	0.10	0.00	-0.01	-0.06	-0.03	-0.08
21	1	-0.04	0.00	-0.12	0.06	-0.13	-0.07	-0.03	0.00	-0.11

72 r5nme

0 1 -235.512604

C	1.69608800	-0.74433700	-0.07725900
B	0.31687600	-1.07680400	0.19622000
N	-0.70918700	-0.14513400	-0.04195200
C	0.09068600	1.00599400	-0.02995000
C	1.44728500	0.66623800	-0.01789400
C	-2.15835500	-0.14460100	-0.02527600
H	2.66006000	-1.21622400	-0.12171500
H	-0.33704400	1.95350300	0.27198000
H	2.21767400	1.41076100	0.14887800
H	-2.53635400	0.48653700	-0.83301600
H	-2.52582700	-1.15970100	-0.17789200
H	-2.55280600	0.22531800	0.92660200

		1	2	3
		A	A	A
Frequencies --		59.5405	154.5046	311.0330
Red. masses --		1.1471	2.9251	3.0085
Frc consts --		0.0024	0.0411	0.1715
IR Inten --		0.2871	2.1752	13.5740

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.05	-0.03	-0.03	-0.11	-0.04	-0.11	0.06
2	5	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.03	0.14	-0.08	0.14	-0.13
3	7	0.00	0.01	0.06	0.00	0.05	0.26	-0.02	0.18	0.00
4	6	0.00	0.01	0.06	0.01	0.03	0.07	0.09	0.14	-0.04
5	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.12	0.05	-0.06	0.03
6	6	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.05	-0.18	-0.02	-0.22	0.05
7	1	0.00	0.00	-0.08	-0.04	-0.04	-0.18	-0.08	-0.18	0.15
8	1	0.02	0.00	0.10	0.09	0.08	0.05	0.21	0.22	-0.11
9	1	0.01	-0.01	0.03	0.05	-0.05	-0.20	0.14	-0.17	0.10
10	1	0.03	-0.45	-0.41	0.22	0.15	-0.11	-0.29	-0.37	0.06
11	1	0.03	-0.10	0.50	0.12	-0.04	-0.60	0.33	-0.35	0.09
12	1	-0.06	0.51	-0.27	-0.33	-0.37	-0.20	-0.10	-0.35	0.07

		4	5	6
		A	A	A
Frequencies --		394.0015	524.5305	542.1035
Red. masses --		5.2847	2.7421	2.2099
Frc consts --		0.4834	0.4445	0.3826
IR Inten --		70.0542	52.7415	14.8886

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.16	0.08	-0.20	0.15	-0.04	-0.07	0.00	0.06	0.19
2	5	-0.13	-0.08	0.42	0.11	0.25	0.10	-0.06	0.00	-0.05
3	7	0.07	0.10	-0.27	-0.10	-0.03	-0.04	-0.03	-0.03	-0.06
4	6	0.02	0.02	0.05	0.00	-0.05	-0.06	0.06	-0.03	0.12
5	6	0.08	0.00	0.05	0.03	-0.08	-0.01	0.10	0.04	-0.16
6	6	0.08	-0.08	-0.01	-0.15	0.00	0.00	-0.06	-0.02	-0.02

7	1	-0.22	-0.04	-0.36	0.15	-0.06	0.13	-0.12	-0.14	-0.28
8	1	0.07	-0.05	0.38	0.21	-0.18	0.67	0.11	-0.15	0.62
9	1	0.08	-0.02	0.18	-0.10	-0.04	0.44	0.10	0.13	-0.57
10	1	-0.19	-0.20	0.03	-0.13	0.04	0.01	-0.08	-0.03	-0.02
11	1	0.26	-0.17	0.12	-0.19	0.02	-0.01	-0.03	-0.03	-0.01
12	1	0.18	-0.13	0.05	-0.10	0.02	0.01	-0.04	-0.03	-0.01

0 3 -235.520971

C		-1.64495300	-0.65638500	0.22935000
B		-0.21117500	-1.18783300	0.45060300
N		0.67435700	-0.11957900	0.02902100
C		-0.10512600	0.92565400	-0.39320100
C		-1.48468400	0.62094000	-0.28018900
C		2.12956400	-0.06734600	0.02229600
H		-2.60679400	-1.11686600	0.40694800
H		0.33853700	1.84475300	-0.75769600
H		-2.26417500	1.31726400	-0.56386800
H		2.50035000	0.72740200	0.67688100
H		2.51439600	-1.02017000	0.38365400
H		2.51421900	0.10174000	-0.98805500

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		76.1040			202.2082			339.6161		
Red. masses --		1.1093			2.9721			2.7806		
Frc consts --		0.0038			0.0716			0.1890		
IR Inten --		0.0228			4.2760			0.9725		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.02	-0.04	0.00	-0.04	-0.11	0.07	-0.06	0.03
2	5	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.05	0.13	0.12	0.11	-0.04
3	7	0.00	0.02	0.04	0.00	0.10	0.24	0.00	0.17	-0.07
4	6	0.00	0.02	0.05	0.00	0.04	0.10	-0.09	0.12	-0.05
5	6	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.05	-0.11	-0.08	-0.05	0.02

6	6	0.00	-0.01	-0.03	0.00	-0.07	-0.18	0.01	-0.21	0.08
7	1	0.00	-0.03	-0.07	0.00	-0.10	-0.24	0.13	-0.17	0.07
8	1	0.00	0.04	0.10	0.00	0.04	0.09	-0.22	0.18	-0.07
9	1	0.00	0.01	0.03	0.00	-0.09	-0.24	-0.17	-0.14	0.05
10	1	0.02	0.34	-0.48	0.32	-0.27	-0.11	0.20	-0.35	0.15
11	1	-0.01	0.18	0.48	0.00	-0.21	-0.53	-0.38	-0.35	0.14
12	1	-0.02	-0.58	-0.14	-0.31	0.12	-0.26	0.21	-0.35	0.14
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		501.7251			520.6497			613.9816		
Red. masses --		3.0651			3.5385			5.2368		
Frc consts --		0.4546			0.5651			1.1631		
IR Inten --		6.2790			0.7947			5.4453		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.10	0.25	0.30	0.02	-0.01
2	5	0.00	0.08	0.20	0.00	-0.11	-0.27	0.18	-0.14	0.06
3	7	0.00	-0.10	-0.24	0.00	0.04	0.09	-0.18	-0.03	0.01
4	6	0.00	0.08	0.20	0.00	0.02	0.06	0.06	0.08	-0.03
5	6	0.00	-0.05	-0.13	0.00	-0.09	-0.24	0.14	0.07	-0.03
6	6	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.41	-0.01	0.00
7	1	0.00	-0.04	-0.10	0.00	0.23	0.58	0.28	0.06	-0.02
8	1	0.00	0.30	0.76	0.00	0.18	0.44	0.29	-0.01	0.00
9	1	0.00	-0.12	-0.29	0.00	-0.14	-0.35	0.02	-0.07	0.02
10	1	-0.14	0.02	0.02	0.06	-0.01	-0.01	-0.40	0.00	-0.01
11	1	0.00	0.02	0.04	0.00	-0.01	-0.02	-0.35	0.01	-0.01
12	1	0.14	0.00	0.03	-0.05	0.00	-0.02	-0.40	0.00	0.00

73 r5nme2

0 1 -277.154332

B	0.27828600	1.47636900	0.26705700
C	1.72048500	0.83404600	0.03177600
C	1.64930300	-0.70942800	-0.04621900
C	0.26108600	-0.98628900	-0.61645700

N	-0.64274800	0.06684900	-0.01532300
C	-1.09934100	-0.34297400	1.34312600
C	-1.82278600	0.34760800	-0.86836600
H	1.99710400	1.24980200	-0.95412400
H	2.48365900	1.21008200	0.71770100
H	1.75661400	-1.15599700	0.94756200
H	2.42022800	-1.16330300	-0.67587100
H	0.25819400	-0.82582200	-1.69712100
H	-0.12779900	-1.98954800	-0.41841900
H	-0.23696500	-0.54332300	1.97868700
H	-1.71328800	-1.24514300	1.26465600
H	-1.66826800	0.47657200	1.77833900
H	-2.41146000	1.13085700	-0.39489900
H	-2.41796200	-0.56293300	-0.99925200
H	-1.48473600	0.71119400	-1.83844500

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		101.7713			197.2639			225.5804		
Red. masses --		2.3275			1.1029			1.8031		
Frc consts --		0.0142			0.0253			0.0541		
IR Inten --		8.0921			4.9801			0.6430		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.02	0.03	-0.13	0.01	-0.01	0.08	0.03	0.04	-0.06
2	6	0.01	-0.05	0.18	-0.01	-0.01	-0.03	0.01	-0.01	-0.08
3	6	-0.04	-0.04	0.02	-0.02	-0.01	0.02	-0.06	-0.01	0.18
4	6	-0.01	0.05	-0.10	0.00	0.01	-0.02	0.02	0.06	-0.05
5	7	-0.01	0.03	-0.07	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.02
6	6	0.15	0.07	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.05	-0.09	-0.03
7	6	-0.10	-0.08	0.04	0.00	0.01	-0.01	-0.04	0.02	0.05
8	1	0.32	0.04	0.31	-0.14	-0.05	-0.09	-0.09	-0.21	-0.20
9	1	-0.17	-0.15	0.44	0.08	0.02	-0.14	0.09	0.10	-0.23
10	1	-0.11	-0.16	-0.03	-0.06	0.02	0.04	-0.32	0.15	0.28

11	1	-0.01	0.01	0.02	0.00	-0.04	0.07	0.02	-0.19	0.42
12	1	0.06	0.15	-0.08	0.04	0.04	-0.01	0.18	0.21	-0.03
13	1	-0.05	0.05	-0.21	-0.01	0.01	-0.05	-0.03	0.04	-0.23
14	1	0.22	0.22	-0.05	0.03	0.47	0.12	0.07	-0.20	-0.09
15	1	0.25	0.00	0.11	0.43	-0.29	0.04	-0.01	-0.05	-0.08
16	1	0.08	0.04	-0.01	-0.40	-0.21	-0.18	0.12	-0.10	0.08
17	1	-0.08	-0.06	0.04	0.13	0.18	-0.11	-0.10	-0.10	0.17
18	1	-0.09	-0.11	0.17	-0.13	0.07	0.18	0.04	-0.01	-0.08
19	1	-0.22	-0.15	-0.03	0.00	-0.21	-0.09	-0.09	0.20	0.10
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		244.6477			298.2420			319.0215		
Red. masses --		1.0732			2.2147			3.1605		
Frc consts --		0.0378			0.1161			0.1895		
IR Inten --		1.1208			16.5375			0.9593		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.24	0.21	0.15	0.05
2	6	0.00	0.02	0.00	-0.05	-0.03	0.03	0.16	-0.01	-0.04
3	6	0.01	0.02	0.02	-0.02	-0.02	0.01	0.01	0.00	-0.05
4	6	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.05	-0.01	0.12	-0.02
5	7	0.00	-0.02	-0.02	0.01	0.04	-0.06	-0.02	0.02	0.05
6	6	-0.01	-0.03	-0.03	0.08	0.13	-0.01	-0.20	-0.01	-0.02
7	6	-0.02	0.01	0.03	-0.02	-0.11	-0.06	-0.06	-0.20	0.04
8	1	0.00	0.01	0.00	-0.49	-0.05	-0.12	0.25	-0.01	0.00
9	1	0.00	0.03	0.00	0.23	0.01	-0.31	0.16	-0.11	0.02
10	1	-0.01	0.03	0.03	-0.06	-0.04	0.00	-0.02	-0.01	-0.05
11	1	0.03	0.01	0.05	0.00	0.00	0.02	-0.05	-0.08	-0.07
12	1	0.04	0.00	-0.01	0.05	0.06	-0.05	-0.02	0.26	0.00
13	1	0.04	-0.01	-0.02	-0.04	0.03	-0.10	-0.01	0.09	-0.16
14	1	-0.03	-0.28	-0.08	0.11	-0.07	-0.12	-0.31	-0.03	0.13
15	1	-0.21	0.11	-0.08	-0.14	0.27	0.07	-0.20	0.00	-0.13
16	1	0.18	0.06	0.07	0.35	0.28	0.06	-0.27	-0.02	-0.10
17	1	0.29	0.37	-0.17	-0.11	-0.16	-0.11	-0.20	-0.25	-0.04

18	1	-0.32	0.15	0.44	0.08	-0.18	-0.01	0.07	-0.30	0.17
19	1	-0.05	-0.45	-0.15	-0.06	-0.14	-0.09	-0.16	-0.27	-0.02

0 3 -277.129991

B		0.34848500	-0.94655800	-0.98832400
C		1.83871500	-0.63819200	-0.50640400
C		1.63658100	0.58819500	0.42052100
C		0.24769000	0.41075800	1.03756100
N		-0.65956400	-0.08297800	-0.07416700
C		-1.24163000	1.08002800	-0.82308800
C		-1.78637000	-0.89389000	0.47453000
H		2.29956900	-1.45913300	0.06514000
H		2.54331200	-0.40322000	-1.31137800
H		1.67703200	1.51738500	-0.15637600
H		2.38589800	0.67224000	1.21458300
H		0.27141900	-0.37638000	1.79319100
H		-0.17472700	1.31541900	1.48575200
H		-0.43203700	1.71558900	-1.17268200
H		-1.92153300	1.65137800	-0.17901100
H		-1.77685500	0.69279000	-1.68827200
H		-2.38225000	-1.26492800	-0.35868300
H		-2.41228700	-0.28527600	1.13643200
H		-1.37293100	-1.74362100	1.01337400

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		90.7948			225.5283			238.0090		
Red. masses --		2.5297			1.8729			1.1048		
Frc consts --		0.0123			0.0561			0.0369		
IR Inten --		5.8927			0.0445			0.3220		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.02	0.16	-0.14	0.02	-0.04	0.01	-0.02	0.01	0.02
2	6	-0.02	-0.15	0.14	0.00	-0.04	0.09	-0.01	-0.01	-0.01

3	6	0.04	-0.04	-0.01	-0.07	0.12	-0.15	0.02	-0.02	0.01
4	6	0.01	0.09	-0.05	0.03	-0.07	0.00	0.01	0.03	0.01
5	7	0.00	0.05	-0.04	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.02	0.01
6	6	-0.14	0.02	0.04	0.06	0.06	0.09	-0.02	0.02	0.03
7	6	0.10	-0.07	0.00	-0.04	-0.01	-0.07	0.01	-0.04	-0.05
8	1	-0.31	-0.19	0.32	-0.10	0.06	0.31	0.00	-0.03	-0.04
9	1	0.19	-0.38	0.26	0.09	-0.23	0.12	-0.02	0.00	-0.02
10	1	0.11	-0.11	-0.13	-0.32	0.01	-0.34	0.06	-0.01	0.02
11	1	0.01	0.01	0.01	0.00	0.42	-0.24	0.02	-0.06	0.01
12	1	-0.05	0.15	0.02	0.20	-0.17	-0.10	-0.02	0.06	0.04
13	1	0.04	0.14	-0.13	-0.03	-0.17	0.16	0.04	0.06	-0.03
14	1	-0.22	0.14	0.08	0.09	0.00	0.05	-0.02	-0.11	-0.19
15	1	-0.21	-0.11	0.08	0.16	0.09	0.17	0.17	0.15	0.12
16	1	-0.09	0.01	0.01	-0.04	0.14	0.12	-0.24	0.01	0.17
17	1	0.05	-0.05	0.03	0.02	0.00	-0.11	0.35	-0.43	-0.11
18	1	0.12	-0.17	0.11	-0.08	-0.01	-0.11	-0.31	0.04	-0.42
19	1	0.21	-0.09	-0.10	-0.09	-0.02	-0.04	0.03	0.22	0.35

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 279.0170 323.9469 362.8271

Red. masses -- 1.1573 1.9813 2.8325

Frc consts -- 0.0531 0.1225 0.2197

IR Inten -- 1.1766 4.6315 3.3447

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.03	-0.03	0.06	-0.03	-0.14	0.16	0.13	-0.09	0.07
2	6	-0.02	-0.02	-0.02	0.00	-0.02	-0.02	0.16	-0.01	0.02
3	6	0.01	0.00	-0.04	0.02	-0.01	-0.01	0.08	-0.02	0.01
4	6	0.01	0.04	0.01	-0.01	0.12	-0.02	0.05	-0.06	-0.05
5	7	0.00	0.01	0.03	0.00	0.03	0.00	0.01	0.00	-0.06
6	6	0.01	0.02	0.03	-0.02	0.06	0.06	-0.24	-0.01	0.07
7	6	0.00	-0.03	-0.04	0.03	-0.08	-0.12	-0.10	0.14	-0.05
8	1	0.03	0.00	-0.04	0.14	0.01	-0.09	0.24	0.02	-0.01
9	1	-0.06	-0.01	-0.06	-0.12	0.04	-0.10	0.10	0.05	-0.02

10	1	0.01	-0.02	-0.06	0.10	-0.02	-0.02	0.07	-0.02	0.00
11	1	0.03	0.01	-0.06	0.01	-0.05	0.00	0.02	0.01	0.06
12	1	0.01	0.07	0.05	-0.09	0.23	0.10	0.04	-0.11	-0.11
13	1	0.04	0.07	-0.03	0.03	0.21	-0.18	0.06	-0.08	0.02
14	1	-0.01	0.29	0.48	-0.02	-0.01	-0.06	-0.41	0.20	0.06
15	1	-0.38	-0.27	-0.13	0.14	0.12	0.18	-0.29	-0.23	0.20
16	1	0.46	0.06	-0.27	-0.21	0.11	0.16	-0.26	-0.04	0.10
17	1	0.15	-0.15	-0.10	-0.08	0.23	-0.18	-0.10	0.16	-0.06
18	1	-0.15	-0.03	-0.18	0.12	-0.29	0.16	-0.07	0.29	-0.15
19	1	-0.01	0.05	0.09	0.07	-0.29	-0.48	-0.27	0.14	0.07

74 r5nme(cf3)2

0 1 -909.796388

C	-0.84751000	2.21668000	0.05649900
B	0.55687200	2.38525200	0.25695500
N	1.49691800	1.41353500	-0.03980400
C	0.59749600	0.32594800	-0.17190100
C	-0.72820800	0.79217400	-0.08261700
C	2.95239800	1.38029800	-0.15865000
C	-1.96558700	-0.07202500	-0.03827100
F	-3.08021800	0.69378700	-0.03799700
F	-2.02922900	-0.84479400	1.07003700
F	-2.05986600	-0.89183700	-1.10585800
C	1.13165700	-1.05044400	0.02173300
F	0.20211400	-1.99663800	-0.13625700
F	1.68464200	-1.22450400	1.25904600
F	2.13847400	-1.32283400	-0.85824100
H	-1.77176500	2.75968600	0.08017700
H	3.33179900	2.39194300	-0.02032600
H	3.39127900	0.73371200	0.60228900
H	3.24117300	1.01925400	-1.14561300

3	7	0.00	-0.01	0.10	0.01	0.00	0.02	0.01	0.06	0.11
4	6	0.00	-0.01	0.09	0.00	0.04	-0.13	0.02	0.05	0.13
5	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.04	-0.12	0.03	0.06	0.03
6	6	-0.02	0.04	-0.08	0.01	-0.04	0.09	-0.01	0.12	-0.12
7	6	-0.01	0.01	0.00	0.04	-0.01	-0.04	0.10	-0.02	0.01
8	9	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.08	0.03	0.03	-0.13	-0.04
9	9	-0.01	0.00	-0.01	0.18	0.02	0.00	0.14	-0.02	0.01
10	9	-0.02	0.01	-0.01	0.01	-0.05	0.00	0.22	-0.03	0.00
11	6	0.01	-0.02	0.03	-0.05	0.03	-0.04	-0.09	0.00	0.04
12	9	0.01	-0.01	0.01	-0.08	0.04	0.05	-0.20	0.11	-0.02
13	9	0.04	-0.08	0.01	-0.07	0.14	-0.02	-0.08	-0.18	0.01
14	9	0.00	0.03	0.00	-0.07	-0.09	-0.02	-0.15	-0.05	-0.01
15	1	-0.01	0.00	-0.13	0.02	0.03	0.06	-0.01	0.05	-0.10
16	1	0.01	-0.04	0.41	0.08	-0.14	0.62	-0.05	0.20	-0.58
17	1	0.06	-0.36	-0.47	-0.08	-0.44	-0.20	0.17	0.43	0.04
18	1	-0.12	0.55	-0.30	0.05	0.42	-0.07	-0.16	-0.24	-0.04

0 3 -909.798550

C	-6.42077800	-5.83055400	-1.23235600
B	-6.31466200	-4.32553900	-1.54804100
N	-7.28098700	-4.07212200	-2.59331900
C	-7.90924600	-5.25499400	-2.89239300
C	-7.39463500	-6.31980400	-2.07704600
C	-7.55311200	-2.77912800	-3.23180700
C	-7.81967700	-7.76213300	-2.10914900
F	-7.10964000	-8.48383800	-1.21581700
F	-7.62243700	-8.33543400	-3.31842000
F	-9.12479200	-7.92863900	-1.79529100
C	-8.97269700	-5.30603200	-3.95785600
F	-9.50738000	-6.51927000	-4.10409700
F	-8.47195200	-4.93219700	-5.16246500
F	-9.98352500	-4.44655000	-3.67587600
H	-5.89067400	-6.45100100	-0.52584100

H	-6.86264900	-2.05460500	-2.80452300
H	-7.39182100	-2.83239100	-4.30913900
H	-8.57603400	-2.45306000	-3.03894300

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		23.5342			71.2414			78.2690		
Red. masses --		12.6302			5.1844			7.3625		
Frc consts --		0.0041			0.0155			0.0266		
IR Inten --		0.2731			0.4194			0.4192		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	0.01	0.05	0.15	-0.04	-0.15	0.14	-0.04	-0.14
2	5	-0.08	0.02	0.08	0.07	-0.02	-0.07	0.13	-0.03	-0.13
3	7	-0.08	0.02	0.08	-0.04	0.01	0.04	0.01	0.00	-0.01
4	6	-0.06	0.02	0.06	-0.01	0.00	0.01	-0.03	0.01	0.03
5	6	-0.03	0.01	0.03	0.08	-0.02	-0.08	0.03	-0.01	-0.03
6	6	-0.09	0.03	0.10	-0.23	0.06	0.22	-0.12	0.03	0.12
7	6	0.03	-0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01
8	9	0.17	-0.05	-0.18	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.05	0.18
9	9	-0.08	0.11	-0.11	-0.17	-0.09	0.04	0.28	-0.07	0.06
10	9	0.08	-0.10	0.11	-0.01	0.14	0.14	-0.05	0.01	-0.29
11	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.01	-0.04	-0.04	0.01	0.04
12	9	-0.24	0.08	0.25	0.09	-0.03	-0.10	-0.11	0.03	0.11
13	9	0.17	-0.39	-0.05	0.11	0.03	0.00	-0.01	-0.10	0.02
14	9	0.16	0.27	-0.28	-0.01	-0.05	-0.09	0.01	0.09	-0.02
15	1	-0.03	0.01	0.03	0.22	-0.06	-0.22	0.21	-0.06	-0.21
16	1	0.11	-0.04	-0.12	-0.16	0.05	0.15	0.07	-0.02	-0.10
17	1	-0.38	-0.04	0.06	-0.46	0.18	0.18	-0.50	0.06	0.06
18	1	0.00	0.16	0.35	-0.20	0.00	0.48	-0.03	0.09	0.48
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		137.0078			142.6050			162.3021		
Red. masses --		1.4936			15.0609			6.2405		

Frc consts		0.0165			0.1805			0.0969		
IR Inten		0.0687			0.1943			0.2156		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.07	-0.02	-0.07	0.08	0.08	0.10	-0.05	0.01	0.05
2	5	0.03	0.00	-0.02	0.06	0.09	0.05	-0.19	0.05	0.19
3	7	-0.05	0.02	0.06	0.07	0.05	0.01	-0.04	0.01	0.05
4	6	-0.05	0.02	0.06	0.10	0.03	0.06	0.15	-0.04	-0.15
5	6	0.01	0.00	-0.01	0.10	0.08	0.08	0.16	-0.04	-0.16
6	6	0.03	-0.01	-0.02	-0.03	0.01	-0.01	-0.06	0.02	0.07
7	6	0.00	0.00	-0.01	-0.06	0.14	-0.09	0.06	-0.02	-0.06
8	9	-0.01	0.00	0.00	-0.22	-0.11	-0.19	-0.02	0.01	0.02
9	9	0.00	0.00	-0.01	-0.09	0.33	-0.19	-0.01	-0.20	0.01
10	9	0.00	0.02	-0.02	-0.10	0.32	-0.17	0.04	0.19	-0.04
11	6	-0.02	0.00	0.03	0.07	-0.17	0.10	0.05	-0.01	-0.05
12	9	-0.01	0.00	0.03	0.19	-0.23	0.24	-0.05	0.02	0.06
13	9	0.05	-0.02	0.05	-0.02	-0.25	0.04	-0.14	-0.07	-0.14
14	9	-0.04	0.00	-0.05	-0.01	-0.27	0.08	0.15	0.06	0.11
15	1	0.12	-0.03	-0.11	0.07	0.10	0.13	-0.14	0.04	0.14
16	1	-0.32	0.10	0.36	0.06	0.04	-0.19	-0.35	0.11	0.39
17	1	0.59	0.06	0.05	-0.23	-0.06	-0.04	0.35	0.15	0.12
18	1	-0.13	-0.20	-0.54	0.01	0.03	0.16	-0.18	-0.18	-0.28

75 r5nme(cho)2

0 1 -462.218151

C	-0.72619300	-1.85858900	-0.00012100
B	0.68835600	-1.82490600	0.00004200
N	1.51184500	-0.72130100	-0.00029100
C	0.46511000	0.25539900	-0.00021100
C	-0.78558100	-0.41885300	-0.00010300
C	2.94832400	-0.48190000	0.00018300
C	0.77024200	1.66697100	0.00024500
O	-0.04290700	2.57953100	-0.00031200
C	-2.10379000	0.27408300	0.00013600

O	-3.15839400	-0.32179900	0.00016900
H	-1.59463200	-2.48910900	-0.00005300
H	3.46525200	-1.44107000	-0.00091600
H	3.25054200	0.07481600	-0.88891900
H	3.25037500	0.07276000	0.89064200
H	1.85404700	1.89910600	0.00118100
H	-2.04854000	1.37261900	0.00026200

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		83.5509			97.6701			120.9567		
Red. masses --		4.4753			3.4692			4.7405		
Frc consts --		0.0184			0.0195			0.0409		
IR Inten --		0.0290			4.6635			6.7173		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	0.03
2	5	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	0.26
3	7	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	-0.04
4	6	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.23
5	6	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	-0.19
6	6	0.00	0.00	-0.31	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	0.00
7	6	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	0.02
8	8	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.00	0.20
9	6	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.28
10	8	0.00	0.00	-0.27	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.20
11	1	0.00	0.00	0.23	0.00	0.00	-0.24	0.00	0.00	0.07
12	1	0.00	0.00	-0.29	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	-0.01
13	1	-0.22	-0.14	-0.47	-0.18	-0.01	-0.18	0.00	0.01	0.00
14	1	0.22	0.14	-0.47	0.18	0.01	-0.18	0.00	-0.01	0.00
15	1	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.72	0.00	0.00	0.03
16	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.22	0.00	0.00	-0.82
		4			5			6		
		A			A			A		

Frequencies --	149.9704	187.3856	208.5154
Red. masses --	1.1215	8.9694	3.0635
Frc consts --	0.0149	0.1856	0.0785
IR Inten --	1.2875	4.8999	19.4100

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.05	-0.08	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.02
2	5	0.00	0.00	0.04	-0.10	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.18
3	7	0.00	0.00	-0.05	-0.08	0.06	0.00	0.00	0.00	0.17
4	6	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.11	0.00	0.00	0.00	0.23
5	6	0.00	0.00	0.01	-0.05	0.12	0.00	0.00	0.00	0.09
6	6	0.00	0.00	0.01	-0.06	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.08
7	6	0.00	0.00	0.02	0.18	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00
8	8	0.00	0.00	-0.02	0.37	0.24	0.00	0.00	0.00	-0.04
9	6	0.00	0.00	0.01	-0.18	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.20
10	8	0.00	0.00	-0.03	-0.02	-0.45	0.00	0.00	0.00	0.09
11	1	0.00	0.00	0.07	-0.12	0.17	0.00	0.00	0.00	-0.13
12	1	0.00	0.00	-0.57	-0.16	-0.14	0.00	0.00	0.00	-0.38
13	1	-0.06	0.49	0.30	0.00	-0.11	0.00	-0.19	0.17	-0.03
14	1	0.06	-0.49	0.30	0.00	-0.12	0.00	0.19	-0.18	-0.03
15	1	0.00	0.00	0.11	0.22	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.16
16	1	0.00	0.00	0.04	-0.47	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.71

0 3 -462.212741

C	-7.60149600	-6.79325400	-1.75691800
B	-7.50781800	-5.28211700	-2.07126900
N	-8.51771900	-5.01907500	-3.06871000
C	-9.17018300	-6.20037000	-3.35431400
C	-8.61083700	-7.28009400	-2.55531900
C	-8.82070000	-3.72941400	-3.68961400
C	-10.25341900	-6.27234700	-4.32724700
O	-10.85695700	-7.29653000	-4.60816900
C	-9.04430900	-8.70409100	-2.57932300
O	-8.52459000	-9.54311100	-1.87485200

H	-7.04767900	-7.42884300	-1.08043900
H	-8.14118700	-2.99063900	-3.26794100
H	-8.66996800	-3.76151900	-4.77148800
H	-9.84647800	-3.41586100	-3.48045200
H	-10.51772200	-5.32092200	-4.82131600
H	-9.86153500	-8.95835800	-3.27040500

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		76.9652			83.5182			144.0495		
Red. masses --		5.0204			3.3422			1.9717		
Frc consts --		0.0175			0.0137			0.0241		
IR Inten --		1.3898			23.3473			0.0036		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.15	0.04	0.17	-0.07	0.02	0.08	-0.02	0.01	0.02
2	5	-0.09	0.03	0.10	-0.08	0.02	0.09	-0.02	0.01	0.02
3	7	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.03	-0.03	0.01	0.03
4	6	-0.03	0.01	0.03	0.07	-0.02	-0.07	-0.03	0.01	0.03
5	6	-0.09	0.03	0.10	0.02	-0.01	-0.03	0.01	0.00	-0.01
6	6	0.18	-0.05	-0.20	0.02	-0.01	-0.02	0.08	-0.02	-0.08
7	6	-0.02	0.01	0.02	0.06	-0.02	-0.07	-0.13	0.04	0.14
8	8	-0.08	0.02	0.08	-0.17	0.05	0.18	0.06	-0.02	-0.06
9	6	-0.04	0.01	0.05	0.17	-0.05	-0.19	0.09	-0.03	-0.10
10	8	0.24	-0.07	-0.26	-0.06	0.02	0.06	-0.04	0.01	0.04
11	1	-0.21	0.06	0.23	-0.09	0.03	0.10	-0.02	0.00	0.02
12	1	0.22	-0.06	-0.24	-0.05	0.01	0.05	0.32	-0.09	-0.35
13	1	0.28	-0.22	-0.18	0.11	0.03	-0.01	-0.17	-0.22	-0.11
14	1	0.19	0.08	-0.33	-0.01	-0.06	-0.10	0.18	0.21	0.09
15	1	0.04	-0.01	-0.04	0.26	-0.07	-0.28	-0.39	0.11	0.42
16	1	-0.27	0.08	0.29	0.52	-0.15	-0.56	0.28	-0.08	-0.30
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		174.1196			191.2107			234.1242		

Red. masses --	1.2297	9.1150	4.7053
Frc consts --	0.0220	0.1964	0.1520
IR Inten --	0.1747	3.7604	3.2552

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.01	-0.04	0.08	0.10	0.05	0.13	0.09	0.09
2	5	0.00	0.00	0.00	0.05	0.12	0.01	0.03	0.09	0.01
3	7	-0.05	0.01	0.05	0.04	0.09	0.00	0.00	-0.04	0.01
4	6	-0.03	0.01	0.03	0.08	0.06	0.05	0.07	-0.09	0.08
5	6	0.01	0.00	-0.01	0.08	0.08	0.05	0.13	-0.02	0.13
6	6	0.04	-0.01	-0.05	-0.06	0.04	-0.06	-0.21	-0.16	-0.14
7	6	-0.04	0.01	0.04	0.07	-0.15	0.10	0.07	0.06	0.05
8	8	0.01	0.00	-0.01	0.21	-0.29	0.28	-0.08	0.21	-0.13
9	6	0.01	0.00	-0.02	-0.13	0.14	-0.15	0.05	0.01	0.04
10	8	-0.01	0.00	0.01	-0.34	-0.10	-0.28	-0.10	-0.15	-0.05
11	1	0.07	-0.02	-0.07	0.10	0.14	0.06	0.19	0.18	0.12
12	1	-0.30	0.09	0.33	-0.10	0.12	-0.12	-0.29	0.00	-0.29
13	1	0.60	0.05	0.03	-0.08	-0.02	-0.06	-0.26	-0.29	-0.15
14	1	-0.12	-0.19	-0.57	-0.08	-0.02	-0.06	-0.24	-0.27	-0.13
15	1	-0.09	0.03	0.10	-0.09	-0.26	-0.02	0.22	0.15	0.15
16	1	0.04	-0.01	-0.05	-0.14	0.41	-0.22	0.03	0.18	-0.02

76 r5nme(cn)2

0 1 -420.050495

C	0.78842400	-1.95274000	0.06903300
B	-0.62950000	-1.88712400	-0.07010600
N	-1.36499600	-0.71528400	-0.02972400
C	-0.27392200	0.18969600	-0.11845000
C	0.94150400	-0.52133800	-0.08197200
C	-2.76778200	-0.31994700	0.00971700
C	2.20932200	0.09368300	-0.26123700
N	3.25741200	0.56345700	-0.39456800
C	-0.49202500	1.54363200	-0.42555600
N	-0.71605300	2.65782000	-0.65551400

H	1.60023700	-2.64988400	0.14696600
H	-3.38690000	-1.21422100	0.06018000
H	-2.95761000	0.29721200	0.88937100
H	-3.03145100	0.24528300	-0.88586900

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		57.0670			94.4988			108.0664		
Red. masses --		1.2677			3.5550			10.7943		
Frc consts --		0.0024			0.0187			0.0743		
IR Inten --		0.5127			1.4939			0.3801		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.18	0.04	0.06	-0.11
2	5	0.00	0.00	0.04	0.03	0.01	0.21	0.04	0.07	0.11
3	7	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.07	0.04	0.06	-0.04
4	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.09	0.05	0.07	-0.18
5	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.03	0.04	0.07	-0.18
6	6	0.00	0.00	-0.11	-0.01	-0.03	-0.20	0.05	0.08	0.13
7	6	0.00	0.00	-0.02	0.01	-0.02	-0.05	0.14	-0.08	0.01
8	7	0.00	-0.01	-0.04	0.02	-0.09	-0.17	0.30	-0.37	0.26
9	6	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.03	0.05	-0.15	0.06	-0.07
10	7	-0.01	0.01	0.06	-0.05	0.06	0.19	-0.54	0.00	0.01
11	1	0.00	0.00	0.00	0.04	0.05	0.23	0.06	0.08	-0.11
12	1	0.02	0.02	0.42	-0.01	-0.05	-0.66	0.05	0.08	0.31
13	1	0.04	0.47	-0.43	-0.20	-0.35	-0.01	0.19	0.16	0.10
14	1	-0.06	-0.48	-0.40	0.18	0.30	-0.05	-0.08	-0.01	0.11

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		131.5264			155.5808			177.9881		
Red. masses --		8.2573			4.0230			4.7797		
Frc consts --		0.0842			0.0574			0.0892		
IR Inten --		12.5178			1.7707			4.3993		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	6	-0.01	-0.06	0.01	-0.02	-0.10	-0.14	0.05	0.07	-0.20
2	5	0.00	-0.03	0.36	-0.04	-0.01	0.18	0.03	0.04	0.15
3	7	-0.04	-0.05	-0.14	0.01	0.02	0.18	-0.04	-0.02	0.23
4	6	-0.03	-0.06	-0.40	0.08	-0.05	0.03	-0.08	0.05	0.09
5	6	-0.05	-0.04	-0.28	0.04	-0.10	-0.12	-0.05	0.10	-0.12
6	6	-0.03	-0.06	0.17	0.05	0.20	-0.12	-0.10	-0.20	-0.08
7	6	-0.05	0.01	-0.06	0.02	-0.03	-0.04	-0.02	0.06	-0.05
8	7	-0.08	0.16	0.23	-0.06	0.18	0.07	0.09	-0.15	0.08
9	6	0.03	0.00	-0.12	0.04	-0.06	0.02	-0.06	0.05	0.04
10	7	0.24	0.10	0.15	-0.11	-0.10	-0.02	0.18	0.07	-0.10
11	1	0.02	-0.01	0.07	-0.06	-0.15	-0.18	0.10	0.12	-0.30
12	1	-0.02	-0.05	0.43	-0.09	0.28	-0.49	0.01	-0.29	-0.37
13	1	0.18	0.06	0.13	-0.11	0.05	-0.05	-0.44	-0.35	-0.05
14	1	-0.25	-0.18	0.16	0.40	0.42	-0.08	0.06	-0.12	-0.08

0 3 -420.053891

C	-7.53259000	-6.85296000	-1.66513600
B	-7.42240300	-5.34351300	-1.97868600
N	-8.39615900	-5.07703200	-3.01113600
C	-9.03700100	-6.25497100	-3.31174800
C	-8.52055400	-7.33274400	-2.50237200
C	-8.71106200	-3.81230400	-3.67604100
C	-8.99256600	-8.67134200	-2.59237900
N	-9.36250000	-9.76463600	-2.65070700
C	-10.05010900	-6.34440200	-4.28354200
N	-10.88298300	-6.39341800	-5.08936300
H	-6.99925100	-7.47961600	-0.96542900
H	-8.06722200	-3.04154800	-3.25710500
H	-8.53043400	-3.88347400	-4.75092200
H	-9.75450000	-3.53553900	-3.50966800

1

2

3

A

A

A

Frequencies --	88.9865	103.9747	111.5121
Red. masses --	2.9609	1.2349	13.2104
Frc consts --	0.0138	0.0079	0.0968
IR Inten --	0.2978	0.2172	2.0063

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.10	0.03	0.10	0.05	-0.01	-0.05	-0.07	-0.07	-0.06
2	5	-0.06	0.02	0.06	0.02	0.00	-0.01	-0.06	-0.07	-0.04
3	7	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.02	-0.06	-0.07	-0.04
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.07	-0.06
5	6	-0.04	0.01	0.04	0.03	-0.01	-0.03	-0.08	-0.08	-0.06
6	6	0.16	-0.05	-0.17	-0.03	0.01	0.03	-0.05	-0.06	-0.03
7	6	0.03	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.07	-0.14	0.10
8	7	0.13	-0.04	-0.13	-0.06	0.02	0.05	0.36	-0.26	0.43
9	6	-0.05	0.01	0.05	0.01	0.00	-0.01	-0.06	0.15	-0.10
10	7	-0.12	0.04	0.13	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0.63	-0.18
11	1	-0.14	0.04	0.14	0.07	-0.02	-0.07	-0.08	-0.08	-0.06
12	1	-0.08	0.02	0.08	-0.43	0.12	0.43	-0.06	-0.07	0.00
13	1	0.61	-0.06	-0.09	0.49	0.19	0.11	-0.02	-0.05	-0.02
14	1	0.07	-0.14	-0.61	-0.18	-0.28	-0.43	-0.05	-0.07	-0.05

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	172.3183	179.0507	225.3446
Red. masses --	5.4340	6.9487	4.6826
Frc consts --	0.0951	0.1313	0.1401
IR Inten --	5.5078	2.4768	6.9396

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.10	-0.07	-0.09	0.14	-0.04	-0.13	0.10	-0.03	-0.10
2	5	-0.01	-0.07	0.01	0.15	-0.04	-0.16	-0.18	0.05	0.19
3	7	0.03	0.06	0.02	-0.14	0.04	0.14	-0.20	0.06	0.20
4	6	-0.06	0.12	-0.08	-0.28	0.08	0.29	-0.01	0.00	0.01
5	6	-0.12	0.04	-0.12	-0.15	0.04	0.16	0.17	-0.05	-0.17
6	6	0.22	0.18	0.16	0.09	-0.03	-0.10	0.12	-0.03	-0.12
7	6	-0.07	0.02	-0.07	-0.07	0.02	0.07	0.11	-0.03	-0.11

8	7	0.18	-0.08	0.19	0.12	-0.03	-0.13	-0.12	0.03	0.12
9	6	-0.06	0.07	-0.07	-0.13	0.04	0.13	0.00	0.00	0.00
10	7	-0.09	-0.27	-0.02	0.20	-0.05	-0.20	-0.02	0.01	0.02
11	1	-0.16	-0.16	-0.12	0.33	-0.09	-0.33	0.16	-0.04	-0.16
12	1	0.31	0.04	0.30	0.16	-0.05	-0.17	0.36	-0.10	-0.37
13	1	0.27	0.31	0.16	0.18	-0.25	-0.07	0.07	-0.40	-0.10
14	1	0.25	0.31	0.15	0.11	0.15	-0.25	0.20	0.32	-0.17

77 r5on

0 1 -234.584440

C		1.01976900	0.49328300	-0.32901200
C		-0.30744500	0.92986300	0.27729400
O		-1.38475000	0.06294600	-0.12061300
B		-1.76909200	-1.16730200	-0.04334200
N		1.42039800	-0.81782200	0.16048300
H		1.74337100	1.29691800	-0.11750100
H		0.90525300	0.44291800	-1.41446500
H		-0.57668400	1.93021300	-0.06364300
H		-0.26569100	0.92799600	1.36886200
H		2.04011200	-1.30004600	-0.47699900
H		1.86037000	-0.77917300	1.07228500

		1			2				3		
		A			A				A		
Frequencies --		75.1286			104.7300				167.7288		
Red. masses --		6.2500			3.8039				1.1463		
Frc consts --		0.0208			0.0246				0.0190		
IR Inten --		0.6123			1.2634				25.2518		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	-0.06	-0.05	-0.06	0.04	0.08	0.12	-0.02	0.00	0.02	
2	6	0.01	0.14	-0.06	-0.04	0.04	-0.02	-0.02	0.00	0.02	
3	8	-0.05	0.08	0.26	0.04	0.00	-0.18	0.00	0.01	-0.06	
4	5	0.46	-0.12	-0.26	0.21	-0.04	0.28	0.04	0.00	0.03	

5	7	-0.22	-0.06	0.04	-0.19	-0.08	-0.13	0.00	0.01	0.05
6	1	0.05	-0.13	-0.14	0.07	-0.03	0.44	0.00	-0.02	-0.01
7	1	-0.09	-0.14	-0.05	0.23	0.34	0.08	-0.04	0.00	0.02
8	1	0.01	0.08	-0.27	-0.02	0.04	-0.02	-0.01	0.02	0.06
9	1	0.09	0.40	-0.06	-0.16	0.02	-0.01	-0.04	-0.06	0.02
10	1	-0.35	-0.24	0.06	-0.03	0.06	-0.08	-0.59	-0.33	-0.27
11	1	-0.19	-0.06	0.03	-0.46	-0.37	0.01	0.61	0.08	-0.26

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	233.3801	319.8012	507.5963
Red. masses --	2.8840	3.1726	2.2116
Frc consts --	0.0926	0.1912	0.3357
IR Inten --	4.1370	1.0138	16.5260

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.08	0.09	0.07	-0.06	0.05	-0.13	0.16	0.08	-0.08
2	6	-0.01	0.10	-0.11	0.08	-0.01	0.12	0.08	-0.13	-0.07
3	8	0.14	-0.15	0.13	0.23	-0.09	-0.05	-0.14	0.01	0.04
4	5	-0.20	-0.03	-0.06	-0.03	0.01	-0.02	-0.02	-0.04	0.01
5	7	-0.08	0.00	-0.04	-0.21	0.07	0.06	-0.07	0.08	0.04
6	1	0.09	0.02	0.32	0.07	0.00	-0.40	0.06	0.08	0.26
7	1	0.28	0.25	0.05	-0.31	-0.12	-0.10	0.49	0.22	-0.12
8	1	-0.10	-0.03	-0.41	-0.08	0.05	0.41	0.00	-0.04	0.27
9	1	-0.06	0.42	-0.11	0.21	-0.31	0.12	0.30	-0.42	-0.08
10	1	-0.34	-0.13	-0.19	-0.17	-0.07	0.21	-0.25	-0.27	0.13
11	1	0.12	-0.14	-0.13	-0.28	0.21	0.09	-0.12	0.07	0.06

0 3 -234.511732

C	-0.57911300	1.00346300	0.04248200
C	0.95270600	0.71801100	0.04781800
O	1.11764200	-0.68206800	-0.17388100
B	-0.02861500	-1.33151500	0.31278500
N	-1.21412500	-0.37190500	-0.08693800
H	-0.89916100	1.62384100	-0.80057400

H	-0.91670600	1.44757700	0.97679800
H	1.38045300	0.99860000	1.01626300
H	1.46591300	1.26327000	-0.74815600
H	-2.02473700	-0.47120500	0.51645600
H	-1.54650600	-0.47347400	-1.06689400

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		67.2212			314.6043			609.6101		
Red. masses --		1.7508			3.1313			4.9741		
Frc consts --		0.0047			0.1826			1.0891		
IR Inten --		5.1323			9.1385			12.4437		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	0.14	0.00	-0.01	-0.03	-0.07	-0.14	0.01
2	6	0.00	0.02	-0.14	0.00	0.03	-0.07	0.04	-0.11	0.02
3	8	0.01	-0.02	0.09	0.10	0.00	0.22	0.26	-0.07	-0.05
4	5	-0.03	0.02	0.04	-0.05	-0.08	-0.31	0.07	0.32	0.10
5	7	0.02	0.00	-0.10	-0.06	0.02	0.07	-0.28	0.06	-0.10
6	1	-0.15	0.22	0.36	-0.03	-0.07	-0.06	-0.01	0.14	0.18
7	1	0.12	-0.30	0.32	0.05	0.09	-0.06	0.06	-0.30	0.13
8	1	0.20	0.23	-0.29	0.07	0.27	-0.17	-0.10	-0.16	0.09
9	1	-0.18	-0.13	-0.35	-0.07	-0.12	-0.22	0.01	0.08	0.12
10	1	-0.10	-0.04	-0.28	0.21	-0.03	0.43	-0.01	0.01	0.25
11	1	0.23	0.08	-0.19	-0.56	0.19	0.19	-0.62	0.00	0.02

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		659.1828			723.5549			794.5438		
Red. masses --		5.9857			4.5139			1.2407		
Frc consts --		1.5324			1.3923			0.4615		
IR Inten --		25.3903			104.6791			1.9310		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.23	-0.22	0.01	0.09	-0.06	-0.06	0.01	-0.03	0.07
2	6	0.25	0.13	0.04	0.08	0.04	-0.01	0.01	0.00	0.04

3	8	-0.19	0.18	0.01	-0.05	0.16	0.01	0.04	0.00	-0.02
4	5	-0.22	0.22	-0.02	0.18	-0.38	0.13	0.02	-0.02	-0.01
5	7	-0.07	-0.26	-0.03	-0.23	0.09	-0.08	-0.09	0.01	0.02
6	1	0.22	-0.28	-0.03	0.10	0.28	0.21	0.34	-0.29	-0.25
7	1	0.08	-0.26	-0.03	0.24	-0.28	0.10	-0.25	0.36	-0.20
8	1	0.38	0.17	-0.02	-0.01	0.14	0.02	0.33	0.14	-0.15
9	1	0.16	0.10	-0.06	0.14	0.04	0.02	-0.31	-0.03	-0.20
10	1	0.06	-0.10	0.16	-0.20	0.48	0.03	-0.28	-0.01	-0.25
11	1	-0.32	-0.12	-0.02	-0.25	-0.17	0.07	0.20	0.11	-0.09

78 r5pme

0 1 -522.119547

C		1.94822600	-0.68556400	0.18496900
B		0.61996600	-1.18408000	0.33668200
P		-0.77035100	-0.28593700	-0.59192600
C		0.36692400	1.09833000	-0.18238500
C		1.65211100	0.74018900	0.13744100
C		-2.19439100	0.06648300	0.56840800
H		2.94756700	-1.09084500	0.18422800
H		-0.02837800	2.09317500	-0.00373600
H		2.38789400	1.48722400	0.43022600
H		-2.75223400	0.91972900	0.17465300
H		-2.86270100	-0.79608600	0.57212000
H		-1.87393400	0.27962800	1.58739700

	1	2	3
	A	A	A

Frequencies --	137.0680	167.1343	210.3197
Red. masses --	3.3258	1.1112	2.3961
Frc consts --	0.0368	0.0183	0.0624
IR Inten --	4.8161	0.2233	1.7731

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	0.01	-0.19	0.01	0.03	0.00	-0.04	-0.04	0.10

2	5	0.04	-0.01	0.13	0.02	-0.01	0.00	-0.07	0.04	0.05
3	15	0.04	0.00	0.13	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.09	0.02
4	6	0.00	0.00	0.13	-0.03	-0.02	0.00	0.08	0.06	-0.08
5	6	0.07	0.00	-0.10	-0.02	0.02	0.00	0.07	-0.02	-0.10
6	6	-0.20	0.01	-0.19	0.02	0.05	0.00	-0.06	-0.20	0.03
7	1	0.01	-0.04	-0.42	0.02	0.05	0.01	-0.06	-0.10	0.18
8	1	0.01	-0.02	0.24	-0.06	-0.03	0.00	0.20	0.14	-0.28
9	1	0.12	-0.01	-0.22	-0.04	0.04	0.01	0.17	-0.05	-0.29
10	1	-0.08	0.03	-0.32	0.40	0.42	0.27	-0.05	-0.08	0.28
11	1	-0.22	0.03	-0.38	-0.33	0.31	-0.38	-0.05	-0.22	-0.33
12	1	-0.46	-0.01	-0.11	0.01	-0.46	0.11	-0.14	-0.56	0.12

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 350.9139 400.8425 488.7177

Red. masses -- 4.8497 5.1038 3.0817

Frc consts -- 0.3519 0.4832 0.4337

IR Inten -- 25.7592 10.7699 8.3075

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.24	0.02	-0.14	0.13	-0.04	-0.07	0.01	0.05	0.17
2	5	-0.20	-0.02	0.35	-0.02	0.45	0.17	-0.02	-0.04	-0.05
3	15	0.12	0.00	-0.09	-0.12	-0.06	-0.11	-0.02	0.01	-0.06
4	6	-0.07	0.05	0.09	0.11	-0.10	0.04	-0.08	-0.10	0.25
5	6	-0.05	0.03	-0.03	0.15	-0.04	0.03	0.09	0.02	-0.23
6	6	0.21	-0.05	0.00	-0.05	-0.03	0.03	0.03	0.02	-0.01
7	1	-0.28	-0.11	-0.49	0.04	-0.24	-0.07	-0.02	-0.02	0.36
8	1	-0.13	0.01	0.17	0.02	-0.23	0.59	-0.14	-0.15	0.41
9	1	0.02	-0.03	-0.08	-0.01	0.00	0.36	0.15	0.12	-0.62
10	1	0.12	-0.02	0.20	-0.10	0.00	0.17	0.05	0.03	-0.02
11	1	0.23	-0.06	0.05	-0.03	-0.05	0.02	-0.02	0.06	0.12
12	1	0.39	-0.16	-0.03	0.04	-0.14	0.02	0.15	0.08	-0.06

0 3 -522.101380

C -1.76346900 -0.69902400 -0.05737200

B	-0.49908900	-1.25172700	0.59156700
P	0.68547900	0.23421400	0.87077100
C	-0.36411800	1.22710800	-0.22727500
C	-1.61041500	0.63526400	-0.46727700
C	2.29044900	-0.04426900	-0.03989900
H	-2.70863800	-1.21142900	-0.20753900
H	-0.12998700	2.23618400	-0.55127900
H	-2.41079600	1.19201200	-0.95006200
H	2.85369100	0.89015500	-0.07281100
H	2.87560200	-0.77027900	0.52784400
H	2.14462600	-0.41644100	-1.05392100

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		117.9414			144.1671			206.0857		
Red. masses --		3.4462			1.0770			2.7810		
Frc consts --		0.0282			0.0132			0.0696		
IR Inten --		6.6476			0.1640			1.6892		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.10	-0.06	-0.13	0.00	0.01	-0.02	-0.06	0.06	0.05
2	5	0.04	0.04	0.07	-0.02	-0.01	0.00	-0.12	-0.03	0.12
3	15	0.01	0.07	0.14	0.00	-0.02	0.02	0.00	-0.09	0.05
4	6	-0.02	0.05	0.10	0.02	0.00	0.02	0.11	-0.08	-0.03
5	6	0.07	-0.04	-0.10	0.02	0.02	-0.01	0.09	-0.01	-0.11
6	6	-0.19	-0.12	-0.19	-0.01	0.02	-0.02	-0.04	0.21	-0.10
7	1	0.17	-0.13	-0.30	-0.01	0.03	-0.04	-0.10	0.14	0.07
8	1	-0.05	0.07	0.15	0.04	-0.01	0.03	0.24	-0.14	-0.12
9	1	0.11	-0.10	-0.23	0.03	0.03	-0.02	0.19	0.00	-0.27
10	1	-0.05	-0.20	-0.28	-0.32	0.19	-0.51	-0.12	0.28	0.16
11	1	-0.18	-0.23	-0.35	0.29	0.47	0.23	0.08	0.08	-0.39
12	1	-0.46	-0.06	-0.18	-0.01	-0.46	0.15	-0.09	0.54	-0.21
		4			5			6		
		A			A			A		

Frequencies --	378.9584	445.8369	458.3140
Red. masses --	4.7151	8.4021	2.9338
Frc consts --	0.3990	0.9840	0.3631
IR Inten --	5.4730	0.4080	1.4937

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	-0.04	-0.14	0.35	0.02	0.07	-0.05	0.08	0.21
2	5	-0.20	0.08	0.34	0.15	-0.15	0.25	0.11	0.01	-0.14
3	15	0.07	-0.04	-0.11	-0.23	-0.07	-0.21	0.00	-0.04	0.01
4	6	-0.14	0.10	0.22	0.12	0.21	0.04	-0.10	0.09	0.09
5	6	-0.03	-0.03	-0.09	0.22	0.05	0.05	0.04	-0.07	-0.24
6	6	0.17	-0.01	-0.02	-0.24	0.01	0.06	0.01	-0.02	0.01
7	1	0.04	-0.10	-0.34	0.27	0.13	0.17	-0.10	0.11	0.46
8	1	-0.28	0.22	0.48	0.13	0.27	0.26	-0.25	0.22	0.39
9	1	0.02	-0.06	-0.20	0.07	-0.07	0.17	0.11	-0.20	-0.50
10	1	0.13	0.02	0.09	-0.24	0.02	0.09	0.04	-0.04	-0.03
11	1	0.10	0.02	0.09	-0.26	0.03	0.10	-0.03	0.00	0.08
12	1	0.33	-0.01	-0.04	-0.14	0.01	0.05	0.04	-0.09	0.03

79 r5pme2

0 1 -563.784129

C	-1.96303300	-0.29796800	-0.78227700
B	-0.65124800	-0.22885900	-1.70407400
P	0.60419400	-0.06823600	-0.13678800
C	-0.54112400	-0.18959400	1.32273800
C	-1.89901600	0.20510200	0.69575000
C	1.24580400	1.64994000	-0.15501200
C	2.06874100	-1.14567300	0.08138300
H	-2.87319900	0.05043800	-1.27828200
H	-2.05487200	-1.40754200	-0.77643400
H	-0.25589500	0.43264200	2.17450000
H	2.64008500	-0.87299600	0.97119400
H	-2.72465500	-0.18716200	1.29774900
H	-2.00085800	1.29579300	0.70729700

H	0.41296900	2.34425300	-0.28440000
H	1.91889800	1.76917600	-1.00488000
H	1.77092900	1.88377300	0.77352600
H	1.74541500	-2.18499000	0.16456700
H	-0.55558000	-1.23279000	1.65471500
H	2.70187200	-1.05360300	-0.80285200

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		73.5641			142.6563			159.1038		
Red. masses --		2.8043			1.1346			1.4689		
Frc consts --		0.0089			0.0136			0.0219		
IR Inten --		0.4648			3.6848			3.1489		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.19	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.04	-0.01
2	5	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.07	0.00	0.02	-0.09	0.01
3	15	0.00	-0.11	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.02
4	6	0.01	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.01	0.00
5	6	0.05	0.09	0.02	-0.02	-0.06	0.01	0.02	0.09	-0.05
6	6	-0.19	-0.03	-0.07	0.02	0.00	-0.03	-0.03	0.00	0.10
7	6	0.13	0.08	0.07	-0.02	-0.02	0.00	0.03	0.01	-0.09
8	1	0.06	0.37	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.06	-0.04
9	1	-0.18	0.21	-0.08	0.04	0.00	-0.07	-0.02	-0.03	0.10
10	1	0.07	-0.21	0.05	-0.02	0.02	0.00	-0.03	-0.02	0.02
11	1	0.13	0.25	0.02	0.25	0.26	-0.25	0.30	0.22	-0.33
12	1	0.01	0.14	-0.01	0.00	-0.14	-0.01	-0.03	0.23	-0.03
13	1	0.18	0.10	0.10	-0.09	-0.07	0.06	0.13	0.10	-0.15
14	1	-0.26	-0.14	-0.22	0.07	-0.01	-0.33	-0.06	0.02	0.41
15	1	-0.11	-0.02	0.00	0.25	-0.11	0.13	-0.23	0.14	-0.05
16	1	-0.33	0.10	-0.02	-0.21	0.11	0.08	0.20	-0.13	0.00
17	1	0.26	0.05	0.20	-0.07	0.04	0.47	0.03	0.04	0.26
18	1	-0.10	-0.14	-0.10	0.04	0.01	0.02	-0.11	0.00	-0.02
19	1	0.09	0.06	0.04	-0.26	-0.37	-0.21	-0.24	-0.22	-0.30

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		171.0552			201.1904			229.9206		
Red. masses --		1.3426			2.8112			2.4273		
Frc consts --		0.0231			0.0670			0.0756		
IR Inten --		1.9257			1.4560			0.6007		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.05	-0.02	0.10	0.07	-0.06	0.04	-0.03	0.04
2	5	-0.02	0.07	-0.02	0.20	0.01	0.10	-0.01	0.04	-0.05
3	15	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.09	0.04	0.03	-0.07
4	6	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.05	0.08	0.10	-0.02	-0.05
5	6	-0.03	-0.08	0.03	-0.02	-0.05	0.00	0.10	0.03	0.01
6	6	0.04	-0.02	-0.06	-0.13	0.04	-0.11	-0.15	0.10	0.04
7	6	0.01	0.02	0.09	-0.06	-0.11	-0.13	-0.12	-0.14	0.11
8	1	-0.01	0.09	0.01	0.15	0.12	-0.10	-0.02	-0.13	0.08
9	1	-0.01	0.05	-0.12	0.08	0.07	-0.15	0.14	-0.04	0.09
10	1	-0.01	0.01	-0.01	-0.07	0.15	0.03	0.14	-0.06	-0.03
11	1	0.02	0.17	0.04	0.05	-0.33	-0.14	-0.14	-0.15	0.13
12	1	0.01	-0.20	0.00	-0.02	-0.19	-0.09	0.10	0.09	0.05
13	1	-0.12	-0.09	0.12	-0.15	-0.06	0.09	0.14	0.03	-0.03
14	1	0.00	0.03	0.41	-0.25	-0.08	-0.03	-0.29	-0.05	0.14
15	1	-0.35	0.06	-0.36	-0.30	0.05	-0.24	-0.21	0.31	0.03
16	1	0.47	-0.16	-0.27	-0.01	0.19	-0.22	-0.18	0.11	0.05
17	1	0.01	0.03	0.28	-0.17	-0.09	-0.29	-0.36	-0.06	0.24
18	1	0.07	-0.01	0.01	0.03	0.09	0.18	0.09	-0.03	-0.10
19	1	-0.01	-0.12	0.07	-0.14	-0.03	-0.18	-0.02	-0.42	0.16

0 3 -563.788486

C	-2.10943700	-0.46011800	-0.66704800
B	-0.69629200	-0.56815900	-1.40736700
P	0.60495000	-0.07379200	-0.17621500
C	-0.56230100	0.23281300	1.23426700
C	-1.93421800	0.48055500	0.56132700

C	1.61735700	1.44654100	-0.46681800
C	1.89208400	-1.27636900	0.38162800
H	-2.90569500	-0.07690700	-1.31522300
H	-2.45927900	-1.44649100	-0.32433400
H	-0.24407300	1.05667300	1.87890600
H	2.47623500	-0.88060100	1.21689100
H	-2.73645400	0.35581000	1.29735800
H	-1.97512000	1.51984300	0.21925000
H	0.94961700	2.29302200	-0.63048700
H	2.21586500	1.30423500	-1.36941500
H	2.28107800	1.65679400	0.37623900
H	1.40641900	-2.20606000	0.68009000
H	-0.58578600	-0.67723800	1.84306200
H	2.56348900	-1.49194800	-0.45242000

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		91.4972			149.6023			166.1132		
Red. masses --		2.8017			1.3306			1.6046		
Frc consts --		0.0138			0.0175			0.0261		
IR Inten --		0.6334			0.3136			0.1456		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	-0.15	0.05	0.00	-0.05	0.03	-0.01	0.08	-0.06
2	5	-0.01	0.17	-0.06	0.00	-0.05	0.02	0.00	0.07	-0.02
3	15	0.00	0.08	-0.03	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
4	6	0.00	0.09	-0.01	0.00	0.06	-0.01	0.01	-0.07	0.02
5	6	-0.07	-0.13	0.05	0.00	0.02	-0.03	-0.02	-0.08	0.08
6	6	0.17	-0.04	-0.02	0.01	0.02	0.09	0.01	-0.03	-0.10
7	6	-0.14	-0.05	0.03	-0.01	-0.03	-0.09	0.01	0.04	0.09
8	1	-0.10	-0.30	0.11	-0.02	-0.11	0.02	0.04	0.23	-0.04
9	1	0.26	-0.23	0.05	0.04	-0.04	0.09	-0.10	0.07	-0.21
10	1	-0.06	0.18	-0.11	-0.01	0.09	-0.05	-0.01	-0.10	0.06
11	1	-0.18	-0.13	0.10	0.26	0.02	-0.31	0.13	0.20	-0.07

12	1	-0.01	-0.28	0.09	0.00	0.06	-0.02	0.01	-0.23	0.08
13	1	-0.25	-0.14	0.06	0.00	0.00	-0.09	-0.09	-0.03	0.22
14	1	0.29	0.05	0.01	0.02	-0.04	-0.26	0.01	-0.09	-0.47
15	1	0.13	-0.11	-0.04	0.35	-0.06	0.33	0.23	-0.23	0.07
16	1	0.23	-0.15	-0.04	-0.30	0.17	0.30	-0.20	0.20	0.00
17	1	-0.26	-0.01	-0.04	-0.05	0.07	0.18	-0.01	0.14	0.37
18	1	0.15	0.15	0.08	0.00	0.09	0.04	0.06	-0.11	-0.03
19	1	-0.08	-0.08	0.09	-0.26	-0.26	-0.23	-0.11	-0.19	0.06
			4			5			6	
			A			A			A	
Frequencies --		181.8519			224.4299			246.8196		
Red. masses --		1.0961			2.2456			1.9658		
Frc consts --		0.0214			0.0666			0.0706		
IR Inten --		0.3583			1.1451			0.5487		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.00	-0.03	-0.03	0.04	-0.08	0.02	0.06	-0.05
2	5	0.03	0.00	0.01	0.03	-0.09	0.09	0.04	-0.10	0.01
3	15	0.01	0.01	0.03	-0.02	0.02	0.07	0.03	-0.02	-0.03
4	6	-0.02	0.01	0.01	-0.06	0.09	0.04	0.09	0.12	-0.02
5	6	-0.01	-0.02	-0.01	-0.10	-0.06	0.02	0.01	-0.07	0.06
6	6	-0.01	0.01	-0.02	0.10	-0.07	-0.03	-0.10	0.08	0.03
7	6	-0.01	-0.02	-0.02	0.09	0.03	-0.14	-0.08	-0.09	0.03
8	1	0.04	0.02	-0.05	0.10	0.21	-0.16	0.12	0.25	-0.08
9	1	0.00	0.00	-0.06	-0.22	0.06	-0.22	-0.16	0.07	-0.20
10	1	-0.05	0.02	0.02	-0.13	0.20	-0.06	0.10	0.27	-0.22
11	1	0.31	0.10	-0.29	0.08	-0.08	-0.08	-0.14	-0.19	0.12
12	1	-0.02	-0.04	-0.03	-0.08	-0.22	0.01	0.08	-0.28	0.10
13	1	-0.02	-0.01	0.00	-0.22	-0.03	0.11	-0.18	-0.04	0.19
14	1	-0.03	0.06	0.32	0.21	0.00	-0.10	-0.24	-0.01	0.10
15	1	-0.31	0.12	-0.24	0.07	-0.23	-0.02	-0.09	0.25	0.01
16	1	0.27	-0.14	-0.20	0.14	-0.09	-0.06	-0.14	0.12	0.05
17	1	-0.06	0.12	0.36	0.23	-0.10	-0.33	-0.20	-0.06	-0.08
18	1	-0.02	0.01	0.02	0.01	0.17	0.16	0.22	0.25	0.18

19 1 -0.30 -0.34 -0.17 0.08 0.32 -0.22 0.00 -0.12 0.10

80 r6

0 1 -251.620374

C	-1.19612900	0.62713700	0.10389900
N	-1.19665300	-0.71901000	-0.10470600
B	0.00043300	-1.54928000	0.00010100
N	1.19667300	-0.71889300	0.10451600
C	1.19583300	0.62755200	-0.10380800
C	-0.00007700	1.32352900	-0.00016900
H	-2.12919800	1.12507200	0.34708400
H	-2.08554900	-1.15686800	-0.29087800
H	2.08587200	-1.15592800	0.29121100
H	2.12919400	1.12533200	-0.34621300
H	-0.00038500	2.40480700	0.00009200

	1	2	3
	A	A	A

Frequencies --	275.4642	380.0966	529.6096
Red. masses --	2.6431	5.0587	7.1527
Frc consts --	0.1182	0.4306	1.1820
IR Inten --	210.5378	20.4950	135.4886

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.02	0.17	-0.05	0.01	-0.10	-0.17	0.01	-0.14
2	7	-0.02	-0.01	-0.16	0.05	0.04	-0.18	-0.22	-0.09	0.17
3	5	0.00	0.16	0.00	-0.02	0.00	0.44	0.00	0.48	0.00
4	7	0.02	-0.01	0.16	0.05	-0.04	-0.18	0.22	-0.09	-0.17
5	6	0.01	-0.02	-0.17	-0.05	-0.01	-0.10	0.17	0.01	0.14
6	6	0.00	-0.06	0.00	0.01	0.00	0.28	0.00	-0.24	0.00
7	1	0.06	-0.08	0.52	-0.12	-0.01	-0.33	-0.06	0.19	-0.08
8	1	0.02	0.00	-0.38	0.10	-0.01	-0.30	-0.05	-0.20	-0.33
9	1	-0.02	0.00	0.39	0.10	0.01	-0.29	0.05	-0.20	0.33
10	1	-0.06	-0.07	-0.52	-0.12	0.01	-0.33	0.07	0.19	0.08

11	1	0.00	-0.05	0.00	0.04	0.00	0.43	0.00	-0.23	0.00
			4			5			6	
			A			A			A	
Frequencies --		540.2963			591.0494			692.4115		
Red. masses --		2.5466			4.9124			1.6729		
Frc consts --		0.4380			1.0111			0.4726		
IR Inten --		30.5972			18.1447			53.4074		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.07	0.10	-0.08	-0.18	0.14	0.12	0.05	0.00	0.01
2	7	0.07	0.03	0.14	0.15	0.20	-0.09	0.11	-0.05	0.09
3	5	0.04	0.00	-0.15	0.14	0.00	0.03	0.00	0.03	0.00
4	7	0.07	-0.03	0.14	0.15	-0.20	-0.09	-0.10	-0.05	-0.09
5	6	-0.07	-0.10	-0.08	-0.18	-0.14	0.12	-0.05	0.00	-0.01
6	6	-0.05	0.00	0.12	-0.13	0.00	-0.15	0.00	0.07	0.00
7	1	-0.18	0.10	-0.52	-0.21	-0.01	0.31	-0.02	-0.07	-0.10
8	1	0.15	0.05	-0.31	0.16	-0.01	0.33	0.20	0.07	-0.64
9	1	0.15	-0.05	-0.31	0.16	0.01	0.33	-0.20	0.07	0.64
10	1	-0.18	-0.10	-0.52	-0.21	0.01	0.31	0.02	-0.07	0.10
11	1	0.06	0.00	-0.01	0.15	0.00	-0.30	0.00	0.07	0.00

0 3 -251.629456

C	1.21341000	0.65345800	0.00005000
N	1.21587400	-0.76056100	-0.00037500
B	0.00000200	-1.48124900	0.00000200
N	-1.21587300	-0.76056200	0.00037300
C	-1.21341200	0.65345500	-0.00005100
C	-0.00000200	1.32201000	0.00000100
H	2.16996300	1.15533700	0.00070700
H	2.11302200	-1.21740500	0.00060500
H	-2.11301900	-1.21741000	-0.00060700
H	-2.16996400	1.15533300	-0.00070700
H	-0.00000300	2.40471200	0.00000100

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		268.2505			370.5940			505.0575		
Red. masses --		3.6632			6.4149			1.1792		
Frc consts --		0.1553			0.5191			0.1772		
IR Inten --		0.0000			26.1180			0.0003		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.24	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	0.00
2	7	0.00	0.00	-0.23	0.00	0.00	0.26	0.00	0.00	-0.08
3	5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.53	0.00	0.00	0.00
4	7	0.00	0.00	0.23	0.00	0.00	0.26	0.00	0.00	0.08
5	6	0.00	0.00	-0.24	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.23	0.00	0.00	0.00
7	1	0.00	0.00	0.53	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.04
8	1	0.00	0.00	-0.34	0.00	0.00	-0.27	0.00	0.00	0.70
9	1	0.00	0.00	0.34	0.00	0.00	-0.27	0.00	0.00	-0.70
10	1	0.00	0.00	-0.53	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.04
11	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.60	0.00	0.00	0.00
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		506.1341			538.7865			567.1424		
Red. masses --		1.5064			6.8121			1.1610		
Frc consts --		0.2274			1.1651			0.2200		
IR Inten --		105.3568			1.7945			21.5374		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.10	0.25	0.23	0.00	0.00	0.00	0.00
2	7	0.00	0.00	0.07	-0.23	0.23	0.00	0.00	0.00	0.00
3	5	0.00	0.00	0.04	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05
4	7	0.00	0.00	0.07	-0.23	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.00
5	6	0.00	0.00	-0.10	0.25	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.00
6	6	0.00	0.00	0.12	0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.11
7	1	0.00	0.00	-0.16	0.34	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.65
8	1	0.00	0.00	-0.66	-0.33	0.02	0.01	0.00	0.00	0.24

9	1	0.00	0.00	-0.66	-0.33	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.24
10	1	0.00	0.00	-0.16	0.34	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.65
11	1	0.00	0.00	0.21	-0.22	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.16

81 r6me2

0 1 -330.203846

C		-1.16731100	1.01791500	0.28881700
N		-1.21795900	-0.32798500	0.05050300
B		-0.00006400	-1.09874700	0.00000300
N		1.21786400	-0.32820500	-0.05056500
C		1.16737900	1.01783200	-0.28875200
C		0.00008300	1.71063300	-0.00001900
C		-2.52274300	-0.95516800	-0.15410200
C		2.52269600	-0.95515500	0.15413800
H		-2.04145300	1.51120300	0.70312800
H		2.04159700	1.51092100	-0.70312500
H		0.00007600	2.79285600	-0.00015900
H		-2.34847400	-1.95555800	-0.55173800
H		-3.07253800	-1.04951100	0.78741200
H		-3.11856000	-0.36716300	-0.85923400
H		3.11711600	-0.36892700	0.86194400
H		2.34856400	-1.95684000	0.54851600
H		3.07403000	-1.04625200	-0.78682000

	1	2	3
	A	A	A

Frequencies --	125.8180	130.8342	179.3327
Red. masses --	1.1767	1.1171	2.3572
Frc consts --	0.0110	0.0113	0.0447
IR Inten --	2.3063	1.6639	29.2675

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.05	0.04	-0.03	0.19
2	7	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.02	0.07

3	5	0.01	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.01
4	7	0.00	0.01	0.03	0.00	-0.01	-0.03	0.00	-0.02	-0.08
5	6	-0.01	0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.04	-0.04	-0.02	-0.19
6	6	-0.01	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00
7	6	0.01	0.01	-0.06	-0.01	0.03	-0.02	0.01	0.04	-0.11
8	6	0.01	-0.01	-0.07	0.01	0.03	0.02	-0.01	0.04	0.12
9	1	-0.02	-0.01	0.00	0.03	-0.02	0.09	0.12	-0.06	0.39
10	1	-0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.02	-0.09	-0.12	-0.05	-0.38
11	1	-0.02	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.01
12	1	0.03	-0.11	0.26	-0.02	-0.12	0.35	0.01	0.13	-0.34
13	1	-0.20	0.33	-0.15	-0.21	0.40	-0.10	-0.03	-0.19	-0.15
14	1	0.20	-0.16	-0.36	0.18	-0.15	-0.34	0.04	0.21	0.01
15	1	0.21	0.17	-0.39	-0.16	-0.14	0.31	-0.05	0.23	-0.01
16	1	0.03	0.12	0.29	0.03	-0.11	-0.33	-0.02	0.14	0.39
17	1	-0.22	-0.36	-0.16	0.19	0.38	0.09	0.04	-0.22	0.18

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	179.5887	286.1324	391.5751
Red. masses --	2.4332	2.6614	3.7745
Frc consts --	0.0462	0.1284	0.3410
IR Inten --	12.7982	12.5778	0.3783

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.04	0.00	-0.02	0.08	0.02	-0.03	0.11	-0.05
2	7	-0.01	0.02	0.12	0.01	0.06	0.07	-0.05	0.13	-0.14
3	5	-0.02	0.00	0.23	0.00	0.13	0.00	-0.09	0.00	0.20
4	7	-0.01	-0.02	0.11	-0.01	0.06	-0.07	-0.05	-0.13	-0.14
5	6	-0.03	-0.04	-0.02	0.02	0.08	-0.02	-0.03	-0.11	-0.05
6	6	-0.01	0.00	-0.05	0.00	0.06	0.00	0.12	0.00	0.21
7	6	0.04	0.01	-0.15	0.14	-0.18	-0.02	0.04	-0.11	0.00
8	6	0.04	0.00	-0.13	-0.14	-0.18	0.02	0.04	0.11	0.00
9	1	-0.04	0.08	-0.09	0.00	0.08	0.04	-0.03	0.15	-0.11
10	1	-0.05	-0.09	-0.14	0.00	0.08	-0.04	-0.03	-0.15	-0.11
11	1	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.06	0.00	0.28	0.00	0.35

12	1	0.13	0.14	-0.45	0.40	-0.17	0.09	0.23	-0.13	0.14
13	1	-0.02	-0.33	-0.22	0.05	-0.22	-0.07	0.11	-0.11	0.04
14	1	0.06	0.19	-0.01	0.10	-0.36	-0.14	-0.12	-0.33	-0.05
15	1	0.05	-0.16	-0.01	-0.10	-0.36	0.14	-0.12	0.33	-0.05
16	1	0.13	-0.12	-0.41	-0.40	-0.17	-0.09	0.23	0.13	0.14
17	1	-0.02	0.31	-0.20	-0.05	-0.22	0.08	0.11	0.11	0.04

0 3 -330.206743

C		1.22335900	1.04419800	0.05182900
N		1.17673300	-0.25082300	-0.50540100
B		-0.06115800	-0.93479400	-0.52985800
N		-1.23449500	-0.34197200	-0.00785900
C		-1.15048300	0.95452700	0.54163900
C		0.06730500	1.61358300	0.55888000
C		2.42030200	-0.80508400	-1.02448100
C		-2.53834600	-0.99228500	-0.00107100
H		2.18150800	1.54542400	0.05674500
H		-2.06215200	1.38534400	0.93230200
H		0.11721600	2.60850400	0.98302900
H		2.23226700	-1.80216200	-1.42122800
H		2.82208400	-0.17747200	-1.82822500
H		3.17520800	-0.87872700	-0.23326600
H		-3.26890000	-0.40832800	-0.57255900
H		-2.45089800	-1.97976500	-0.45295400
H		-2.91207900	-1.10678700	1.02291100

1	2	3
A	A	A

Frequencies --	123.3808	143.9028	167.3176
Red. masses --	1.7408	1.9041	1.3506
Frc consts --	0.0156	0.0232	0.0223
IR Inten --	3.0592	0.0155	0.0414

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

1	6	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.06	0.13	0.02	-0.04	0.10
2	7	0.02	-0.03	0.08	0.02	-0.04	0.10	0.00	0.00	0.00
3	5	0.03	-0.05	0.12	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01
4	7	0.02	-0.04	0.09	-0.02	0.04	-0.09	0.00	0.01	-0.02
5	6	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.06	-0.13	-0.02	0.04	-0.10
6	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	6	-0.02	0.05	-0.11	-0.02	0.04	-0.09	-0.01	0.02	-0.05
8	6	-0.03	0.05	-0.11	0.02	-0.03	0.07	0.01	-0.03	0.06
9	1	0.00	0.00	-0.01	0.05	-0.11	0.25	0.04	-0.08	0.18
10	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.11	-0.25	-0.04	0.08	-0.17
11	1	-0.01	0.02	-0.05	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01
12	1	0.03	-0.05	0.12	0.03	-0.07	0.16	-0.09	0.17	-0.39
13	1	-0.30	-0.04	-0.32	-0.29	-0.07	-0.31	0.13	0.24	0.19
14	1	0.17	0.30	-0.27	0.17	0.31	-0.25	-0.09	-0.32	0.00
15	1	0.17	-0.05	-0.46	-0.14	0.06	0.37	0.05	-0.26	-0.23
16	1	0.04	-0.07	0.17	-0.04	0.08	-0.17	0.10	-0.19	0.43
17	1	-0.31	0.34	-0.19	0.25	-0.29	0.13	-0.09	0.33	0.06

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	197.6435	274.6805	334.6585
Red. masses --	1.4416	2.6158	3.7667
Frc consts --	0.0332	0.1163	0.2486
IR Inten --	4.6909	1.4820	0.0002

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.01	0.02	0.07	0.02	-0.03	0.06	-0.14
2	7	-0.01	0.03	-0.06	0.00	0.06	0.03	0.06	-0.12	0.26
3	5	-0.03	0.05	-0.12	0.01	0.10	0.04	0.00	0.00	0.00
4	7	-0.01	0.03	-0.06	0.01	0.07	0.03	-0.06	0.11	-0.26
5	6	0.00	-0.01	0.02	-0.01	0.07	0.03	0.03	-0.06	0.14
6	6	0.01	-0.02	0.06	0.00	0.06	0.03	0.00	0.00	0.00
7	6	0.01	-0.03	0.06	-0.15	-0.17	-0.04	0.00	0.01	-0.02
8	6	0.01	-0.02	0.05	0.13	-0.16	-0.10	0.00	-0.01	0.02
9	1	0.01	-0.02	0.05	0.02	0.07	0.02	-0.08	0.16	-0.38

10	1	0.01	-0.03	0.06	-0.01	0.07	0.04	0.08	-0.17	0.38
11	1	0.03	-0.06	0.13	0.00	0.06	0.03	0.00	0.00	0.00
12	1	0.10	-0.20	0.46	-0.40	-0.15	0.02	-0.05	0.11	-0.25
13	1	-0.09	-0.30	-0.21	-0.09	-0.30	-0.12	-0.13	0.22	0.08
14	1	0.06	0.36	0.05	-0.09	-0.31	-0.11	0.12	-0.18	-0.15
15	1	0.01	-0.26	-0.19	0.05	-0.30	-0.15	-0.14	-0.22	-0.02
16	1	0.09	-0.17	0.39	0.39	-0.12	-0.14	0.05	-0.11	0.24
17	1	-0.04	0.31	0.07	0.06	-0.31	-0.14	0.15	0.19	0.10

82 r6p

0 1 -824.770573

C		-1.23699100	1.10169600	0.00013900
P		-1.35190500	-0.62593000	-0.00003600
B		-0.00075300	-1.85886000	0.00003400
P		1.35161800	-0.62640500	-0.00021100
C		1.23760300	1.10069700	0.00006500
C		0.00049900	1.75207000	-0.00002500
H		-2.14547400	1.69778500	0.00034000
H		-2.72422200	-0.93904400	0.00030600
H		2.72375400	-0.94033800	0.00237200
H		2.14639700	1.69632600	-0.00037400
H		0.00095300	2.83780600	-0.00018200

		1	2	3							
		A	A	A							
Frequencies --		154.3188	195.0042	319.9316							
Red. masses --		2.9672	8.3072	12.4108							
Frc consts --		0.0416	0.1861	0.7485							
IR Inten --		0.0001	2.1241	1.7290							
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	0.00	0.00	0.25	0.00	0.00	-0.07	0.12	0.07	0.00	
2	15	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.20	0.35	0.02	0.00	
3	5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.67	0.00	-0.53	0.00	

C	-0.00073200	1.69300100	-0.00015300
H	-2.10954400	1.72629500	-0.31595300
H	-2.48749800	-1.06810800	-0.84787100
H	2.48722400	-1.06632100	0.84909100
H	2.10795400	1.72789100	0.31655500
H	-0.00122600	2.78169400	-0.00022000

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		167.5961			193.3166			247.6706		
Red. masses --		2.3222			3.6294			6.6299		
Frc consts --		0.0384			0.0799			0.2396		
IR Inten --		45.9245			1.0542			0.0032		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.08	-0.03	0.01	-0.05	0.05	0.29	0.03	0.04	0.06
2	15	-0.07	-0.04	-0.04	-0.04	-0.03	-0.09	0.27	0.01	-0.08
3	5	0.04	0.00	0.24	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.27	0.01
4	15	-0.07	0.04	-0.04	0.04	-0.03	0.09	-0.27	0.01	0.08
5	6	0.08	0.03	0.01	0.05	0.05	-0.29	-0.04	0.03	-0.06
6	6	0.06	0.00	0.04	0.00	0.02	0.00	0.00	0.11	0.00
7	1	0.10	-0.01	-0.01	-0.07	0.08	0.55	-0.06	-0.07	0.14
8	1	0.44	-0.04	-0.50	0.08	0.12	-0.27	-0.36	0.11	0.45
9	1	0.44	0.04	-0.50	-0.08	0.12	0.26	0.36	0.11	-0.45
10	1	0.10	0.01	0.00	0.07	0.08	-0.55	0.05	-0.07	-0.14
11	1	0.03	0.00	0.08	0.00	0.02	0.00	0.00	0.10	0.01

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		266.9469			431.2778			483.9166		
Red. masses --		6.5422			2.6041			1.7547		
Frc consts --		0.2747			0.2854			0.2421		
IR Inten --		7.0543			34.4860			1.2598		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.19	-0.10	0.05	-0.09	0.10	0.15	-0.06	-0.05	0.00

2	15	-0.10	-0.11	0.11	0.02	0.02	0.00	-0.02	0.04	-0.04
3	5	-0.03	0.00	-0.42	0.06	0.00	-0.02	0.00	0.10	0.00
4	15	-0.11	0.11	0.11	0.02	-0.02	0.00	0.02	0.04	0.03
5	6	0.18	0.10	0.05	-0.10	-0.10	0.15	0.06	-0.05	0.00
6	6	0.15	0.00	-0.18	-0.04	0.00	-0.22	0.00	-0.17	0.00
7	1	0.21	-0.10	-0.12	-0.11	0.09	0.18	0.00	0.05	0.11
8	1	0.02	0.24	-0.17	0.37	0.07	-0.33	-0.51	-0.06	0.45
9	1	0.03	-0.24	-0.18	0.36	-0.07	-0.32	0.48	-0.06	-0.42
10	1	0.21	0.10	-0.12	-0.11	-0.09	0.18	0.00	0.05	-0.10
11	1	0.09	0.00	-0.53	0.10	0.00	-0.50	0.00	-0.17	-0.01

83 r6pme2

0 1 -903.385159

C	-1.24059800	1.35214900	0.01357700
P	-1.37035900	-0.37333900	-0.00593300
B	0.00000600	-1.56886900	-0.00000600
P	1.37036400	-0.37332300	0.00589100
C	1.24059500	1.35215400	-0.01356400
C	-0.00000700	1.99623600	0.00001000
C	-3.14010600	-0.86097600	-0.00165900
C	3.14010300	-0.86098300	0.00171500
H	-2.14016900	1.96119900	0.03216400
H	2.14015500	1.96121900	-0.03217300
H	-0.00000500	3.08242100	0.00000700
H	-3.26943800	-1.68971000	-0.69876900
H	-3.43385600	-1.20037700	0.99331000
H	-3.77471200	-0.02593000	-0.30267400
H	3.77483400	-0.02545400	0.30111800
H	3.26979300	-1.68862100	0.70006400
H	3.43337600	-1.20194900	-0.99285600

1

2

3

A

A

A

Frequencies --	30.2596	31.0343	91.0429
Red. masses --	1.0171	1.0492	3.3231
Frc consts --	0.0005	0.0006	0.0162
IR Inten --	0.0577	0.5019	6.3709

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.02
2	15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.11
3	5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.15
4	15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.11
5	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.02
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.02
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.24
8	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.24
9	1	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.08
10	1	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.08
11	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.07
12	1	0.11	-0.30	0.34	0.07	-0.22	0.25	0.16	-0.01	-0.26
13	1	-0.14	0.43	0.11	-0.09	0.32	0.08	-0.23	0.01	-0.31
14	1	0.03	-0.13	-0.44	0.02	-0.10	-0.32	0.07	-0.01	-0.40
15	1	-0.02	-0.10	0.33	0.03	0.13	-0.44	0.07	0.01	-0.40
16	1	-0.08	-0.22	-0.25	0.10	0.30	0.35	0.16	0.01	-0.26
17	1	0.10	0.31	-0.08	-0.13	-0.43	0.11	-0.23	-0.01	-0.31

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	96.0329	201.9455	214.1661
Red. masses --	2.9768	2.7410	10.2246
Frc consts --	0.0162	0.0659	0.2763
IR Inten --	0.2971	1.3328	7.2710

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.24	-0.02	0.06	0.01	-0.01	0.00	0.05
2	15	-0.01	0.00	0.07	0.00	0.06	-0.03	0.00	0.00	-0.19
3	5	0.00	0.01	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	0.00	0.80
4	15	0.01	0.00	-0.07	0.00	0.06	0.03	0.00	0.00	-0.19

5	6	0.00	0.00	-0.24	0.02	0.06	-0.01	-0.01	0.00	0.05
6	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00	-0.01	0.00	0.22
7	6	0.00	-0.01	-0.14	0.09	-0.22	0.02	0.00	0.00	-0.04
8	6	0.00	-0.01	0.14	-0.09	-0.22	-0.02	0.00	0.00	-0.04
9	1	0.01	0.00	0.51	-0.01	0.08	0.04	-0.01	-0.01	0.02
10	1	-0.01	0.00	-0.51	0.01	0.08	-0.04	-0.01	0.01	0.02
11	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00	0.44
12	1	0.09	0.05	-0.24	0.27	-0.26	0.03	-0.09	0.01	-0.03
13	1	-0.11	-0.11	-0.21	0.20	-0.29	0.03	0.10	0.01	-0.01
14	1	0.02	0.01	-0.14	-0.12	-0.37	0.03	-0.01	0.01	0.01
15	1	-0.02	0.01	0.14	0.12	-0.37	-0.03	-0.01	-0.01	0.01
16	1	-0.09	0.05	0.24	-0.27	-0.26	-0.03	-0.09	-0.01	-0.03
17	1	0.11	-0.11	0.21	-0.20	-0.29	-0.03	0.10	-0.01	-0.01

03 -903.376374

C	-1.25031200	1.35561000	0.09965900
P	-1.51803100	-0.37997400	0.46034800
B	0.00001900	-1.29982000	-0.00035300
P	1.51821500	-0.37995300	-0.46067900
C	1.25030200	1.35558600	-0.09959600
C	0.00002800	1.96369900	0.00008100
C	-3.08755700	-0.91651700	-0.36799900
C	3.08726500	-0.91658400	0.36859000
H	-2.12771600	1.99368900	0.15089400
H	2.12766200	1.99371700	-0.15107900
H	0.00003800	3.05244500	0.00016800
H	-3.23613100	-1.97771500	-0.16319600
H	-3.92789100	-0.36176500	0.05307000
H	-3.04940600	-0.75668200	-1.44612900
H	3.92794000	-0.36221300	-0.05229900
H	3.04863200	-0.75633200	1.44664000
H	3.23565300	-1.97790200	0.16425800

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	22.6371	124.7689	145.0325
Red. masses --	3.4397	3.6547	1.1209
Frc consts --	0.0010	0.0335	0.0139
IR Inten --	22.2549	0.9544	0.2200

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.18	0.00	-0.02	0.01
2	15	-0.06	0.01	0.10	-0.01	-0.03	0.13	0.00	-0.02	0.01
3	5	0.00	0.00	0.16	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00
4	15	-0.06	-0.01	0.10	0.01	-0.03	-0.13	0.00	-0.02	-0.01
5	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.18	0.00	-0.02	-0.01
6	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
7	6	0.10	0.00	-0.23	0.11	0.05	-0.16	-0.02	0.06	-0.01
8	6	0.10	0.00	-0.23	-0.11	0.05	0.16	0.02	0.06	0.01
9	1	0.01	0.00	-0.05	0.03	0.01	0.31	0.00	-0.02	0.03
10	1	0.01	0.00	-0.05	-0.03	0.01	-0.31	0.00	-0.02	-0.03
11	1	-0.01	0.00	-0.10	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
12	1	0.03	0.02	-0.20	0.11	0.01	-0.35	-0.29	0.15	0.29
13	1	0.03	0.05	-0.43	0.03	-0.04	-0.20	0.07	0.38	-0.26
14	1	0.34	-0.05	-0.23	0.27	0.22	-0.13	0.13	-0.27	-0.05
15	1	0.03	-0.05	-0.43	-0.03	-0.04	0.20	-0.07	0.37	0.26
16	1	0.34	0.05	-0.23	-0.27	0.21	0.13	-0.13	-0.26	0.05
17	1	0.03	-0.02	-0.20	-0.11	0.01	0.35	0.29	0.15	-0.29

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	148.3352	149.2592	187.8370
Red. masses --	1.0583	2.5508	3.8445
Frc consts --	0.0137	0.0335	0.0799
IR Inten --	0.4962	0.5770	6.7905

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.04	-0.08	0.00	0.11	0.04
2	15	0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.05	0.06	-0.03	0.11	-0.09

3	5	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.09	0.00	-0.05	0.00	0.17
4	15	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.05	-0.06	-0.03	-0.11	-0.09
5	6	0.00	0.01	0.01	0.01	0.04	0.07	0.00	-0.11	0.04
6	6	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.03	0.00	0.08	0.00	0.16
7	6	-0.01	0.01	0.01	0.11	-0.17	-0.01	0.04	-0.16	-0.01
8	6	-0.01	-0.01	0.01	-0.11	-0.17	0.01	0.04	0.16	-0.01
9	1	-0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.04	-0.13	0.05	0.18	0.14
10	1	-0.01	0.02	0.02	0.01	0.04	0.13	0.05	-0.18	0.14
11	1	-0.01	0.00	0.05	0.00	0.03	0.00	0.19	0.00	0.36
12	1	-0.25	0.10	0.34	0.13	-0.13	0.24	0.21	-0.16	0.16
13	1	0.07	0.32	-0.24	0.03	-0.11	-0.24	-0.06	-0.23	-0.10
14	1	0.11	-0.35	-0.04	0.23	-0.44	-0.04	0.02	-0.33	-0.03
15	1	0.07	-0.32	-0.24	-0.03	-0.11	0.25	-0.06	0.23	-0.10
16	1	0.11	0.35	-0.04	-0.23	-0.45	0.04	0.02	0.33	-0.03
17	1	-0.26	-0.11	0.34	-0.13	-0.13	-0.25	0.21	0.16	0.16

84 r6o

0 1 -325.656266

C	0.31782900	1.24833800	-0.04177800
N	-0.99995200	1.39836900	-0.03089600
B	-1.67983100	0.28651200	0.17762300
N	-1.34197900	-1.03663000	-0.06130700
C	0.03191400	-1.19779100	-0.03743000
C	0.95377700	-0.08579900	0.01448500
O	2.19032000	-0.22512400	0.03784700
H	0.97210000	2.11293300	-0.13816900
H	-1.93094000	-1.85785200	-0.07804800
H	0.40782500	-2.20730800	0.05908600

1	2	3
A	A	A

Frequencies --	171.0159	331.1549	389.3321
Red. masses --	5.0543	3.7649	5.5760

Frc consts	--	0.0871			0.2433			0.4980			
IR Inten	--	13.4108			98.9274			19.5606			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	0.01	0.00	0.30	0.00	0.03	-0.09	-0.05	-0.16	-0.17	
2	7	0.00	0.02	-0.05	0.03	-0.11	0.04	-0.01	0.22	0.23	
3	5	-0.04	0.01	-0.31	-0.14	-0.01	0.19	0.19	0.01	-0.08	
4	7	-0.01	-0.02	-0.02	0.05	0.05	-0.25	-0.02	0.02	-0.11	
5	6	0.00	-0.01	0.28	-0.01	0.07	0.23	0.01	-0.22	0.16	
6	6	0.00	-0.01	0.06	0.03	0.05	0.14	-0.06	-0.17	-0.07	
7	8	0.02	0.01	-0.28	0.01	-0.06	-0.09	-0.02	0.22	0.02	
8	1	0.04	0.02	0.65	-0.07	0.03	-0.59	0.13	-0.30	-0.24	
9	1	0.00	-0.03	0.03	0.09	0.02	-0.59	-0.18	0.14	-0.34	
10	1	-0.03	0.00	0.47	0.00	0.07	0.23	-0.16	-0.25	0.45	
		4			5			6			
		A			A			A			
Frequencies	--	433.5151			450.0560			521.0875			
Red. masses	--	7.5514			8.6569			2.1467			
Frc consts	--	0.8362			1.0331			0.3434			
IR Inten	--	95.6038			5.1740			140.9029			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	6	0.09	0.15	-0.21	0.17	-0.18	0.01	-0.06	-0.06	-0.03	
2	7	0.04	-0.12	0.40	0.23	-0.32	0.02	-0.09	0.04	0.05	
3	5	-0.05	-0.08	-0.38	-0.31	0.08	-0.06	-0.05	0.04	-0.14	
4	7	-0.12	-0.11	0.05	-0.22	0.08	0.06	0.05	0.05	0.12	
5	6	-0.04	0.19	0.08	-0.16	0.00	-0.08	0.05	0.01	0.00	
6	6	0.05	0.15	-0.17	0.09	-0.10	0.06	0.04	-0.03	0.15	
7	8	0.03	-0.14	0.08	0.15	0.38	-0.01	0.05	-0.04	-0.04	
8	1	-0.11	0.29	-0.27	0.20	-0.23	-0.17	-0.08	-0.08	-0.34	
9	1	0.02	-0.21	0.22	-0.19	0.05	0.13	0.02	0.09	-0.45	
10	1	0.08	0.26	0.32	-0.37	-0.10	-0.27	0.01	-0.08	-0.75	

0 3 -325.662032

C -0.23365400 1.25343900 -0.00001200

N	1.05296800	1.37326200	0.00000300
B	1.85212900	0.20213900	0.00000700
N	1.21795500	-1.09864300	0.00000000
C	-0.12654200	-1.21317200	-0.00000200
C	-0.94980700	-0.04236100	-0.00000300
O	-2.19862800	-0.11329400	0.00000600
H	-0.87808800	2.13703900	0.00001200
H	1.75651100	-1.95619800	-0.00000100
H	-0.58648800	-2.19494800	-0.00000700

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		179.4657			314.2494			420.9227		
Red. masses --		5.4992			3.5896			6.3073		
Frc consts --		0.1044			0.2089			0.6584		
IR Inten --		14.9759			1.2352			12.8738		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.29	0.00	0.00	-0.20	0.02	0.24	0.00
2	7	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.26	0.08	-0.11	0.00
3	5	0.00	0.00	-0.36	0.00	0.00	-0.02	0.07	-0.12	0.00
4	7	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.22	-0.04	-0.04	0.00
5	6	0.00	0.00	0.26	0.00	0.00	0.24	-0.03	0.29	0.00
6	6	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.24	0.00
7	8	0.00	0.00	-0.30	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.41	0.00
8	1	0.00	0.00	0.65	0.00	0.00	-0.53	0.29	0.44	0.00
9	1	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.37	-0.24	-0.16	0.00
10	1	0.00	0.00	0.44	0.00	0.00	0.61	-0.26	0.40	0.00
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		426.3794			520.9155			559.8114		
Red. masses --		4.9307			10.6766			8.9354		
Frc consts --		0.5281			1.7069			1.6499		
IR Inten --		0.2043			2.7716			3.6380		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.05	0.18	0.11	0.00	0.28	-0.22	0.00
2	7	0.00	0.00	-0.21	0.17	0.46	0.00	0.31	0.08	0.00
3	5	0.00	0.00	0.29	-0.35	0.00	0.00	0.29	0.12	0.00
4	7	0.00	0.00	-0.18	-0.31	-0.07	0.00	-0.16	0.32	0.00
5	6	0.00	0.00	0.08	-0.23	-0.23	0.00	-0.15	-0.02	0.00
6	6	0.00	0.00	0.38	0.23	-0.06	0.00	-0.23	-0.16	0.00
7	8	0.00	0.00	-0.15	0.27	-0.20	0.00	-0.28	-0.12	0.00
8	1	0.00	0.00	-0.44	-0.06	-0.06	0.00	0.32	-0.20	0.00
9	1	0.00	0.00	-0.55	-0.10	0.08	0.00	-0.17	0.32	0.00
10	1	0.00	0.00	-0.40	-0.41	-0.14	0.00	0.21	-0.19	0.00

85 r6ocn

0 1 -510.182779

C	1.27428400	0.27533200	-0.00020000
N	1.20071900	1.61202100	-0.00020500
B	-0.01953400	2.05746800	-0.00105300
N	-1.28534600	1.55599100	0.00077300
C	-1.22065500	0.14662600	0.00060100
C	0.04920700	-0.59071100	0.00010800
O	0.12187000	-1.81432300	0.00010400
C	-2.44886500	-0.53527800	-0.00010500
N	-3.48566700	-1.05446200	-0.00055000
C	2.54696200	-0.36954500	-0.00001000
N	3.58594700	-0.87589000	0.00009400
H	-2.19245900	2.00508000	0.00127800

	1	2	3
	A	A	A

Frequencies --	52.6268	96.3026	121.9113
Red. masses --	14.1742	7.7566	13.3851
Frc consts --	0.0231	0.0424	0.1172
IR Inten --	0.1747	2.3688	6.0654

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	0.12	-0.01	0.15	0.00
2	7	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	0.20	0.01	0.15	0.00
3	5	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	0.39	0.01	0.15	0.00
4	7	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.42	-0.01	0.16	0.00
5	6	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.32	0.00	0.17	0.00
6	6	0.00	0.00	0.31	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.18	0.00
7	8	0.00	0.00	0.60	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.18	0.00
8	6	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	-0.02	0.11	-0.03	0.00
9	7	0.00	0.00	-0.45	0.00	0.00	0.26	0.36	-0.52	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	0.01	-0.11	-0.04	0.00
11	7	0.00	0.00	-0.49	0.00	0.00	-0.14	-0.33	-0.50	0.00
12	1	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	-0.65	0.00	0.17	0.00

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 171.8248 192.1965 268.4065

Red. masses -- 12.4929 10.4524 8.8849

Frc consts -- 0.2173 0.2275 0.3771

IR Inten -- 0.5763 0.1781 2.2662

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	0.21	0.00	0.00	0.00	0.38	0.00	0.00	-0.13
2	7	-0.08	0.20	0.00	0.00	0.00	0.30	0.00	0.00	0.34
3	5	-0.17	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.54	0.00	0.00	-0.32
4	7	-0.09	-0.19	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	0.25
5	6	0.07	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.22	0.00	0.00	-0.35
6	6	0.17	0.01	0.00	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	-0.21
7	8	0.47	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	0.20
8	6	0.02	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.31
9	7	-0.22	0.36	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.25
10	6	-0.01	0.12	0.00	0.00	0.00	0.25	0.00	0.00	0.00
11	7	-0.26	-0.39	0.00	0.00	0.00	-0.33	0.00	0.00	-0.01
12	1	-0.15	-0.31	0.00	0.00	0.00	-0.41	0.00	0.00	0.58

03 -510.177075

C	-1.26431700	0.29434400	-0.00002300
N	-1.25323600	1.58311000	0.00001300
B	-0.00467900	2.27055500	-0.00000700
N	1.22496800	1.52419900	0.00002700
C	1.22404000	0.16300800	-0.00003800
C	-0.03447500	-0.56668100	-0.00019100
O	-0.08344100	-1.79609200	0.00001200
C	2.45284200	-0.54045000	0.00001200
N	3.48144700	-1.07049000	0.00005900
C	-2.52246400	-0.41961500	0.00002300
N	-3.53507600	-0.97235700	0.00006200
H	2.13044800	1.98108900	0.00010600

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	59.5418	121.4114	123.0216
Red. masses --	14.2069	13.4176	8.2001
Frc consts --	0.0297	0.1165	0.0731
IR Inten --	0.4887	4.7387	4.8719

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.10	0.00	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.18
2	7	0.00	0.00	0.06	0.02	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.44
3	5	0.00	0.00	0.11	0.01	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.02
4	7	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.40
5	6	0.00	0.00	0.06	0.00	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.22
6	6	0.00	0.00	0.30	-0.01	-0.18	0.00	0.00	0.00	-0.05
7	8	0.00	0.00	0.61	-0.01	-0.18	0.00	0.00	0.00	-0.01
8	6	0.00	0.00	-0.17	0.11	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.03
9	7	0.00	0.00	-0.44	0.36	0.51	0.00	0.00	0.00	0.28
10	6	0.00	0.00	-0.17	-0.11	0.04	0.00	0.00	0.00	0.06
11	7	0.00	0.00	-0.49	-0.36	0.49	0.00	0.00	0.00	-0.23
12	1	0.00	0.00	-0.12	0.00	-0.17	0.00	0.00	0.00	-0.66

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		173.7963			224.5436			306.1620		
Red. masses --		12.4619			11.6998			9.6214		
Frc consts --		0.2218			0.3476			0.5314		
IR Inten --		1.6617			16.2462			2.4571		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	-0.20	0.00	0.00	0.00	-0.34	0.00	0.00	-0.27
2	7	-0.08	-0.19	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.32
3	5	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.47	0.00	0.00	-0.04
4	7	-0.08	0.19	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.20
5	6	0.07	0.19	0.00	0.00	0.00	-0.39	0.00	0.00	0.28
6	6	0.18	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.24	0.00	0.00	-0.06
7	8	0.45	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.32	0.00	0.00	0.02
8	6	0.03	0.13	0.00	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	0.39
9	7	-0.23	-0.37	0.00	0.00	0.00	0.23	0.00	0.00	-0.23
10	6	0.01	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.30	0.00	0.00	-0.42
11	7	-0.26	0.38	0.00	0.00	0.00	0.27	0.00	0.00	0.23
12	1	-0.14	0.31	0.00	0.00	0.00	0.26	0.00	0.00	-0.51

86 r6cn2

0 1 -474.233570

C	0.93830200	-1.28879500	0.13482400
N	2.25495200	-1.35176800	0.08021900
B	2.87015800	-0.20501700	-0.18977900
N	2.39517700	1.08946800	0.00003500
C	1.01900300	1.14202000	-0.02985400
C	0.23377000	-0.02659100	-0.00030600
C	-1.19186400	0.02284100	-0.01498000
C	-1.95334300	-1.16283300	-0.05233800
N	-2.54541900	-2.16126000	-0.08362900
C	-1.84497200	1.27062400	0.03149900
N	-2.30432100	2.33714300	0.05975000

H	0.36392700	-2.19558700	0.30964100
H	2.90549200	1.96206900	-0.01454700
H	0.57169400	2.11992600	-0.15389900

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		72.0228			116.5673			124.7746		
Red. masses --		6.0706			9.1091			8.4208		
Frc consts --		0.0186			0.0729			0.0772		
IR Inten --		3.0226			1.5234			5.4558		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.03	0.24	0.09	-0.04	-0.14	-0.07	0.02	-0.21
2	7	-0.01	0.02	0.27	0.11	0.12	0.09	-0.06	-0.06	0.10
3	5	0.01	-0.04	0.03	0.03	0.18	0.20	0.08	-0.09	0.27
4	7	0.00	0.00	-0.25	-0.14	0.13	0.07	0.09	-0.07	0.12
5	6	0.01	-0.01	-0.26	-0.14	-0.03	-0.14	0.09	0.01	-0.20
6	6	0.00	0.01	-0.01	-0.02	-0.12	-0.18	0.02	0.06	-0.28
7	6	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.15	-0.16	0.02	0.09	-0.28
8	6	0.01	0.00	-0.11	-0.12	-0.09	-0.02	0.05	0.06	-0.03
9	7	0.01	0.00	-0.25	-0.30	0.00	0.14	0.12	0.02	0.26
10	6	0.00	-0.01	0.12	0.11	-0.08	-0.02	-0.06	0.04	-0.04
11	7	0.00	-0.01	0.25	0.43	0.05	0.14	-0.28	-0.06	0.23
12	1	-0.01	0.07	0.41	0.16	-0.12	-0.26	-0.16	0.04	-0.38
13	1	0.00	-0.01	-0.44	-0.25	0.20	0.10	0.14	-0.09	0.20
14	1	0.01	-0.03	-0.47	-0.23	-0.09	-0.22	0.18	0.04	-0.31

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		132.6089			238.4891			326.1043		
Red. masses --		12.5508			5.3932			6.4127		
Frc consts --		0.1300			0.1807			0.4018		
IR Inten --		3.5080			24.4612			5.3250		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.20	-0.01	0.04	-0.01	-0.04	-0.24	-0.13	0.22	0.05

2	7	0.20	0.04	0.00	0.01	-0.03	0.00	-0.17	-0.03	-0.11
3	5	0.17	0.05	-0.05	0.03	0.01	0.27	-0.05	-0.05	0.04
4	7	0.11	0.03	-0.01	0.01	0.02	-0.01	0.15	0.00	0.07
5	6	0.11	-0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.20	0.11	0.21	-0.09
6	6	0.14	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.01	0.02	0.26	0.00
7	6	0.14	-0.06	0.03	-0.01	0.00	0.33	0.01	-0.10	0.03
8	6	-0.05	0.06	0.01	-0.01	0.01	0.16	0.14	-0.21	0.01
9	7	-0.57	0.37	-0.03	0.02	0.01	-0.14	-0.17	-0.03	0.00
10	6	0.02	-0.12	0.00	0.00	0.01	0.18	-0.12	-0.20	0.02
11	7	-0.38	-0.29	-0.04	-0.03	0.01	-0.17	0.17	-0.08	-0.02
12	1	0.24	-0.03	0.10	-0.04	-0.09	-0.63	-0.26	0.33	0.15
13	1	0.08	0.05	-0.01	-0.01	0.03	-0.14	0.30	-0.09	0.20
14	1	0.08	-0.03	0.03	0.00	-0.03	-0.42	0.27	0.27	-0.23

0 3 -474.246986

C	-0.99519100	-1.26615700	0.00001700
N	-2.29013700	-1.34216800	-0.00000800
B	-3.04582800	-0.14988300	-0.00001600
N	-2.34802700	1.11526200	-0.00000200
C	-0.99846300	1.16378900	0.00001200
C	-0.25709600	-0.01629800	0.00000900
C	1.17842700	0.00824800	0.00000100
C	1.94178700	-1.17921500	-0.00000100
N	2.56941600	-2.15478300	-0.00000300
C	1.88366600	1.23237500	-0.00000300
N	2.42274200	2.25928600	-0.00000700
H	-0.41097600	-2.18901000	-0.00000500
H	-2.83627400	2.00160800	-0.00000400
H	-0.52035300	2.13718300	0.00001800

1	2	3
A	A	A

Frequencies -- 59.5116 117.8044 124.5957

Red. masses --	6.1078	7.7731	9.5436
Frc consts --	0.0127	0.0636	0.0873
IR Inten --	4.4949	12.7555	4.0774

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.24	0.00	0.00	-0.25	-0.12	-0.05	0.00
2	7	0.00	0.00	0.28	0.00	0.00	0.11	-0.14	0.13	0.00
3	5	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.39	0.01	0.23	0.00
4	7	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	0.10	0.17	0.14	0.00
5	6	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	-0.23	0.17	-0.05	0.00
6	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.33	0.03	-0.15	0.00
7	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.03	-0.19	0.00
8	6	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	-0.03	0.14	-0.12	0.00
9	7	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	0.27	0.35	0.02	0.00
10	6	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	-0.03	-0.13	-0.10	0.00
11	7	0.00	0.00	0.25	0.00	0.00	0.25	-0.50	0.10	0.00
12	1	0.00	0.00	0.43	0.00	0.00	-0.49	-0.25	-0.13	0.00
13	1	0.00	0.00	-0.45	0.00	0.00	0.17	0.29	0.21	0.00
14	1	0.00	0.00	-0.44	0.00	0.00	-0.36	0.30	-0.12	0.00

4	5	6
A	A	A

Frequencies --	134.9746	236.7985	325.9582
Red. masses --	12.8397	6.1924	7.2186
Frc consts --	0.1378	0.2046	0.4519
IR Inten --	6.9414	0.6114	1.3841

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.18	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.24	0.15	0.23	0.00
2	7	-0.19	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.18	-0.01	0.00
3	5	-0.16	0.04	0.00	0.00	0.00	0.31	0.04	-0.10	0.00
4	7	-0.13	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.14	0.00	0.00
5	6	-0.12	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.12	0.24	0.00
6	6	-0.14	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.28	0.00
7	6	-0.14	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.34	-0.02	-0.11	0.00
8	6	0.04	0.07	0.00	0.00	0.00	0.21	-0.18	-0.24	0.00

9	7	0.55	0.40	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.18	-0.01	0.00
10	6	-0.01	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.22	0.14	-0.24	0.00
11	7	0.41	-0.34	0.00	0.00	0.00	-0.20	-0.19	-0.07	0.00
12	1	-0.21	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.63	0.31	0.33	0.00
13	1	-0.10	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.20	-0.29	-0.08	0.00
14	1	-0.10	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.31	-0.26	0.31	0.00

87 r6nme

0 1 -274.824621

C		1.21601100	-1.23151500	-0.22878300
B		-0.02383600	-0.59830000	-0.88482000
N		-1.23750900	-0.08760100	-0.48963700
C		-0.12720900	0.92541800	-0.72886700
C		1.66288700	-0.20279900	0.52494800
C		-2.05513200	-0.27931200	0.69548100
H		1.61576600	-2.23447500	-0.16827900
H		-0.36830600	1.71666900	-1.42604400
H		2.43294500	-0.31062300	1.28562000
H		-2.78867100	0.52542200	0.79186200
H		-2.59386800	-1.22552800	0.60202300
H		-1.45285000	-0.32253800	1.61282000
C		0.93372300	1.13487300	0.36404000
H		0.52603300	1.45093600	1.33462000
H		1.62901600	1.92485600	0.05801300

	1	2	3
	A	A	A

Frequencies --	105.0658	133.0831	214.9250
Red. masses --	1.6470	1.4358	2.4117
Frc consts --	0.0107	0.0150	0.0656
IR Inten --	1.0338	1.4685	0.4687

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	0.00	0.04	0.06	0.01	-0.01	0.10	0.01	-0.09

2	5	0.00	0.02	-0.06	0.00	-0.03	0.05	0.04	-0.05	-0.04
3	7	-0.01	0.02	-0.05	0.00	-0.03	0.04	0.03	-0.06	-0.03
4	6	0.01	0.01	-0.05	-0.01	-0.03	0.03	-0.03	-0.06	-0.04
5	6	-0.09	0.00	0.06	0.08	0.03	-0.05	-0.03	-0.01	0.00
6	6	0.15	-0.05	0.05	-0.12	0.03	-0.04	0.08	0.19	0.05
7	1	-0.10	-0.01	0.09	0.10	0.03	-0.03	0.21	0.04	-0.17
8	1	-0.01	0.03	-0.03	-0.01	-0.05	0.00	-0.01	-0.04	-0.04
9	1	-0.15	-0.01	0.12	0.13	0.06	-0.10	-0.04	0.02	0.01
10	1	0.45	0.17	0.42	0.23	0.33	0.12	0.18	0.29	-0.04
11	1	-0.19	0.17	-0.13	-0.54	0.30	-0.31	-0.02	0.23	0.27
12	1	0.31	-0.54	-0.07	-0.19	-0.47	-0.01	0.14	0.30	0.02
13	6	-0.03	0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.18	-0.07	0.10
14	1	-0.07	0.06	-0.05	0.02	-0.05	0.02	-0.38	-0.31	0.09
15	1	0.01	-0.02	-0.01	-0.04	0.05	0.01	-0.24	0.09	0.36

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	333.0834	446.4135	505.3291
Red. masses --	2.3040	2.8901	3.1191
Frc consts --	0.1506	0.3393	0.4693
IR Inten --	3.5328	18.9193	11.3978

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.08	-0.02	0.12	-0.03	-0.03	-0.02	0.16	0.07	-0.14
2	5	-0.07	-0.01	0.08	0.00	-0.02	-0.05	-0.09	-0.05	0.18
3	7	-0.10	0.08	-0.10	0.17	0.10	0.22	-0.14	0.14	-0.05
4	6	0.07	-0.01	-0.05	0.12	0.02	-0.16	0.11	-0.06	-0.09
5	6	0.16	0.05	-0.11	-0.08	0.00	-0.04	-0.05	-0.03	0.12
6	6	0.04	-0.04	-0.01	-0.06	-0.06	0.04	-0.04	-0.04	0.05
7	1	-0.11	-0.03	0.14	-0.06	-0.04	0.08	0.38	0.14	-0.38
8	1	0.16	-0.02	-0.08	0.05	-0.03	-0.20	0.33	-0.19	-0.31
9	1	0.34	0.12	-0.28	-0.17	-0.01	0.05	-0.04	-0.03	0.11
10	1	-0.04	-0.12	0.13	-0.17	-0.15	-0.01	-0.13	-0.15	0.25
11	1	0.13	-0.09	-0.01	0.06	-0.09	-0.27	0.07	-0.09	-0.04
12	1	0.14	-0.05	-0.08	-0.30	-0.18	0.20	0.05	-0.11	-0.02

13	6	-0.03	-0.03	0.06	-0.06	0.03	-0.05	0.01	-0.02	-0.01
14	1	-0.26	-0.43	0.09	-0.44	-0.28	-0.10	-0.09	0.21	-0.12
15	1	-0.18	0.24	0.42	-0.04	0.17	0.40	0.15	-0.16	-0.05

0 3 -274.804257

C		1.30958500	-1.28963800	-0.01183900
B		-0.22762500	-1.35045000	0.02384000
N		-0.96671200	-0.14753800	0.00369200
C		-0.34574200	1.08401700	-0.04218100
C		1.90158300	-0.08237000	-0.01147700
C		-2.43441100	-0.13827400	0.00522400
H		1.93541100	-2.17677300	-0.03495700
H		-0.97825600	1.96220200	-0.07589900
H		2.98683300	0.01162700	-0.02829100
H		-2.81275800	0.35256600	-0.89660800
H		-2.79297600	-1.16562600	0.03003900
H		-2.81179900	0.39604400	0.88228400
C		1.14302700	1.22022100	0.02969800
H		1.43508600	1.76800200	0.94586100
H		1.49931900	1.87324400	-0.78401900

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		39.5565			138.2834			178.5213		
Red. masses --		2.1196			1.4197			1.7995		
Frc consts --		0.0020			0.0160			0.0338		
IR Inten --		0.2589			1.2169			4.5555		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.04
2	5	-0.01	-0.01	-0.13	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.15
3	7	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.07
4	6	-0.01	0.01	0.22	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	0.08
5	6	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.15

6	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	-0.12
7	1	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	0.06	-0.01	0.00	-0.02
8	1	-0.01	0.01	0.40	0.00	-0.01	-0.15	0.00	0.00	-0.06
9	1	0.00	-0.01	0.16	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	-0.37
10	1	0.00	0.11	0.03	-0.10	0.46	0.40	0.14	0.40	0.04
11	1	0.00	-0.01	-0.17	0.00	-0.01	-0.37	0.00	-0.02	-0.64
12	1	0.00	-0.12	0.04	0.11	-0.44	0.42	-0.14	-0.39	0.05
13	6	0.01	0.01	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	0.21	0.31	-0.42	-0.07	0.02	0.01	0.07	-0.09	0.03
15	1	-0.14	-0.26	-0.46	0.05	-0.02	0.01	-0.06	0.07	0.04

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	344.4755	351.2173	404.4387
Red. masses --	2.7954	2.1674	1.6289
Frc consts --	0.1954	0.1575	0.1570
IR Inten --	2.4191	15.1150	25.7236

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.08	-0.04	0.01	0.01	0.00	0.20	0.01	0.00	-0.02
2	5	-0.05	0.14	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.03
3	7	0.01	0.16	-0.01	0.00	-0.01	-0.18	0.00	0.00	0.15
4	6	0.03	0.16	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.16
5	6	-0.02	-0.08	-0.01	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	0.02
6	6	0.01	-0.25	0.01	0.00	0.01	0.04	0.00	0.00	-0.03
7	1	-0.16	-0.09	0.02	0.02	0.00	0.30	0.01	0.00	0.03
8	1	0.09	0.21	0.05	-0.02	0.02	0.63	-0.02	0.03	0.91
9	1	-0.01	-0.14	-0.01	0.00	0.01	-0.34	0.00	0.00	0.13
10	1	-0.19	-0.40	0.01	-0.15	-0.03	0.08	0.14	0.07	-0.05
11	1	0.39	-0.38	0.01	-0.02	0.02	0.18	-0.01	0.00	-0.15
12	1	-0.17	-0.40	0.02	0.17	0.08	0.07	-0.13	-0.06	-0.04
13	6	0.08	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.03	-0.01	-0.01	-0.03
14	1	0.12	-0.06	0.02	-0.04	-0.24	0.19	-0.11	-0.04	0.02
15	1	0.16	-0.03	0.03	0.01	0.21	0.22	0.08	0.02	0.03

0 1 -316.444822

B	-0.08415900	1.51697400	-0.50712800
C	1.42495200	1.30535900	-0.04186000
C	1.26096700	-1.21895500	0.28043100
C	-0.14844400	-1.21310200	-0.30359000
N	-0.90674300	0.06370300	-0.05684400
C	-1.24898400	0.23851100	1.38225700
C	-2.17652500	0.02076000	-0.83259100
H	2.03485400	2.10247300	-0.47622000
H	1.40258900	1.53975800	1.04078900
H	1.22596600	-1.18323400	1.37476600
H	1.71495800	-2.18237700	0.02561600
H	-0.08709700	-1.31883200	-1.39079600
H	-0.74521200	-2.05183000	0.07348900
H	-0.36016000	0.13809000	1.99996400
H	-1.99258500	-0.50511900	1.68147900
H	-1.65556200	1.24478500	1.50746000
H	-2.72137100	0.94345600	-0.64616900
H	-2.76405700	-0.85791900	-0.53815500
H	-1.94105900	-0.01896800	-1.89485100
C	2.10404100	-0.06236700	-0.26437800
H	3.09859000	-0.08522400	0.19351800
H	2.26210300	-0.21708600	-1.33895300

1	2	3
A	A	A

Frequencies --	92.0962	137.5054	218.0619
Red. masses --	3.0335	1.8876	1.1327
Frc consts --	0.0152	0.0210	0.0317
IR Inten --	21.0491	5.3753	4.1226

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.02	0.10	0.24	0.03	-0.03	-0.04	0.04	0.02	-0.04

2	6	0.06	-0.01	-0.10	-0.02	0.01	0.18	0.01	0.00	0.07
3	6	0.03	0.04	0.04	0.04	-0.01	-0.06	-0.01	0.00	0.00
4	6	0.00	-0.03	0.13	-0.02	-0.05	0.08	-0.01	0.00	0.02
5	7	0.00	-0.01	0.04	0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00
6	6	-0.16	-0.06	0.01	0.00	0.10	-0.02	0.00	-0.01	0.00
7	6	0.10	0.03	-0.11	0.02	-0.04	-0.03	0.00	-0.01	0.00
8	1	0.01	-0.02	-0.21	0.00	0.09	0.37	0.05	0.02	0.16
9	1	0.25	0.02	-0.10	-0.07	-0.25	0.23	-0.02	-0.11	0.09
10	1	0.11	0.20	0.04	0.16	-0.04	-0.06	0.02	0.02	0.00
11	1	0.01	0.00	0.15	0.05	0.01	-0.14	-0.01	0.00	0.00
12	1	-0.06	-0.16	0.14	-0.13	-0.19	0.09	-0.02	-0.03	0.02
13	1	0.03	0.01	0.25	0.01	0.00	0.24	-0.02	0.02	0.05
14	1	-0.22	-0.04	0.09	-0.05	-0.14	0.01	0.08	0.49	-0.05
15	1	-0.15	-0.11	-0.10	-0.22	0.32	-0.04	0.38	-0.35	0.10
16	1	-0.21	-0.08	-0.01	0.27	0.22	-0.06	-0.49	-0.20	-0.06
17	1	0.07	0.01	-0.12	0.01	-0.04	-0.05	0.07	0.06	-0.14
18	1	0.07	0.00	-0.24	0.02	-0.03	-0.02	-0.07	0.08	0.12
19	1	0.22	0.09	-0.09	0.05	-0.05	-0.02	0.00	-0.18	0.01
20	6	-0.01	-0.03	-0.17	-0.05	0.04	-0.10	-0.02	0.00	-0.04
21	1	0.06	-0.04	-0.34	0.03	-0.01	-0.27	0.02	-0.03	-0.12
22	1	-0.20	-0.10	-0.19	-0.23	0.16	-0.15	-0.11	0.03	-0.06

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 262.0625 282.8347 300.4103

Red. masses -- 1.8227 1.4822 3.0399

Frc consts -- 0.0738 0.0699 0.1616

IR Inten -- 24.2457 7.2490 4.6003

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	-0.08	0.05	0.20	-0.05	0.03	0.10	-0.01	0.08	-0.04
2	6	-0.02	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.01	-0.05	0.09	0.00
3	6	0.00	-0.04	-0.02	-0.02	-0.05	-0.01	-0.08	0.01	0.10
4	6	0.01	-0.03	-0.04	-0.01	-0.01	-0.01	-0.06	-0.13	0.05
5	7	0.01	-0.02	-0.06	0.02	0.03	-0.03	0.05	-0.05	-0.07

6	6	0.07	0.09	-0.05	0.08	0.10	-0.03	0.22	-0.14	-0.03
7	6	-0.01	-0.05	-0.01	0.02	-0.07	-0.03	0.05	0.12	-0.05
8	1	-0.06	-0.02	-0.10	-0.03	-0.03	-0.04	-0.01	0.03	-0.05
9	1	0.10	0.09	-0.02	0.04	0.03	0.00	-0.04	0.16	-0.02
10	1	-0.02	-0.09	-0.02	-0.02	-0.10	-0.01	-0.11	0.08	0.10
11	1	0.01	-0.02	-0.06	-0.02	-0.03	-0.06	0.04	0.04	0.19
12	1	0.02	-0.03	-0.04	-0.03	-0.04	0.00	-0.06	-0.32	0.07
13	1	-0.01	-0.02	-0.05	-0.04	0.03	0.02	-0.09	-0.04	0.21
14	1	0.09	0.10	-0.08	0.14	0.32	-0.08	0.29	-0.22	-0.15
15	1	0.05	0.15	0.03	0.23	0.00	0.09	0.24	-0.14	0.01
16	1	0.13	0.13	-0.12	-0.08	0.05	-0.11	0.27	-0.14	0.13
17	1	0.22	0.16	-0.38	-0.28	-0.31	0.30	0.16	0.17	0.00
18	1	-0.20	0.20	0.36	0.29	-0.35	-0.32	-0.05	0.16	-0.13
19	1	-0.05	-0.58	0.00	0.02	0.38	-0.04	0.06	0.18	-0.06
20	6	-0.01	0.00	0.03	-0.03	-0.02	0.02	-0.16	0.04	0.03
21	1	-0.03	0.00	0.06	-0.03	-0.02	0.03	-0.11	0.03	-0.07
22	1	0.03	0.00	0.03	-0.02	-0.01	0.02	-0.25	0.00	0.02

0 3 -316.429642

B	0.01167100	-1.35335800	-0.47190500
C	-1.49219300	-1.30627300	0.01869300
C	-1.23562100	1.21098800	0.25453900
C	0.17785800	1.18080700	-0.33040700
N	0.92494500	-0.11146700	-0.05427500
C	1.31070600	-0.18234000	1.39559500
C	2.17644800	-0.11675900	-0.86562500
H	-2.07431000	-2.09017100	-0.47620500
H	-1.59743900	-1.51222300	1.10126900
H	-1.19232400	1.18148500	1.34965700
H	-1.66159900	2.18733700	-0.00134300
H	0.12754100	1.26163000	-1.41734200
H	0.78216900	2.01137900	0.05527100
H	0.41300300	-0.24036500	2.00587900

H	1.89680700	0.69859500	1.68141900
H	1.89290000	-1.08943400	1.54327800
H	2.70091400	-1.05390000	-0.68286000
H	2.80744600	0.73308300	-0.58785000
H	1.90491000	-0.06666100	-1.91863400
C	-2.12877600	0.07480700	-0.26606000
H	-3.12136400	0.16433200	0.19392200
H	-2.26215200	0.19459100	-1.34742500

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		133.7124			200.0819			233.8063		
Red. masses --		2.5843			1.9844			1.0832		
Frc consts --		0.0272			0.0468			0.0349		
IR Inten --		1.7832			0.8555			0.7407		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.00	-0.03	0.16	-0.01	0.02	-0.03	0.00	-0.02	0.04
2	6	-0.07	0.01	-0.05	0.05	0.03	0.16	0.00	0.02	0.04
3	6	-0.05	-0.04	0.02	-0.05	0.04	-0.11	0.00	0.00	0.00
4	6	-0.01	0.01	0.12	0.02	0.04	0.07	0.00	0.00	0.00
5	7	0.01	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
6	6	0.19	0.05	0.02	-0.01	-0.15	-0.02	0.00	-0.01	0.00
7	6	-0.09	-0.02	-0.09	-0.01	0.06	-0.02	-0.01	0.01	-0.02
8	1	0.00	0.00	-0.11	0.01	-0.09	0.41	-0.01	-0.01	0.09
9	1	-0.23	0.06	-0.06	0.21	0.27	0.22	0.00	0.10	0.05
10	1	-0.15	-0.18	0.02	-0.18	0.15	-0.10	-0.01	-0.03	0.00
11	1	-0.02	-0.01	0.09	-0.05	0.00	-0.26	0.00	0.01	0.02
12	1	0.05	0.10	0.13	0.16	0.18	0.07	-0.02	-0.01	0.00
13	1	-0.04	-0.01	0.22	-0.01	-0.01	0.24	0.00	0.00	-0.01
14	1	0.26	0.21	0.14	-0.03	-0.03	-0.03	0.01	-0.47	-0.03
15	1	0.35	-0.01	-0.12	0.14	-0.28	0.04	-0.37	0.20	0.11
16	1	0.09	-0.02	0.00	-0.18	-0.27	-0.08	0.38	0.22	-0.09
17	1	-0.05	0.00	-0.10	0.03	0.08	-0.03	-0.18	-0.14	-0.27

18	1	-0.07	0.00	-0.21	-0.05	0.09	-0.02	0.14	-0.18	0.21
19	1	-0.22	-0.09	-0.06	-0.03	0.06	-0.02	0.00	0.34	0.00
20	6	0.00	0.01	-0.18	0.01	-0.04	-0.06	0.02	0.01	-0.05
21	1	-0.08	0.03	-0.37	-0.02	0.00	-0.14	-0.02	0.02	-0.12
22	1	0.22	0.03	-0.21	0.09	-0.19	-0.08	0.10	-0.01	-0.06
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		263.5399			305.3369			319.9595		
Red. masses --		1.1816			2.5266			1.7444		
Frc consts --		0.0484			0.1388			0.1052		
IR Inten --		0.3616			0.8161			1.8122		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	5	0.01	0.04	-0.03	-0.03	-0.03	0.05	-0.01	-0.08	0.05
2	6	0.02	-0.03	-0.01	-0.09	0.05	-0.02	-0.01	0.02	0.06
3	6	-0.02	0.00	-0.01	-0.04	0.01	-0.08	0.06	-0.05	0.11
4	6	0.00	0.04	0.01	-0.04	-0.12	-0.07	-0.03	-0.03	-0.06
5	7	0.00	0.03	0.00	0.05	-0.05	0.03	-0.02	-0.01	-0.05
6	6	0.01	0.04	0.00	0.16	-0.08	0.00	-0.09	0.01	-0.04
7	6	0.01	-0.07	0.01	0.08	0.16	0.07	0.02	0.08	0.01
8	1	0.03	-0.03	-0.03	-0.06	0.05	-0.05	-0.05	0.00	0.16
9	1	0.04	-0.06	-0.02	-0.13	0.01	-0.03	-0.02	0.16	0.09
10	1	-0.04	0.03	-0.01	-0.03	0.10	-0.07	0.15	-0.28	0.10
11	1	-0.05	-0.02	-0.04	0.05	0.03	-0.16	0.04	0.00	0.34
12	1	0.02	0.07	0.01	-0.06	-0.28	-0.08	-0.18	-0.11	-0.06
13	1	-0.03	0.04	0.05	-0.05	-0.05	-0.21	0.03	-0.01	-0.20
14	1	0.02	0.32	0.03	0.21	0.00	0.09	-0.12	0.29	-0.07
15	1	0.24	-0.08	-0.09	0.28	-0.14	-0.06	0.13	-0.12	-0.09
16	1	-0.21	-0.10	0.04	0.09	-0.13	-0.07	-0.33	-0.13	0.05
17	1	-0.31	-0.31	-0.29	0.12	0.14	-0.12	0.02	0.06	-0.08
18	1	0.27	-0.37	0.31	0.03	0.12	0.32	0.01	0.04	0.17
19	1	0.05	0.37	0.02	0.16	0.41	0.07	0.09	0.24	0.00
20	6	-0.01	-0.04	0.02	-0.13	0.04	0.03	0.07	0.03	-0.07
21	1	0.01	-0.05	0.06	-0.07	0.05	0.15	-0.02	0.06	-0.27

22 1 -0.06 -0.04 0.03 -0.26 0.04 0.04 0.30 0.05 -0.09

89 r6pme2s

0 1 -603.078335

C	1.84467700	1.31715400	0.20337900
B	0.48827500	1.54361200	-0.58488000
P	-0.84985100	0.23923300	0.02762200
C	0.06980800	-1.19824200	-0.74506500
C	1.61810400	-1.11979000	-0.60316000
C	-2.43353000	0.42276600	-0.88037100
C	-1.47451700	-0.48026700	1.65838300
H	2.67834500	1.73318900	-0.37477500
H	1.82177100	1.88612400	1.14680300
H	-0.21780200	-1.26878400	-1.79476600
H	-2.11881900	-1.35066200	1.49761700
H	1.99224600	-2.13259600	-0.42511400
H	2.04868400	-0.79196900	-1.55376300
H	-2.21456700	0.73166600	-1.90156100
H	-3.02960200	1.20585200	-0.40403500
H	-3.00639500	-0.50772500	-0.87626200
H	-0.62460400	-0.77035900	2.27709500
H	-0.31669100	-2.09129400	-0.24512900
H	-2.04409600	0.28519500	2.19021100
C	2.12386500	-0.18045900	0.51107700
H	1.64917600	-0.45633500	1.46039100
H	3.19830000	-0.34583500	0.64789800

	1	2	3
	A	A	A

Frequencies --	69.9696	117.0503	140.1453
Red. masses --	2.0344	3.0477	1.0879
Frc consts --	0.0059	0.0246	0.0126
IR Inten --	0.2762	19.4394	0.2780

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.01	0.08	-0.08	-0.05	0.16	0.02	-0.01	0.00
2	5	0.01	-0.03	0.05	-0.02	0.07	0.04	0.03	0.00	-0.01
3	15	-0.01	-0.02	0.01	0.02	0.00	-0.08	0.00	0.02	0.01
4	6	0.00	-0.08	0.12	-0.01	0.00	-0.09	-0.01	0.01	0.02
5	6	0.01	0.08	-0.15	-0.02	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.01
6	6	0.04	-0.01	-0.06	-0.04	-0.13	0.01	0.00	-0.05	-0.01
7	6	-0.10	0.08	0.02	0.20	0.19	0.05	-0.03	0.02	0.00
8	1	-0.01	0.10	0.14	-0.02	0.02	0.31	0.02	-0.01	0.00
9	1	-0.04	-0.11	0.15	-0.21	-0.15	0.21	0.02	-0.01	0.00
10	1	-0.16	-0.32	0.18	0.01	0.04	-0.10	-0.03	-0.02	0.03
11	1	-0.09	0.07	0.04	0.17	0.18	0.24	-0.15	0.12	-0.01
12	1	0.15	0.09	-0.36	-0.01	-0.01	-0.12	0.00	0.00	-0.03
13	1	-0.18	0.27	-0.17	0.00	0.09	-0.01	-0.02	0.02	-0.02
14	1	0.09	-0.13	-0.09	-0.12	-0.16	-0.02	-0.01	0.44	0.13
15	1	0.07	0.08	-0.16	-0.07	-0.14	0.01	-0.29	-0.45	0.28
16	1	-0.03	0.03	0.02	0.02	-0.17	0.08	0.29	-0.23	-0.45
17	1	-0.13	0.13	0.08	0.27	0.27	-0.01	-0.03	-0.12	-0.05
18	1	0.17	-0.02	0.36	-0.04	-0.01	-0.13	0.00	0.02	0.05
19	1	-0.13	0.12	-0.06	0.27	0.27	0.02	0.10	0.07	0.07
20	6	0.06	-0.02	-0.08	-0.08	-0.08	0.05	0.01	-0.01	-0.01
21	1	0.12	-0.13	-0.08	-0.11	-0.17	0.00	0.02	-0.01	-0.01
22	1	0.07	0.00	-0.16	-0.09	-0.08	0.08	0.02	-0.02	-0.02

4

5

6

A

A

A

Frequencies --

170.4106

191.4734

228.3259

Red. masses --

1.4357

1.7866

3.0192

Frc consts --

0.0246

0.0386

0.0927

IR Inten --

0.9191

8.7235

21.2481

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.03	-0.03	0.02	-0.02	-0.05	0.04	-0.01	0.06
2	5	0.01	0.06	0.04	-0.06	0.12	0.13	0.14	-0.12	-0.18
3	15	0.00	0.03	0.04	0.00	0.00	0.05	-0.04	0.13	0.04

4	6	-0.01	0.06	-0.03	-0.02	0.04	-0.03	-0.05	0.10	0.06
5	6	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	-0.03	0.00	-0.05	0.06	-0.02
6	6	0.02	-0.10	-0.03	0.07	-0.09	-0.10	-0.02	-0.12	-0.06
7	6	-0.05	0.02	0.02	-0.03	0.02	0.04	0.07	-0.13	0.00
8	1	0.02	-0.07	-0.08	-0.04	-0.05	-0.16	0.11	-0.01	0.16
9	1	0.11	-0.02	-0.03	0.16	0.01	-0.06	-0.09	-0.04	0.07
10	1	-0.01	0.17	-0.04	0.00	0.14	-0.04	-0.11	0.05	0.08
11	1	0.34	-0.27	0.00	-0.37	0.28	0.03	0.04	-0.08	-0.11
12	1	-0.06	-0.04	0.00	-0.06	-0.04	0.06	-0.06	0.04	-0.13
13	1	0.02	-0.05	-0.02	0.01	-0.10	-0.01	-0.10	0.14	-0.01
14	1	0.05	-0.11	-0.02	0.18	-0.30	-0.13	0.02	-0.42	-0.14
15	1	-0.08	-0.15	-0.08	0.06	0.04	-0.32	-0.10	-0.02	-0.33
16	1	0.12	-0.16	-0.03	0.03	-0.07	0.03	0.04	-0.16	0.18
17	1	-0.08	0.46	0.26	-0.03	-0.36	-0.13	0.15	-0.29	-0.18
18	1	-0.06	0.04	-0.12	-0.07	0.01	-0.12	-0.04	0.13	0.13
19	1	-0.49	-0.13	-0.24	0.34	0.16	0.22	0.16	-0.23	0.25
20	6	0.01	-0.03	-0.02	0.02	-0.01	-0.04	-0.02	-0.03	0.03
21	1	0.01	-0.02	-0.02	0.05	0.02	-0.02	-0.05	-0.04	0.01
22	1	0.01	-0.05	-0.02	0.02	-0.01	-0.08	-0.03	-0.07	0.05

0 3 -603.091424

C	1.89470000	-1.28784900	0.32667700
B	0.34576400	-1.57987300	0.16775500
P	-0.86055400	-0.20171100	0.00332500
C	0.09499100	1.31021000	-0.49318200
C	1.52425800	1.27421300	0.08835200
C	-1.82509100	0.31889700	1.50366500
C	-2.20079100	-0.43551500	-1.23591800
H	2.17824700	-1.26091400	1.39143000
H	2.48916700	-2.10547900	-0.10060500
H	-0.43855500	2.21281400	-0.17667700
H	-2.86299000	0.43317700	-1.27696700
H	2.03992200	2.18477000	-0.23582100

H	1.47830300	1.32480000	1.18361500
H	-1.13033700	0.62345200	2.28816300
H	-2.39749200	-0.53635700	1.86797900
H	-2.50691300	1.14466900	1.27909900
H	-1.75690600	-0.60916400	-2.21659000
H	0.13820300	1.32059200	-1.58681200
H	-2.78238300	-1.31785400	-0.96085900
C	2.34995000	0.04238400	-0.32973400
H	2.30213500	-0.05740400	-1.42144800
H	3.40097800	0.23389200	-0.08230500

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		68.7009			136.8445			158.3061		
Red. masses --		3.0125			2.1807			1.0682		
Frc consts --		0.0084			0.0241			0.0158		
IR Inten --		1.6856			0.4522			0.2248		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.01	-0.07	-0.03	0.06	0.17	-0.01	-0.01	0.01
2	5	0.00	0.04	0.21	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	-0.02
3	15	0.00	0.02	0.07	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.00
4	6	0.00	0.04	0.12	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.02	0.01
5	6	0.06	-0.02	-0.05	0.04	0.03	-0.14	0.01	0.00	-0.01
6	6	-0.20	-0.03	-0.04	0.02	-0.16	0.05	0.00	0.02	0.00
7	6	0.13	-0.01	-0.08	0.00	0.13	-0.03	0.01	-0.05	0.00
8	1	0.22	0.00	-0.12	-0.19	0.29	0.20	-0.03	0.01	0.01
9	1	-0.07	-0.04	-0.15	0.06	0.01	0.41	-0.01	-0.01	0.03
10	1	0.04	0.02	0.25	0.00	0.00	0.06	0.02	0.02	0.02
11	1	0.12	-0.02	-0.16	0.06	0.17	0.03	-0.34	-0.30	0.33
12	1	0.05	-0.03	-0.09	0.03	-0.02	-0.32	0.02	-0.01	-0.01
13	1	0.19	-0.04	-0.04	0.15	0.20	-0.15	0.02	0.00	-0.01
14	1	-0.31	0.02	0.04	0.03	-0.31	0.10	0.01	-0.16	0.07
15	1	-0.18	-0.07	-0.10	-0.01	-0.19	-0.08	-0.15	0.08	-0.10

16	1	-0.23	-0.08	-0.13	0.05	-0.10	0.17	0.14	0.15	0.04
17	1	0.25	0.00	-0.03	0.01	0.19	-0.04	0.02	0.45	-0.08
18	1	-0.12	0.14	0.11	-0.12	0.03	0.00	0.00	0.03	0.01
19	1	0.12	-0.02	-0.14	-0.06	0.14	-0.12	0.39	-0.38	-0.25
20	6	-0.03	-0.04	-0.17	-0.01	-0.04	-0.03	0.00	-0.02	0.00
21	1	-0.22	-0.06	-0.16	-0.05	-0.19	-0.01	-0.01	-0.02	0.00
22	1	0.01	-0.07	-0.35	0.00	-0.04	-0.09	0.00	-0.02	-0.01
			4			5			6	
			A			A			A	
Frequencies --		192.7824			214.0012			228.1698		
Red. masses --		1.1129			2.2911			2.2904		
Frc consts --		0.0244			0.0618			0.0703		
IR Inten --		0.0998			2.1297			0.3346		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	-0.01	0.03	0.04	-0.01	-0.05	-0.03	0.02	0.03
2	5	-0.02	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.20	-0.01	-0.06	0.04
3	15	0.00	0.01	-0.02	-0.01	-0.04	0.02	0.01	-0.05	-0.02
4	6	-0.01	0.03	0.02	-0.01	-0.11	-0.12	-0.07	0.02	0.06
5	6	0.00	-0.01	0.00	-0.07	0.01	0.00	-0.08	-0.01	0.06
6	6	0.05	-0.01	0.02	0.02	-0.03	0.03	0.17	0.10	0.03
7	6	0.02	-0.01	-0.03	0.01	0.17	-0.05	0.09	0.00	-0.11
8	1	-0.04	0.02	0.03	0.22	-0.16	-0.10	-0.01	0.12	0.03
9	1	-0.02	-0.02	0.05	-0.04	0.03	-0.25	0.02	0.03	0.08
10	1	0.00	0.02	0.06	-0.07	-0.07	-0.33	-0.12	-0.04	0.15
11	1	-0.09	-0.09	0.05	-0.02	0.16	0.18	0.17	0.05	-0.22
12	1	0.01	-0.02	0.01	-0.09	0.03	0.03	-0.08	0.02	0.14
13	1	0.01	-0.02	0.01	-0.16	0.01	-0.01	-0.08	-0.11	0.07
14	1	0.08	0.47	-0.19	0.05	0.00	0.00	0.33	-0.10	-0.03
15	1	0.48	-0.16	0.35	0.07	-0.04	0.06	-0.02	0.25	0.07
16	1	-0.34	-0.34	-0.04	-0.01	-0.05	0.05	0.38	0.29	0.10
17	1	0.04	0.14	-0.05	0.05	0.49	-0.09	0.21	-0.05	-0.05
18	1	-0.02	0.07	0.02	0.08	-0.30	-0.12	-0.06	0.12	0.06
19	1	0.13	-0.11	-0.12	0.03	0.07	-0.34	-0.01	0.05	-0.17

20	6	-0.03	-0.02	0.00	0.01	0.05	0.03	-0.13	0.00	-0.06
21	1	-0.06	-0.04	0.00	0.08	0.09	0.03	-0.32	-0.01	-0.06
22	1	-0.02	-0.03	-0.04	-0.01	0.08	0.10	-0.09	0.01	-0.24

90 r6nmeh2

0 1 -274.811059

C		-1.81908900	0.21031700	-0.32896000
C		-1.46849300	-1.15764700	0.14757700
B		0.11167800	-1.24437000	0.17606600
N		0.97824900	-0.17139300	0.04898600
C		0.36566700	1.06160700	0.32576500
C		-0.97163600	1.25740300	-0.03131500
C		2.40470100	-0.21337400	-0.24854100
H		-2.67518100	0.35811200	-0.98116600
H		-1.76642300	-1.32549600	1.19064000
H		-1.95258300	-1.95368300	-0.42467800
H		0.94270600	1.79491100	0.88122400
H		-1.32136700	2.28408900	-0.10383300
H		2.62366500	0.43495200	-1.10203900
H		2.99381300	0.12167600	0.61048600
H		2.68234400	-1.24279500	-0.48102700

		1	2	3
		A	A	A
Frequencies --		144.7670	186.3215	210.8822
Red. masses --		1.2907	1.9857	1.7701
Frc consts --		0.0159	0.0406	0.0464
IR Inten --		1.1207	1.3503	10.9549

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

5	6	0.00	0.01	-0.07	-0.02	0.00	0.11	0.03	0.07	-0.08
6	6	-0.02	0.00	-0.01	0.02	-0.01	-0.04	-0.02	0.00	0.02
7	6	0.03	-0.02	0.08	-0.06	0.00	-0.15	0.00	-0.07	-0.02
8	1	-0.05	-0.02	0.08	0.13	-0.05	-0.22	-0.09	0.04	0.16
9	1	0.09	0.02	0.07	-0.06	0.10	0.00	-0.36	-0.46	-0.27
10	1	-0.04	-0.01	0.10	0.04	-0.03	0.04	0.33	0.04	-0.52
11	1	0.02	0.03	-0.10	-0.06	0.01	0.14	0.03	0.11	-0.14
12	1	-0.03	0.00	-0.01	0.02	-0.01	-0.11	-0.04	-0.01	-0.01
13	1	0.21	0.38	0.43	-0.18	0.32	0.07	0.03	-0.06	0.00
14	1	-0.03	-0.53	0.32	0.16	-0.41	-0.14	0.06	-0.17	-0.02
15	1	-0.08	0.06	-0.40	-0.21	0.07	-0.63	-0.10	-0.09	-0.07

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 327.6398 361.1830 400.8998

Red. masses -- 2.6552 2.9357 3.1345

Frc consts -- 0.1679 0.2256 0.2968

IR Inten -- 3.5713 71.8056 2.6135

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.06	0.08	0.03	-0.05	-0.02	-0.07	0.18	-0.07	-0.12
2	6	-0.06	0.05	0.01	-0.01	0.01	0.09	-0.07	-0.04	0.05
3	5	-0.05	-0.06	0.15	-0.07	0.26	0.03	-0.06	0.01	0.15
4	7	0.03	-0.13	-0.07	0.09	0.04	-0.15	-0.09	0.01	-0.20
5	6	0.03	-0.17	0.00	-0.05	-0.05	0.12	0.05	0.03	-0.03
6	6	0.05	-0.02	-0.08	-0.06	-0.06	-0.03	0.03	0.01	0.20
7	6	0.05	0.19	-0.01	0.13	-0.09	-0.03	-0.06	0.04	0.01
8	1	-0.16	0.14	0.17	-0.07	-0.08	-0.06	0.46	-0.08	-0.49
9	1	-0.34	-0.09	-0.09	-0.16	0.03	0.04	-0.26	0.01	0.00
10	1	0.09	0.10	-0.20	0.20	-0.08	0.03	0.03	-0.04	-0.03
11	1	0.03	-0.23	0.08	-0.29	-0.26	0.65	0.24	0.00	-0.19
12	1	0.20	0.03	-0.14	-0.06	-0.05	0.03	-0.05	-0.01	0.30
13	1	-0.08	0.39	0.11	0.28	-0.16	-0.04	0.05	0.06	0.05
14	1	-0.09	0.23	0.08	0.07	-0.09	0.02	-0.22	0.08	0.11
15	1	0.34	0.30	-0.15	0.05	-0.13	0.07	0.04	0.07	0.05

0 3 -274.824145

C	-1.88880000	0.21424600	0.00007600
C	-1.40956400	-1.21814100	-0.00001700
B	0.15838700	-1.30184000	0.00000200
N	0.96325700	-0.15473900	-0.00007000
C	0.37844600	1.11936100	-0.00007700
C	-1.01042500	1.27373000	0.00000700
C	2.42879600	-0.20267100	0.00006300
H	-2.95721400	0.40915200	0.00012400
H	-1.81780800	-1.76652600	0.86394500
H	-1.81767600	-1.76632900	-0.86417700
H	1.05317500	1.96590100	-0.00004300
H	-1.39335800	2.28874000	0.00004800
H	2.82970400	0.29277700	0.88967000
H	2.74789300	-1.24353900	-0.00006100
H	2.82983300	0.29304100	-0.88933400

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	138.6513	150.3839	206.9267
Red. masses --	2.1651	1.2514	1.8153
Frc consts --	0.0245	0.0167	0.0458
IR Inten --	0.8052	1.2742	6.2530

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.03
2	6	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.06
3	5	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.22
4	7	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.09
5	6	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.01
6	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02
7	6	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.12
8	1	0.00	0.00	0.43	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.05

9	1	-0.17	-0.27	-0.37	0.10	0.05	0.14	-0.25	-0.12	-0.26
10	1	0.17	0.27	-0.37	-0.10	-0.05	0.14	0.25	0.12	-0.26
11	1	0.00	0.00	-0.33	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.02
12	1	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.04
13	1	-0.10	0.09	0.10	-0.10	-0.46	0.38	0.15	-0.35	0.01
14	1	0.00	0.00	0.25	0.00	0.00	-0.42	0.00	0.00	-0.58
15	1	0.10	-0.09	0.10	0.10	0.46	0.38	-0.15	0.35	0.01
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		340.8040			379.4980			469.4929		
Red. masses --		2.7531			4.3368			5.8105		
Frc consts --		0.1884			0.3680			0.7546		
IR Inten --		1.1041			1.8990			4.5143		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.20	0.34	-0.04	0.00
2	6	0.09	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.09	-0.15	0.00
3	5	0.05	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.27	0.00	-0.15	0.00
4	7	-0.01	0.16	0.00	0.00	0.00	0.35	-0.25	0.02	0.00
5	6	-0.04	0.16	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.09	0.13	0.00
6	6	-0.07	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.22	0.16	0.13	0.00
7	6	-0.02	-0.25	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.35	0.05	0.00
8	1	0.00	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.33	0.34	-0.06	0.00
9	1	0.14	-0.08	0.00	0.21	-0.12	-0.02	-0.02	-0.06	0.01
10	1	0.14	-0.08	0.00	-0.21	0.12	-0.02	-0.02	-0.06	-0.01
11	1	-0.10	0.21	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.27	-0.03	0.00
12	1	-0.19	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.49	-0.03	0.06	0.00
13	1	0.16	-0.41	0.01	0.26	-0.06	-0.11	-0.37	0.08	0.00
14	1	-0.41	-0.37	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.27	0.08	0.00
15	1	0.16	-0.41	-0.01	-0.26	0.06	-0.11	-0.37	0.08	0.00

91 r6nmeh2-nhc

0 1 -501.085171

C 2.33609500 -1.60759900 -0.36459500

C	1.11783900	-1.61083400	0.52894500
B	0.40251800	-0.20600700	0.26168400
N	1.27904200	0.94559000	0.19676200
C	2.61508500	0.78347400	-0.04041400
C	3.09222900	-0.47363800	-0.47120100
C	0.80502500	2.32766500	0.25383200
H	2.66160300	-2.52431700	-0.84736200
H	0.48285700	-2.47471200	0.29066300
H	1.41337000	-1.74562300	1.58631300
H	3.23347800	1.67121800	-0.04396000
H	4.06665400	-0.50290200	-0.94958100
H	1.61096000	2.98033400	0.59333400
H	0.48709500	2.68354100	-0.73521600
H	-0.01736000	2.42182900	0.96480400
C	-1.09455100	-0.10469600	0.07470200
C	-3.27187600	0.51799700	-0.31706200
C	-3.27209700	-0.81529300	-0.09226500
H	-4.08393600	1.18984900	-0.53348700
H	-4.08576700	-1.51900000	-0.07585000
N	-1.95659400	0.95068500	-0.19924300
H	-1.63894500	1.87220200	-0.43984200
N	-1.96122100	-1.18339300	0.15881000
H	-1.63768400	-2.11501000	0.35581600

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		53.5335			75.5231			135.9977		
Red. masses --		3.3837			2.7919			3.4027		
Frc consts --		0.0057			0.0094			0.0371		
IR Inten --		0.6513			0.6315			0.2978		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.12	-0.02	0.09	0.06	0.02	-0.03	-0.13	-0.01	-0.06
2	6	-0.05	-0.03	-0.14	-0.02	-0.04	-0.14	-0.11	0.07	-0.04

3	5	-0.01	0.00	-0.13	0.00	-0.02	-0.08	-0.01	0.12	-0.03
4	7	0.00	-0.01	-0.08	-0.01	-0.01	-0.01	0.07	0.05	0.03
5	6	0.02	0.00	0.07	0.00	0.02	0.06	0.07	-0.06	0.09
6	6	0.11	0.00	0.18	0.05	0.03	0.05	-0.02	-0.07	0.03
7	6	-0.02	-0.01	-0.15	-0.02	-0.02	0.09	0.18	0.09	-0.02
8	1	0.24	-0.03	0.19	0.13	0.03	-0.01	-0.23	-0.01	-0.12
9	1	-0.03	0.00	-0.33	-0.01	-0.01	-0.28	-0.17	0.10	-0.04
10	1	-0.25	-0.13	-0.10	-0.11	-0.16	-0.13	-0.10	0.04	-0.04
11	1	0.01	0.02	0.10	-0.01	0.02	0.13	0.15	-0.11	0.15
12	1	0.18	0.00	0.34	0.08	0.06	0.12	-0.02	-0.13	0.04
13	1	0.00	0.03	-0.29	-0.08	-0.07	0.33	0.15	0.01	0.21
14	1	-0.12	-0.11	-0.15	0.18	0.12	0.07	0.43	0.16	-0.07
15	1	0.04	0.04	-0.08	-0.15	-0.12	-0.06	0.02	0.13	-0.20
16	6	-0.02	0.02	-0.07	-0.01	0.00	-0.05	-0.01	0.09	-0.03
17	6	-0.06	0.03	0.17	0.00	0.00	-0.05	-0.09	-0.14	0.02
18	6	-0.03	0.01	0.05	-0.03	0.04	0.17	0.06	-0.14	0.03
19	1	-0.08	0.04	0.31	0.01	-0.01	-0.13	-0.16	-0.23	0.03
20	1	-0.02	0.00	0.05	-0.06	0.07	0.33	0.13	-0.22	0.05
21	7	-0.05	0.03	0.10	0.02	-0.02	-0.19	-0.12	0.00	-0.02
22	1	-0.09	0.07	0.18	0.04	-0.09	-0.42	-0.22	0.04	-0.02
23	7	0.00	0.00	-0.10	-0.03	0.03	0.16	0.10	0.01	0.00
24	1	0.02	-0.02	-0.20	-0.06	0.06	0.34	0.20	0.05	0.01

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 145.6455 172.4954 217.6594

Red. masses -- 3.5615 2.5895 1.3223

Frc consts -- 0.0445 0.0454 0.0369

IR Inten -- 8.1349 4.6099 4.7858

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.07	0.04	-0.06	-0.07	0.05	-0.16	-0.03	-0.01	0.02
2	6	0.08	0.06	0.14	0.00	-0.04	-0.06	-0.04	0.01	0.00
3	5	0.01	-0.03	-0.06	0.01	-0.02	0.07	0.00	0.02	-0.02
4	7	-0.01	0.00	0.03	0.00	-0.01	0.12	0.01	0.02	-0.02

5	6	0.01	-0.02	0.12	0.02	-0.01	0.18	0.01	0.00	-0.03
6	6	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.03	0.03	-0.01	-0.02	0.01
7	6	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	-0.18	-0.01	0.00	0.09
8	1	-0.22	0.07	-0.22	-0.14	0.11	-0.33	-0.03	-0.02	0.04
9	1	0.12	-0.04	0.43	-0.02	-0.01	-0.09	-0.06	0.02	-0.03
10	1	0.27	0.35	0.12	0.09	-0.13	-0.10	-0.07	-0.02	0.00
11	1	0.03	-0.03	0.23	0.02	-0.02	0.24	0.03	-0.02	-0.01
12	1	-0.05	0.03	-0.06	-0.01	0.07	0.02	-0.01	-0.05	0.01
13	1	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.12	-0.55	0.14	0.08	-0.42
14	1	0.04	-0.01	-0.03	-0.25	-0.33	-0.23	-0.55	-0.12	0.22
15	1	-0.03	0.02	-0.04	0.08	0.17	-0.06	0.34	0.04	0.50
16	6	0.02	-0.08	-0.20	0.01	-0.01	0.06	0.01	0.03	-0.04
17	6	-0.01	0.05	0.16	0.04	0.00	-0.05	0.00	-0.02	-0.01
18	6	-0.05	0.05	0.15	0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.02	0.04
19	1	0.00	0.10	0.31	0.06	0.01	-0.11	-0.02	-0.05	0.00
20	1	-0.08	0.09	0.28	0.01	0.02	-0.02	0.04	-0.03	0.07
21	7	0.05	-0.05	-0.15	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.07
22	1	0.05	-0.01	0.00	0.06	-0.02	0.00	-0.04	0.04	0.04
23	7	-0.01	-0.05	-0.17	0.00	0.01	0.08	0.04	0.01	0.00
24	1	-0.06	-0.04	-0.04	-0.01	0.01	0.10	0.06	0.03	0.04

03 -501.077883

C	2.54316200	-1.62391900	-0.08616500
C	1.05630400	-1.63206400	0.10729100
B	0.37848800	-0.18543600	0.07945800
N	1.26555500	0.97841000	0.08848000
C	2.63846500	0.81246200	-0.08520600
C	3.24516500	-0.43581200	-0.17297000
C	0.79222800	2.35151600	0.18065700
H	3.07479900	-2.56807300	-0.14984400
H	0.59153800	-2.28630600	-0.65044500
H	0.81763300	-2.12877600	1.06692300
H	3.22524900	1.72127700	-0.14041000

H	4.32186000	-0.45132400	-0.30595700
H	1.58972000	3.00157600	0.54870600
H	0.46726000	2.75105000	-0.79230000
H	-0.03439200	2.42321600	0.89060800
C	-1.12716600	-0.10620200	0.04351600
C	-3.30728000	-0.84716700	-0.02017000
C	-3.34112700	0.49370700	-0.18605000
H	-4.11363200	-1.55902300	0.02048800
H	-4.18088200	1.15339800	-0.31987700
N	-1.98299600	-1.21445100	0.14754200
H	-1.64622900	-2.15919900	0.20644800
N	-2.03323200	0.96253200	-0.09780800
H	-1.74916700	1.86879100	-0.42454100

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	40.5482	79.8071	114.6908
Red. masses --	2.9718	2.7943	3.5373
Frc consts --	0.0029	0.0105	0.0274
IR Inten --	0.5036	4.0093	12.5157

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.01	0.08	-0.02	-0.01	0.01	0.08	0.02	0.11
2	6	-0.02	0.00	-0.13	0.00	0.01	0.16	0.08	-0.04	0.12
3	5	0.00	0.01	-0.08	0.00	0.01	0.10	0.01	-0.07	-0.04
4	7	0.01	0.01	-0.06	0.01	0.01	0.03	-0.03	-0.03	-0.03
5	6	0.02	-0.01	0.09	-0.01	-0.01	-0.09	-0.04	0.03	-0.09
6	6	0.03	-0.01	0.17	-0.02	-0.01	-0.11	0.02	0.05	-0.03
7	6	-0.01	0.01	-0.19	0.01	0.02	-0.06	-0.10	-0.06	0.10
8	1	0.01	-0.01	0.14	-0.03	-0.01	0.01	0.13	0.04	0.20
9	1	0.07	0.10	-0.27	-0.07	-0.07	0.28	0.11	-0.17	0.22
10	1	-0.17	-0.10	-0.22	0.09	0.11	0.24	0.12	0.08	0.20
11	1	0.04	-0.02	0.14	-0.01	-0.01	-0.19	-0.09	0.05	-0.20
12	1	0.04	-0.02	0.31	-0.04	-0.02	-0.21	0.01	0.09	-0.08

13	1	0.03	0.08	-0.40	0.06	0.06	-0.23	-0.04	-0.02	-0.11
14	1	-0.15	-0.14	-0.20	-0.11	-0.09	-0.06	-0.37	-0.07	0.18
15	1	0.09	0.11	-0.08	0.11	0.09	0.04	0.08	-0.11	0.31
16	6	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.01	0.09	0.01	-0.07	-0.14
17	6	0.00	-0.01	0.01	0.02	-0.02	-0.21	-0.06	0.09	0.08
18	6	-0.03	0.01	0.17	0.01	0.00	-0.02	0.02	0.11	0.14
19	1	0.02	-0.03	-0.03	0.03	-0.04	-0.39	-0.10	0.15	0.14
20	1	-0.04	0.01	0.30	0.01	0.00	0.01	0.06	0.18	0.26
21	7	0.02	-0.02	-0.13	0.01	-0.02	-0.07	-0.05	-0.02	-0.20
22	1	0.03	-0.02	-0.24	0.04	-0.03	-0.44	-0.13	-0.03	0.02
23	7	-0.03	0.01	0.13	-0.01	0.01	0.18	0.07	-0.02	-0.08
24	1	-0.06	0.07	0.28	0.00	0.07	0.37	0.10	0.05	0.15

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 130.9284 137.3212 171.1836

Red. masses -- 2.9517 2.6048 1.3825

Frc consts -- 0.0298 0.0289 0.0239

IR Inten -- 2.8330 3.3320 10.5479

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.08	-0.02	0.03	0.02	0.00	0.21	-0.05	-0.02	0.00
2	6	-0.06	0.06	0.10	-0.02	0.00	-0.08	-0.04	0.02	-0.01
3	5	-0.01	0.08	-0.03	-0.01	0.01	-0.05	0.00	0.04	-0.01
4	7	0.05	0.04	0.02	-0.01	0.01	-0.13	0.03	0.02	-0.02
5	6	0.03	-0.03	-0.02	-0.01	0.00	-0.19	0.02	-0.01	0.00
6	6	-0.03	-0.06	-0.03	0.00	-0.01	0.03	-0.01	-0.04	0.00
7	6	0.14	0.07	0.05	0.03	0.00	0.13	0.00	0.01	0.07
8	1	-0.12	-0.05	0.05	0.04	0.00	0.44	-0.07	-0.03	0.00
9	1	-0.12	-0.02	0.20	0.13	0.12	-0.29	-0.06	0.04	-0.01
10	1	-0.04	0.20	0.17	-0.24	-0.14	-0.22	-0.06	0.02	-0.01
11	1	0.07	-0.06	-0.06	-0.03	0.00	-0.35	0.05	-0.03	0.00
12	1	-0.03	-0.11	-0.08	0.01	-0.02	0.07	-0.01	-0.07	0.00
13	1	0.08	-0.04	0.39	0.03	-0.11	0.33	0.15	0.09	-0.42
14	1	0.46	0.22	0.00	0.10	0.23	0.21	-0.51	-0.12	0.19

15	1	-0.07	0.04	-0.20	0.00	-0.13	0.10	0.34	0.04	0.47
16	6	-0.01	0.05	-0.12	-0.01	0.01	0.04	0.01	0.05	0.00
17	6	0.03	-0.09	0.07	0.01	-0.02	-0.05	0.03	-0.04	0.02
18	6	-0.07	-0.09	0.11	0.00	-0.02	-0.03	-0.01	-0.04	-0.03
19	1	0.09	-0.15	0.13	0.02	-0.03	-0.09	0.06	-0.07	0.02
20	1	-0.13	-0.14	0.21	-0.01	-0.02	-0.04	-0.03	-0.08	-0.06
21	7	0.08	-0.01	-0.16	0.00	0.00	0.06	0.05	0.02	0.02
22	1	0.13	0.02	0.02	0.02	-0.01	-0.18	0.09	0.04	0.13
23	7	-0.09	-0.01	-0.05	-0.01	0.01	0.07	-0.03	-0.01	-0.07
24	1	-0.18	0.03	-0.04	-0.01	-0.01	0.00	-0.06	0.08	0.17

92 r7pme2s

0 1 -642.376628

C	-1.51230100	-1.52801300	-0.66760900
B	-0.19022200	-0.99934600	-1.35349400
P	1.08082400	-0.18701500	-0.06715200
C	0.22760900	1.47216600	0.07280600
C	-2.27456000	0.71784200	0.37948400
C	2.69364100	0.08116600	-0.90340100
C	1.67587300	-0.49003000	1.69877500
H	-2.32169200	-1.58869500	-1.40648800
H	-1.28968200	-2.57743000	-0.40101600
H	0.82208400	2.19775500	-0.48883900
H	2.31942400	0.32430000	2.04735900
H	-2.40111500	1.19611400	1.35910000
H	-3.23379100	0.83520500	-0.13774200
H	2.50700200	0.46112600	-1.90678300
H	3.20862800	-0.87915800	-0.99486600
H	3.32789500	0.77215200	-0.34273900
H	0.81845200	-0.58077600	2.36652300
H	0.27018600	1.76963500	1.12557800
H	2.24176900	-1.42363200	1.73346700
C	-2.00755900	-0.78572600	0.59683700

H	-1.26263200	-0.91511900	1.38922900
H	-2.93049000	-1.24157000	0.97758300
C	-1.22870100	1.49517000	-0.44068600
H	-1.54612100	2.54266100	-0.48677500
H	-1.23518300	1.13393400	-1.47608400

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		68.4010			110.8386			141.4655		
Red. masses --		2.3637			2.6789			1.2143		
Frc consts --		0.0065			0.0194			0.0143		
IR Inten --		0.9164			15.3560			0.5396		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.01	-0.04	0.09	-0.06	0.02	-0.12	0.04	-0.02	0.02
2	5	0.00	-0.05	0.05	-0.01	0.05	0.02	0.02	0.02	0.01
3	15	0.01	-0.01	0.02	0.02	-0.04	0.06	-0.01	0.04	-0.01
4	6	-0.03	-0.03	0.14	-0.01	-0.04	0.06	0.00	0.04	0.00
5	6	-0.07	0.04	-0.17	-0.03	-0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.00
6	6	-0.05	0.09	-0.07	-0.03	-0.11	-0.08	0.00	-0.06	-0.01
7	6	0.12	-0.10	-0.04	0.17	0.20	0.06	-0.06	-0.01	0.00
8	1	0.02	-0.14	0.09	-0.02	0.14	-0.18	0.03	-0.07	0.03
9	1	0.04	-0.01	0.20	-0.14	-0.01	-0.19	0.08	-0.01	0.04
10	1	0.04	0.06	0.34	0.01	-0.02	0.10	-0.01	0.04	-0.01
11	1	0.06	-0.07	0.00	0.01	0.38	-0.04	-0.12	0.01	0.06
12	1	-0.24	0.11	-0.22	-0.03	-0.07	0.02	0.00	-0.01	0.00
13	1	0.01	-0.04	-0.33	-0.02	0.04	-0.01	0.01	-0.03	-0.01
14	1	-0.13	0.20	-0.01	-0.09	0.00	-0.02	0.04	0.41	0.15
15	1	-0.06	0.10	-0.21	-0.15	-0.15	-0.22	-0.32	-0.19	-0.48
16	1	-0.01	0.03	-0.04	0.10	-0.23	-0.07	0.26	-0.50	0.22
17	1	0.15	-0.23	0.00	0.22	0.08	0.11	-0.08	-0.09	-0.04
18	1	-0.18	-0.19	0.19	-0.03	-0.08	0.07	0.00	0.05	0.00
19	1	0.20	-0.05	-0.14	0.38	0.33	0.12	-0.01	0.02	-0.03
20	6	-0.04	0.08	0.00	-0.08	-0.04	-0.09	0.03	-0.01	0.01

21	1	-0.05	0.18	0.04	-0.10	-0.11	-0.08	0.03	0.00	0.01
22	1	-0.03	0.09	0.02	-0.11	-0.04	-0.14	0.03	-0.02	0.01
23	6	0.04	0.02	-0.05	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00
24	1	0.07	0.02	-0.09	0.02	0.01	0.09	-0.03	-0.01	-0.01
25	1	0.16	0.01	-0.05	0.01	0.05	0.02	0.01	-0.01	0.00
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		166.7921			192.9177			220.3801		
Red. masses --		1.3425			1.6245			3.4879		
Frc consts --		0.0220			0.0356			0.0998		
IR Inten --		0.2079			2.1430			1.8400		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.03	-0.04	0.00	-0.05	0.04	-0.03	0.00	0.09	0.03
2	5	0.00	0.04	0.01	0.05	-0.09	0.04	0.05	0.13	0.15
3	15	-0.01	0.04	0.01	0.02	-0.02	0.03	0.07	0.07	-0.03
4	6	0.00	0.04	0.06	0.01	-0.02	-0.05	-0.08	0.00	-0.05
5	6	-0.01	-0.03	-0.04	0.03	0.03	0.04	-0.14	0.00	0.03
6	6	-0.02	-0.08	-0.04	-0.03	0.13	-0.01	0.16	-0.10	0.05
7	6	0.01	0.01	0.00	0.03	-0.02	0.02	0.11	-0.10	-0.08
8	1	0.03	-0.10	0.00	0.00	0.17	-0.09	0.06	0.13	-0.04
9	1	0.09	-0.02	0.03	-0.18	0.00	-0.10	-0.02	0.08	-0.02
10	1	0.00	0.07	0.09	0.01	-0.05	-0.10	-0.16	0.05	-0.08
11	1	0.43	-0.25	-0.17	0.33	-0.21	-0.09	0.16	-0.18	0.01
12	1	-0.09	-0.04	-0.05	0.16	0.03	0.06	-0.09	0.04	0.01
13	1	0.02	-0.06	-0.10	-0.01	0.11	0.14	-0.14	0.02	0.04
14	1	-0.03	-0.20	-0.09	-0.10	0.39	0.10	0.30	-0.16	0.01
15	1	-0.06	-0.12	0.06	-0.06	0.14	-0.32	0.05	-0.17	0.20
16	1	0.02	-0.04	-0.14	0.03	-0.03	0.11	0.18	-0.14	0.07
17	1	0.02	0.51	0.08	0.04	0.32	0.08	0.14	-0.19	-0.05
18	1	-0.01	0.01	0.07	0.01	0.05	-0.07	-0.10	0.03	-0.06
19	1	-0.44	-0.25	0.08	-0.28	-0.21	0.08	0.09	-0.12	-0.25
20	6	0.01	-0.03	-0.02	-0.07	0.00	-0.01	-0.16	0.00	0.03
21	1	0.00	-0.01	-0.01	-0.10	-0.09	0.01	-0.23	-0.01	0.10

22	1	0.00	-0.03	-0.03	-0.10	0.03	-0.07	-0.19	-0.05	-0.10
23	6	0.01	0.02	0.03	0.01	-0.06	-0.05	-0.11	-0.10	-0.05
24	1	-0.02	0.02	0.06	0.02	-0.06	-0.14	-0.11	-0.11	-0.18
25	1	0.05	0.06	0.01	-0.01	-0.15	-0.01	-0.11	-0.23	0.00

0 3 -642.3820997

C	-1.70361600	1.72376700	0.32101800
B	-0.33494800	1.00662300	0.38199800
P	1.18997600	0.10180800	0.00868900
C	0.34539400	-1.02938000	-1.07107200
C	-2.09803400	-0.80672300	0.41601700
C	1.97314800	-0.64422600	1.47240900
C	2.48814900	1.06560600	-0.82691900
H	-1.98629300	1.99777100	1.31596300
H	-1.74241700	2.60081200	-0.29069000
H	1.01602100	-1.79249500	-1.40694900
H	3.28678000	0.41413400	-1.11444600
H	-2.92722600	-1.48080400	0.47036600
H	-1.75745200	-0.54066600	1.39485200
H	1.25290500	-1.23284700	2.00125100
H	2.34125100	0.12950900	2.11329500
H	2.78572500	-1.26794100	1.16322000
H	2.07954000	1.53472100	-1.69747700
H	-0.00403600	-0.45769900	-1.90532700
H	2.86133700	1.81459300	-0.16009800
C	-2.59929200	0.56605700	-0.23491700
H	-2.54918300	0.44887900	-1.29730000
H	-3.60075100	0.81295100	0.04972700
C	-0.93966800	-1.69955000	-0.38086300
H	-1.43477700	-2.18777000	-1.19413300
H	-0.59281400	-2.40669700	0.34338400

0 1 -543.925875

C	-0.19332900	2.70016900	-0.00000700
C	0.97951100	1.89602700	0.00000100
C	0.82762600	0.53265300	-0.00006400
C	-0.44621500	-0.05682600	-0.00012900
C	-1.62056400	0.73348000	-0.00007700
C	-1.45585500	2.14488500	-0.00003300
C	-0.43639700	-1.47643100	-0.00009200
C	-1.66519700	-2.11405800	0.00000000
C	-2.86374900	-1.35739400	0.00007700
C	-2.85105800	0.02524500	0.00004000
C	2.71065900	-0.47361400	-1.22219500
C	2.71065800	-0.47330500	1.22220000
H	-0.08368700	3.77870700	0.00002300
H	1.95485000	2.36884400	0.00001200
H	-2.32986800	2.78781900	0.00000100
H	-1.71256300	-3.19830200	0.00002900
H	-3.81661100	-1.87591900	0.00015200
H	-3.78539500	0.57736000	0.00010100
H	3.35212500	-1.35362200	-1.21575600
H	3.30626900	0.44364100	-1.23733700
H	2.07002000	-0.50998100	-2.10289700
H	2.07007700	-0.51013500	2.10292800
H	3.35260800	-1.35295700	1.21566500
H	3.30577700	0.44426500	1.23742400
B	1.02267300	-2.09258000	0.00024500
N	1.86092800	-0.51740100	0.00001600

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	35.0149	134.7345	163.8950
Red. masses --	3.5632	3.3264	4.0540
Frc consts --	0.0026	0.0356	0.0642

IR Inten	--	14.9438			1.5869			2.7510		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.18
2	6	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	0.20
3	6	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	-0.09
4	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	-0.23
5	6	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.22
6	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	-0.08
7	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	-0.07
8	6	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	0.19
9	6	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.18
10	6	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	-0.09
11	6	0.18	0.13	0.09	-0.10	0.17	-0.04	0.04	-0.02	-0.01
12	6	-0.18	-0.13	0.09	0.10	-0.17	-0.04	-0.04	0.02	-0.01
13	1	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	0.39
14	1	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	0.14	0.00	0.00	0.44
15	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.33	0.00	0.00	-0.06
16	1	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	0.43
17	1	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.38
18	1	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	-0.24	0.00	0.00	-0.09
19	1	0.18	0.14	0.10	-0.13	0.15	-0.25	0.05	-0.02	0.03
20	1	0.18	0.14	0.27	-0.08	0.16	0.06	0.04	-0.02	-0.01
21	1	0.31	0.21	0.00	-0.18	0.34	0.01	0.08	-0.04	-0.04
22	1	-0.31	-0.21	0.00	0.18	-0.34	0.01	-0.08	0.04	-0.04
23	1	-0.18	-0.14	0.10	0.13	-0.15	-0.25	-0.05	0.02	0.03
24	1	-0.18	-0.14	0.27	0.08	-0.16	0.06	-0.04	0.02	-0.01
25	5	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	-0.03
26	7	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.04
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies	--	209.6449			221.6706			240.8448		
Red. masses	--	3.3240			1.1606			1.7004		
Frc consts	--	0.0861			0.0336			0.0581		

IR Inten	--	0.5390			4.7571			0.8630		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	0.02	0.06	-0.03	0.00
2	6	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.06	0.00
3	6	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.06	0.00
4	6	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.05	0.00
5	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.00
6	6	0.00	0.00	0.16	0.00	0.00	0.01	0.05	-0.01	0.00
7	6	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	0.05	-0.03	-0.05	0.00
8	6	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	0.04	-0.06	-0.01	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.03	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.03	0.00
11	6	0.08	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.12	0.00
12	6	-0.08	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.12	0.00
13	1	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	0.02	0.08	-0.04	0.00
14	1	0.00	0.00	-0.24	0.00	0.00	-0.02	0.05	-0.10	0.00
15	1	0.00	0.00	0.27	0.00	0.00	0.01	0.07	0.00	0.00
16	1	0.00	0.00	0.29	0.00	0.00	0.05	-0.10	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	-0.30	0.00	0.00	-0.06	-0.05	0.06	0.00
18	1	0.00	0.00	-0.40	0.00	0.00	-0.10	0.01	0.06	0.00
19	1	-0.05	-0.08	-0.09	0.29	0.22	0.19	0.29	0.33	0.09
20	1	0.22	-0.08	0.10	-0.30	0.19	-0.19	-0.30	0.31	-0.12
21	1	0.14	0.20	-0.09	0.03	-0.40	0.00	0.00	-0.20	0.00
22	1	-0.14	-0.20	-0.09	-0.03	0.40	0.00	0.00	-0.20	0.00
23	1	0.05	0.08	-0.09	-0.28	-0.21	0.19	0.29	0.34	-0.09
24	1	-0.22	0.07	0.10	0.29	-0.19	-0.19	-0.31	0.31	0.12
25	5	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.08	-0.02	-0.09	0.00
26	7	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00

03 -543.926249

C	-11.71933900	1.82274500	-0.51829500
C	-11.70733500	0.41009200	-0.55071300
C	-10.52284000	-0.20971100	-0.20903500

C	-9.37798500	0.49619000	0.15433800
C	-9.38030300	1.91234000	0.18977000
C	-10.59664200	2.55369500	-0.16094100
C	-8.23797800	-0.33180700	0.47685900
C	-7.06216800	0.35835300	0.84915900
C	-7.05095900	1.75868400	0.88816900
C	-8.16304100	2.54138400	0.57282400
C	-11.11795500	-2.35853900	0.84073600
C	-10.41093300	-2.29912400	-1.51142300
H	-12.63341000	2.34314600	-0.78092600
H	-12.59803000	-0.13816200	-0.83426500
H	-10.64680000	3.63769900	-0.14875900
H	-6.16328700	-0.19045900	1.10627300
H	-6.13273600	2.26031700	1.17801800
H	-8.10385600	3.62288900	0.61805900
H	-10.82022600	-3.40459600	0.90831400
H	-12.16363700	-2.28304800	0.53367500
H	-10.97842900	-1.87702700	1.80646100
H	-9.76906900	-1.77559600	-2.21700300
H	-10.11096400	-3.34499800	-1.45192000
H	-11.45362200	-2.22322800	-1.82801900
B	-8.68814700	-1.73981600	0.30441800
N	-10.24040800	-1.67337100	-0.16135400

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		79.5219			152.1499			174.3586		
Red. masses --		3.4233			3.0830			3.9400		
Frc consts --		0.0128			0.0421			0.0706		
IR Inten --		2.2056			0.0885			2.5465		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.00	-0.07	-0.03	0.00	0.09	-0.06	0.00	0.19
2	6	0.03	0.00	-0.12	0.02	0.00	-0.07	-0.05	0.00	0.16

3	6	0.03	0.00	-0.09	0.04	0.00	-0.12	0.03	0.00	-0.10
4	6	0.01	0.00	-0.04	0.02	0.00	-0.07	0.06	0.00	-0.19
5	6	-0.01	0.00	0.04	-0.01	0.00	0.04	0.06	0.00	-0.19
6	6	-0.01	0.00	0.02	-0.05	0.00	0.16	0.01	0.00	-0.04
7	6	0.02	0.00	-0.08	0.01	0.00	-0.04	0.01	0.00	-0.04
8	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.09	-0.06	-0.01	0.21
9	6	-0.04	0.00	0.12	0.02	0.00	-0.06	-0.04	0.00	0.14
10	6	-0.04	0.00	0.14	-0.01	0.00	0.05	0.04	0.00	-0.13
11	6	0.14	0.12	0.15	-0.15	0.16	-0.03	0.02	0.06	-0.01
12	6	-0.20	-0.12	0.04	0.14	-0.16	0.05	0.00	-0.06	-0.03
13	1	0.03	0.00	-0.09	-0.05	0.00	0.17	-0.12	-0.01	0.40
14	1	0.05	0.00	-0.16	0.03	0.00	-0.11	-0.11	-0.01	0.35
15	1	-0.02	0.00	0.07	-0.09	-0.01	0.31	0.00	0.00	0.00
16	1	0.01	0.00	-0.02	0.04	0.00	-0.13	-0.14	-0.01	0.46
17	1	-0.06	0.00	0.20	0.03	0.00	-0.09	-0.10	-0.01	0.32
18	1	-0.07	-0.01	0.23	-0.04	0.00	0.12	0.05	0.00	-0.15
19	1	0.11	0.12	0.21	-0.19	0.16	0.16	0.00	0.06	0.04
20	1	0.09	0.13	0.29	-0.10	0.15	-0.18	0.02	0.06	-0.01
21	1	0.29	0.21	0.08	-0.26	0.29	-0.08	0.03	0.11	-0.04
22	1	-0.28	-0.21	-0.10	0.27	-0.29	0.07	0.00	-0.11	-0.06
23	1	-0.21	-0.12	0.10	0.07	-0.17	0.23	-0.03	-0.07	0.03
24	1	-0.24	-0.13	0.18	0.18	-0.15	-0.10	0.00	-0.05	-0.02
25	5	0.05	0.00	-0.17	-0.03	0.00	0.09	0.01	0.00	-0.03
26	7	0.01	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.06

4

5

6

A

A

A

Frequencies --

220.5375

253.2284

261.3596

Red. masses --

3.8458

1.8447

1.1569

Frc consts --

0.1102

0.0697

0.0466

IR Inten --

1.4996

3.3225

0.7298

Atom AN

X

Y

Z

X

Y

Z

X

Y

Z

1

6

-0.02

0.00

0.05

0.01

0.09

0.00

0.00

-0.03

0.00

2

6

0.05

0.00

-0.16

-0.04

0.08

-0.01

0.01

-0.03

0.01

3	6	0.02	0.00	-0.05	-0.06	0.02	-0.02	0.02	-0.01	0.01
4	6	-0.04	0.00	0.12	-0.05	0.02	-0.02	0.02	-0.01	0.00
5	6	-0.02	0.00	0.06	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00
6	6	-0.05	-0.01	0.18	0.02	0.06	0.01	-0.01	-0.02	0.00
7	6	-0.06	0.00	0.19	-0.05	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.00
8	6	-0.05	0.00	0.18	-0.03	-0.04	-0.01	0.01	0.01	0.00
9	6	0.04	0.00	-0.14	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.01	0.00
10	6	0.07	0.01	-0.22	0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.01	0.00
11	6	0.08	0.03	0.00	0.08	-0.08	0.02	-0.06	0.06	-0.01
12	6	-0.07	-0.03	-0.05	0.10	-0.11	0.03	0.00	0.01	0.00
13	1	-0.02	0.00	0.07	0.02	0.11	0.01	-0.01	-0.04	0.00
14	1	0.11	0.01	-0.35	-0.06	0.12	-0.02	0.03	-0.05	0.01
15	1	-0.08	-0.01	0.28	0.05	0.06	0.02	-0.02	-0.02	0.00
16	1	-0.08	-0.01	0.27	-0.05	-0.07	-0.02	0.02	0.03	0.00
17	1	0.10	0.01	-0.32	0.02	-0.07	0.01	-0.01	0.02	0.00
18	1	0.14	0.01	-0.45	0.05	-0.02	0.02	-0.02	0.01	0.01
19	1	0.07	0.03	-0.01	0.18	-0.05	-0.01	-0.41	-0.06	-0.30
20	1	0.06	0.06	0.08	0.06	-0.18	0.06	-0.08	0.48	0.16
21	1	0.17	0.04	-0.02	0.07	-0.09	0.02	0.25	-0.21	0.07
22	1	-0.13	-0.03	-0.12	-0.20	0.15	-0.06	-0.26	0.24	-0.07
23	1	-0.05	-0.02	-0.05	0.58	0.03	0.05	0.31	0.10	-0.10
24	1	-0.09	-0.06	0.03	0.04	-0.59	0.13	-0.07	-0.27	0.15
25	5	0.01	0.00	-0.02	-0.04	0.03	-0.01	0.02	-0.01	0.01
26	7	0.02	0.00	-0.08	-0.02	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00

94 2rp

0 1 -830.560305

C	-0.80344400	2.76318400	0.00690200
C	0.46123100	2.12725600	0.01530800
C	0.52764600	0.75020100	-0.00419900
C	-0.65761500	-0.03912800	-0.04815300
C	-1.92829400	0.60239900	0.00697600
C	-1.96546300	2.02203700	0.01637300
C	-0.52340100	-1.47727600	-0.14086000

C	-1.69978200	-2.21847300	-0.08211700
C	-2.96226100	-1.59795000	0.04067800
C	-3.08142100	-0.22307000	0.05778800
C	3.16223400	0.08066600	-1.26087400
C	2.76198200	-0.42598600	1.59411200
H	-0.85397100	3.84632400	0.01281200
H	1.36078300	2.73287400	0.05145900
H	-2.92792300	2.52366400	0.02972600
H	-1.63638500	-3.29853300	-0.15815700
H	-3.85519300	-2.21201100	0.08850200
H	-4.06129500	0.24076600	0.11107700
H	3.96757200	-0.65613500	-1.27187500
H	3.56745300	1.06775700	-1.02915200
H	2.69851200	0.09889400	-2.24840900
H	2.03173900	-0.63424200	2.37740500
H	3.51964800	-1.21185500	1.60174400
H	3.23190300	0.54033800	1.78570600
P	1.91405500	-0.44085700	-0.03169200
B	0.89957400	-2.12162800	-0.41741000

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		29.8515			97.8355			146.1417		
Red. masses --		3.8155			3.2362			1.5299		
Frc consts --		0.0020			0.0183			0.0193		
IR Inten --		14.6656			5.3465			33.3372		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.10	0.00	-0.01	-0.02
2	6	0.00	0.01	-0.10	0.00	0.01	-0.07	0.00	-0.01	0.02
3	6	0.00	0.01	-0.06	0.00	0.01	-0.14	0.00	-0.01	0.03
4	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.01
5	6	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.01
6	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	-0.03

7	6	0.01	0.00	-0.04	0.00	0.01	-0.08	-0.01	0.00	-0.04
8	6	0.02	-0.01	0.07	0.01	0.00	-0.09	-0.01	-0.01	-0.03
9	6	0.03	-0.01	0.17	0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.04
10	6	0.01	-0.01	0.13	0.01	-0.01	0.08	0.00	0.00	0.03
11	6	0.14	0.11	0.15	0.12	-0.16	0.02	-0.04	-0.03	0.00
12	6	-0.19	-0.17	0.06	-0.16	0.19	0.05	0.06	0.04	0.02
13	1	0.00	0.00	-0.14	-0.01	0.00	0.18	0.01	-0.01	-0.04
14	1	0.00	0.01	-0.13	0.00	0.01	-0.12	0.00	-0.01	0.06
15	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.30	0.00	0.00	-0.05
16	1	0.01	-0.01	0.06	0.01	0.01	-0.11	-0.02	0.00	-0.07
17	1	0.04	-0.02	0.25	0.01	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.07
18	1	0.01	-0.02	0.18	0.01	-0.01	0.17	0.00	-0.01	0.06
19	1	0.14	0.11	0.17	0.11	-0.17	0.20	0.08	0.09	0.15
20	1	0.12	0.09	0.29	0.10	-0.13	-0.08	-0.20	0.07	-0.16
21	1	0.25	0.21	0.10	0.22	-0.30	-0.03	-0.01	-0.29	-0.01
22	1	-0.29	-0.20	-0.05	-0.25	0.34	0.00	0.00	0.53	0.10
23	1	-0.22	-0.20	0.08	-0.18	0.17	0.25	-0.26	-0.26	0.18
24	1	-0.17	-0.20	0.19	-0.14	0.21	-0.05	0.46	-0.11	-0.23
25	15	0.00	0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.05
26	5	-0.01	0.07	-0.23	0.02	-0.05	0.05	-0.02	0.06	-0.15

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	157.8541	165.1885	168.7407
Red. masses --	1.8557	3.5961	1.7507
Frc consts --	0.0272	0.0578	0.0294
IR Inten --	13.3229	10.8156	7.2016

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.06	-0.02	-0.03	-0.01	0.01	0.16	0.04	-0.01	0.06
2	6	0.04	-0.05	0.00	-0.01	0.01	0.20	0.03	-0.03	0.02
3	6	0.00	-0.05	0.01	-0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.03	-0.03
4	6	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.01	-0.16	0.00	-0.02	-0.02
5	6	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.19	0.01	0.00	-0.04
6	6	0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.09	0.03	0.00	0.01

7	6	-0.03	-0.03	-0.05	0.01	0.00	-0.05	0.00	-0.02	0.05
8	6	-0.04	-0.01	-0.05	0.03	-0.01	0.17	-0.01	-0.01	0.08
9	6	-0.02	0.01	0.03	0.03	-0.01	0.15	-0.01	0.02	0.00
10	6	0.00	0.02	0.05	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.02	-0.07
11	6	-0.05	0.06	0.03	0.03	-0.11	-0.03	-0.01	0.13	0.00
12	6	0.03	0.13	0.03	-0.03	0.05	0.00	-0.07	0.00	-0.02
13	1	0.08	-0.02	-0.05	-0.01	0.01	0.33	0.05	-0.01	0.12
14	1	0.06	-0.08	0.01	-0.01	0.00	0.41	0.04	-0.04	0.04
15	1	0.05	0.02	-0.02	-0.01	0.00	-0.12	0.04	0.01	0.02
16	1	-0.07	-0.01	-0.09	0.03	-0.02	0.34	-0.02	-0.01	0.16
17	1	-0.03	0.03	0.07	0.04	-0.01	0.32	-0.02	0.03	-0.01
18	1	0.00	0.03	0.10	0.00	-0.01	-0.13	0.00	0.03	-0.13
19	1	0.07	0.19	0.09	-0.10	-0.25	-0.07	0.29	0.45	0.28
20	1	-0.21	0.14	-0.03	0.19	-0.18	-0.02	-0.43	0.34	-0.17
21	1	-0.04	-0.08	0.02	0.00	-0.03	-0.01	0.13	-0.27	-0.07
22	1	0.15	-0.26	0.03	-0.01	-0.08	-0.02	-0.13	0.11	-0.05
23	1	0.39	0.48	-0.06	0.09	0.16	-0.01	-0.14	-0.07	0.07
24	1	-0.39	0.33	0.10	-0.17	0.11	0.04	0.01	-0.03	-0.05
25	15	0.00	-0.03	0.04	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.05
26	5	-0.04	-0.01	-0.12	0.00	0.05	-0.11	0.00	-0.07	0.08

03 -830.574430

C	-11.65094900	2.00712600	-0.51759500
C	-11.64394700	0.59506900	-0.55753700
C	-10.49127700	-0.07898800	-0.20841500
C	-9.31872900	0.61732000	0.18770100
C	-9.32567900	2.03624700	0.22753400
C	-10.52293100	2.70520100	-0.13572700
C	-8.14549800	-0.17069500	0.53977000
C	-7.01021900	0.55525400	0.92447900
C	-7.01475400	1.96331700	0.96447900
C	-8.13305800	2.70363400	0.62868900
C	-11.34915500	-2.69701400	0.95981000

C	-10.46808300	-2.61482700	-1.79620000
H	-12.55294600	2.54339600	-0.79028000
H	-12.54060400	0.06432700	-0.86079200
H	-10.54394100	3.79029900	-0.11034000
H	-6.10532800	0.02363700	1.19815400
H	-6.11014800	2.48021800	1.26886400
H	-8.11385100	3.78724800	0.66648700
H	-11.09632700	-3.75654300	1.04007100
H	-12.36752700	-2.59654900	0.57685300
H	-11.28477300	-2.24414500	1.94930100
H	-9.85076300	-2.10961000	-2.53913600
H	-10.19632800	-3.67247000	-1.77253600
H	-11.52172500	-2.51858900	-2.06879900
P	-10.13919900	-1.86901400	-0.14883500
B	-8.35236000	-1.67579800	0.42842200

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		64.7103			108.6631			165.1028		
Red. masses --		3.6402			3.0718			3.5020		
Frc consts --		0.0090			0.0214			0.0562		
IR Inten --		1.4338			0.0570			0.9132		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.00	-0.07	-0.04	0.00	0.11	-0.05	-0.02	0.16
2	6	0.04	0.00	-0.11	0.01	0.00	-0.02	-0.05	-0.02	0.17
3	6	0.03	0.00	-0.09	0.03	0.00	-0.09	0.02	0.00	-0.04
4	6	0.01	0.00	-0.04	0.02	0.00	-0.05	0.04	0.00	-0.12
5	6	-0.01	0.00	0.04	-0.01	0.00	0.04	0.05	0.00	-0.17
6	6	-0.01	0.00	0.02	-0.04	0.00	0.14	0.02	-0.01	-0.07
7	6	0.02	0.00	-0.07	0.02	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.01	0.00	0.03	0.02	0.00	-0.08	-0.07	0.00	0.22
9	6	-0.05	0.00	0.14	0.01	0.00	-0.04	-0.04	0.00	0.12
10	6	-0.05	0.00	0.15	-0.01	0.00	0.04	0.04	0.01	-0.14

11	6	0.13	0.12	0.16	-0.15	0.19	-0.04	0.01	0.08	-0.01
12	6	-0.20	-0.13	0.05	0.15	-0.19	0.04	-0.02	-0.04	-0.03
13	1	0.03	0.00	-0.09	-0.06	0.00	0.19	-0.11	-0.02	0.33
14	1	0.05	0.00	-0.16	0.01	0.00	-0.04	-0.10	-0.03	0.34
15	1	-0.02	0.00	0.07	-0.07	-0.01	0.23	0.02	0.00	-0.10
16	1	-0.01	0.00	0.02	0.03	0.00	-0.10	-0.13	-0.01	0.43
17	1	-0.07	-0.01	0.22	0.02	0.00	-0.06	-0.08	0.00	0.25
18	1	-0.07	-0.01	0.23	-0.03	0.00	0.09	0.06	0.01	-0.22
19	1	0.12	0.12	0.23	-0.27	0.18	0.09	-0.15	0.03	-0.11
20	1	0.08	0.11	0.28	-0.11	0.26	-0.15	-0.01	0.26	0.08
21	1	0.26	0.21	0.11	-0.21	0.29	-0.08	0.16	-0.01	0.01
22	1	-0.27	-0.22	-0.07	0.21	-0.27	0.04	-0.12	0.01	-0.08
23	1	-0.24	-0.13	0.11	0.19	-0.18	0.21	0.10	-0.01	-0.03
24	1	-0.23	-0.11	0.17	0.18	-0.27	-0.07	-0.05	-0.16	0.05
25	15	0.02	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00	-0.05
26	5	0.06	0.01	-0.18	-0.01	0.00	0.02	0.02	0.00	-0.03

4

5

6

A

A

A

Frequencies --	167.7831	173.3817	203.7263
Red. masses --	1.8941	1.0906	1.3988
Frc consts --	0.0314	0.0193	0.0342
IR Inten --	0.3827	0.0212	0.0010

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

11	6	0.08	-0.11	0.02	-0.03	0.02	0.00	-0.02	0.10	0.05
12	6	0.09	-0.12	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.11	-0.05
13	1	0.02	0.11	0.02	0.02	-0.01	-0.07	-0.01	-0.05	-0.01
14	1	-0.05	0.12	0.00	0.01	-0.01	-0.02	0.01	-0.06	0.00
15	1	0.06	0.06	0.01	0.00	-0.01	-0.03	-0.02	-0.04	-0.01
16	1	-0.04	-0.06	0.00	0.02	0.01	-0.06	0.01	-0.01	0.00
17	1	0.02	-0.05	0.02	0.00	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.00
18	1	0.04	-0.01	0.01	-0.02	0.00	0.04	-0.01	-0.02	0.00
19	1	0.33	-0.04	0.12	-0.32	-0.07	-0.33	0.14	0.17	0.41
20	1	0.07	-0.38	0.00	-0.06	0.41	0.18	0.02	-0.17	-0.12
21	1	-0.03	-0.02	-0.01	0.25	-0.26	0.11	-0.22	0.42	-0.08
22	1	-0.16	0.09	-0.04	-0.25	0.26	-0.04	-0.23	0.41	-0.04
23	1	0.51	-0.01	0.05	0.36	0.10	-0.10	0.33	0.19	-0.25
24	1	0.03	-0.55	0.09	-0.06	-0.32	0.15	-0.05	-0.16	0.09
25	15	-0.04	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
26	5	-0.05	0.02	-0.03	0.01	0.00	-0.02	0.01	-0.02	0.00

95 2rphn

0 1 -351.019562

C	-2.15205700	-0.79245200	0.01677200
C	-2.27394200	0.60105200	0.01358200
C	-1.13507800	1.40016400	-0.00720800
C	0.14268200	0.81950500	-0.01961100
C	0.23683800	-0.58808500	-0.01563500
C	-0.89585800	-1.39878600	0.00119800
C	1.66033500	-1.07844800	-0.04034800
N	2.46680300	0.20546200	0.05759400
B	1.52329300	1.57766500	-0.05518600
H	-3.04366900	-1.41008300	0.03185700
H	-3.25977800	1.05268300	0.02680400
H	-1.21988600	2.48160600	-0.01324800
H	-0.81760800	-2.48159700	0.00400000
H	1.90461100	-1.75371800	0.78301000

H	1.91455200	-1.58421600	-0.97476000
H	2.93352400	0.31254300	0.95977900
H	3.20664600	0.27852300	-0.63717500

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	60.7600	170.1460	213.9357
Red. masses --	1.8290	3.6615	3.6948
Frc consts --	0.0040	0.0625	0.0996
IR Inten --	25.9200	35.2906	1.0308

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.14
2	6	-0.01	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	0.17
3	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.16	0.00	0.00	-0.12
4	6	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.25
5	6	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.23
6	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.00	-0.14
7	6	0.00	-0.01	0.11	0.00	0.00	0.21	0.00	-0.01	0.10
8	7	0.02	0.00	-0.17	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.08
9	5	-0.01	0.01	0.14	0.00	-0.02	-0.34	0.00	0.01	0.16
10	1	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	-0.27	0.01	0.00	0.36
11	1	-0.01	0.00	-0.09	0.01	0.00	0.24	0.01	0.00	0.43
12	1	0.00	0.00	0.03	0.01	0.00	0.24	0.00	0.00	-0.10
13	1	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.33	0.00	0.00	-0.14
14	1	0.00	0.20	0.28	-0.09	0.17	0.38	-0.20	0.18	0.32
15	1	-0.03	-0.27	0.24	0.11	-0.21	0.34	0.22	-0.24	0.28
16	1	0.42	-0.03	-0.38	-0.10	0.23	0.03	0.16	-0.05	0.00
17	1	-0.29	0.04	-0.50	0.07	-0.16	0.07	-0.12	0.07	-0.05

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	367.1627	426.1637	489.0307
Red. masses --	4.0403	2.7710	3.1163
Frc consts --	0.3209	0.2965	0.4391

IR Inten	--	7.3567			0.8706			4.7434		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	0.13	0.00	0.00	0.00	0.11	0.02	0.00	0.21
2	6	0.04	0.13	0.00	-0.01	0.00	0.07	0.02	0.00	-0.20
3	6	0.13	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.20	0.01	0.01	0.07
4	6	0.00	-0.22	0.00	0.00	0.00	0.18	0.01	0.01	0.22
5	6	0.02	-0.22	0.00	0.00	0.00	0.17	0.00	0.01	-0.20
6	6	-0.11	-0.07	0.00	-0.01	0.00	-0.20	0.01	-0.01	-0.08
7	6	0.15	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.00
8	7	-0.05	0.21	-0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.05	0.02	-0.03
9	5	-0.17	-0.06	0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.02	-0.04	-0.03
10	1	-0.12	0.22	-0.01	0.00	0.00	0.15	0.02	0.00	0.52
11	1	0.08	0.22	-0.01	0.00	0.00	0.08	0.01	-0.01	-0.45
12	1	0.34	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	-0.60	0.01	0.01	0.08
13	1	-0.33	-0.09	0.00	-0.01	0.00	-0.59	0.02	-0.01	-0.04
14	1	0.33	0.07	-0.01	0.13	-0.10	-0.12	-0.19	0.19	0.21
15	1	0.27	0.08	-0.01	-0.14	0.14	-0.10	0.19	-0.22	0.17
16	1	-0.07	0.29	-0.01	0.08	-0.01	-0.03	-0.23	0.13	0.06
17	1	-0.05	0.32	0.00	-0.03	0.00	-0.06	0.10	-0.06	0.12

0 3 -351.008864

C	2.14690800	-0.82944700	-0.06528700
C	2.28736700	0.56559600	-0.01246600
C	1.18189300	1.40236800	0.04617900
C	-0.13066700	0.86276300	0.05633900
C	-0.24022100	-0.56471700	0.02624500
C	0.86230800	-1.39500200	-0.04175500
C	-1.67322100	-1.01045300	0.17407800
N	-2.49289800	0.22435900	-0.17245300
B	-1.50353300	1.47209700	0.05231300
H	3.02155600	-1.46637600	-0.12120600
H	3.28279500	0.99814800	-0.02584900
H	1.31963400	2.47778200	0.07462500

H	0.74468200	-2.47507400	-0.06523900
H	-1.96625500	-1.84945200	-0.46068300
H	-1.91196100	-1.25693600	1.21449900
H	-2.78413600	0.18209500	-1.15180400
H	-3.34457200	0.27217300	0.38126100

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		129.5113			199.1160			257.3182		
Red. masses --		2.2712			3.2008			3.3914		
Frc consts --		0.0224			0.0748			0.1323		
IR Inten --		10.7689			18.2939			7.0470		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.00	-0.13	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.01	-0.16
2	6	-0.01	0.00	-0.04	0.01	-0.01	0.19	0.01	0.01	-0.07
3	6	0.00	0.00	0.09	0.01	0.00	0.09	0.02	0.00	0.16
4	6	0.00	0.00	0.10	0.00	0.01	-0.13	0.01	0.00	0.12
5	6	-0.01	0.00	0.09	0.00	0.01	-0.12	0.01	0.00	0.21
6	6	-0.01	0.00	-0.04	-0.01	0.00	-0.18	0.00	0.01	0.09
7	6	0.00	0.04	0.16	0.03	0.03	0.16	-0.01	-0.04	-0.07
8	7	0.05	-0.03	-0.18	-0.03	-0.03	0.10	-0.03	0.01	0.03
9	5	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.24	0.03	0.02	-0.31
10	1	-0.02	0.01	-0.24	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.01	-0.37
11	1	-0.01	0.00	-0.08	0.02	-0.02	0.42	0.00	0.01	-0.19
12	1	0.00	0.00	0.13	0.02	-0.01	0.21	0.02	0.00	0.20
13	1	-0.02	0.00	-0.08	-0.02	0.01	-0.25	0.01	0.01	0.07
14	1	0.00	-0.13	0.39	-0.09	-0.09	0.37	0.12	0.10	-0.32
15	1	-0.03	0.36	0.23	0.22	0.22	0.25	-0.20	-0.32	-0.18
16	1	0.37	-0.13	-0.27	-0.24	-0.20	0.16	-0.35	-0.06	0.13
17	1	-0.12	-0.01	-0.45	0.08	0.07	0.26	0.14	0.11	0.29
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		373.2798			422.0127			503.4855		

Red. masses --	3.9633	2.8860	3.3096
Frc consts --	0.3254	0.3028	0.4943
IR Inten --	9.0924	6.3891	0.1352

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.07	-0.12	0.01	0.00	0.02	0.08	0.06	-0.02	0.20
2	6	0.02	-0.13	0.00	0.00	0.01	0.11	0.04	0.00	-0.19
3	6	0.11	0.04	-0.02	-0.01	0.01	-0.19	0.03	-0.03	0.09
4	6	0.00	0.22	0.03	0.01	-0.02	0.15	0.00	-0.01	0.24
5	6	0.02	0.23	0.03	-0.01	-0.02	0.21	0.01	0.01	-0.14
6	6	-0.13	0.09	-0.01	-0.01	0.01	-0.21	0.03	0.02	-0.09
7	6	0.15	-0.02	-0.03	-0.03	-0.03	0.02	-0.01	0.05	-0.01
8	7	-0.02	-0.19	0.00	0.02	0.01	-0.01	-0.11	-0.01	-0.03
9	5	-0.15	0.02	0.02	0.03	0.01	-0.05	-0.03	-0.03	-0.09
10	1	-0.13	-0.21	0.01	0.00	0.02	0.07	0.06	-0.04	0.39
11	1	0.06	-0.23	0.00	0.01	0.01	0.13	0.02	0.04	-0.53
12	1	0.32	0.01	-0.06	-0.04	0.02	-0.59	0.04	-0.02	-0.04
13	1	-0.35	0.11	-0.05	0.00	0.01	-0.61	0.03	0.02	-0.19
14	1	0.40	-0.05	-0.11	0.07	0.04	-0.12	-0.12	-0.08	0.22
15	1	0.16	-0.17	-0.06	-0.19	-0.15	-0.05	0.17	0.28	0.08
16	1	-0.01	-0.21	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.32	-0.07	0.04
17	1	-0.03	-0.31	0.00	0.02	0.05	-0.01	0.02	0.03	0.16

96 2rpy

0 1 -351.027887

C	2.12996400	0.76932100	0.06304100
C	2.18898100	-0.63275600	0.10052600
C	1.03373400	-1.37076200	-0.01337500
N	-0.18123700	-0.75243800	-0.10806700
C	-0.26329600	0.62969600	-0.07540500
C	0.88405900	1.39696700	-0.03083800
C	-1.70409300	1.03510100	-0.11691800
C	-2.47004200	-0.26797800	0.30951400
B	-1.52933600	-1.37886400	-0.31533600

H	3.03790300	1.35736800	0.11082600
H	3.13736700	-1.14711500	0.18972800
H	1.00971700	-2.45047500	-0.06735700
H	0.80403700	2.47766500	-0.02453100
H	-1.90311700	1.93271200	0.47416300
H	-1.99077200	1.25887700	-1.15310000
H	-3.50687800	-0.26744000	-0.02359500
H	-2.46876500	-0.35773800	1.40774000

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		136.6290			197.6300			255.4162		
Red. masses --		2.7507			3.1773			3.4130		
Frc consts --		0.0303			0.0731			0.1312		
IR Inten --		0.9212			10.2318			64.9011		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	-0.01	0.16	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	0.11
2	6	-0.02	-0.01	0.05	-0.04	-0.01	0.20	-0.01	-0.01	0.05
3	6	-0.01	0.00	-0.11	-0.03	0.00	0.08	-0.01	0.02	-0.13
4	7	0.00	0.01	-0.14	0.00	0.01	-0.13	0.00	0.03	-0.09
5	6	0.00	0.01	-0.13	0.00	0.01	-0.10	0.00	0.02	-0.15
6	6	-0.01	0.01	0.04	0.01	0.00	-0.18	0.01	0.01	-0.08
7	6	-0.01	-0.03	-0.15	-0.02	0.02	0.18	0.01	0.07	0.11
8	6	0.08	0.01	0.21	0.06	-0.06	0.08	-0.01	0.02	-0.11
9	5	-0.02	0.01	0.06	0.01	0.05	-0.20	0.03	-0.20	0.30
10	1	-0.03	-0.01	0.33	0.00	-0.02	-0.03	-0.01	-0.01	0.27
11	1	-0.03	-0.01	0.10	-0.06	-0.01	0.43	-0.02	-0.01	0.12
12	1	-0.01	0.00	-0.18	-0.04	-0.01	0.16	-0.04	0.02	-0.20
13	1	-0.01	0.00	0.10	0.04	0.00	-0.27	0.03	0.01	-0.06
14	1	-0.02	0.09	-0.34	0.09	-0.10	0.39	0.16	-0.06	0.36
15	1	-0.09	-0.30	-0.18	-0.21	0.22	0.27	-0.12	0.38	0.22
16	1	0.00	-0.02	0.46	0.01	-0.02	0.24	0.07	-0.04	-0.36
17	1	0.38	0.17	0.22	0.24	-0.25	0.06	-0.35	0.01	-0.10

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		374.7392			410.0520			494.7095		
Red. masses --		3.8980			3.0376			3.3859		
Frc consts --		0.3225			0.3009			0.4882		
IR Inten --		3.4832			10.7556			12.9920		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.04	-0.12	-0.08	0.01	-0.01	0.13	-0.05	0.04	-0.16
2	6	-0.04	-0.13	0.02	0.02	-0.03	0.06	-0.09	0.04	0.21
3	6	-0.12	0.04	0.02	0.04	0.00	-0.19	-0.02	-0.03	-0.14
4	7	0.01	0.20	-0.03	0.01	0.02	0.18	-0.01	-0.04	-0.13
5	6	-0.02	0.21	0.06	0.00	0.02	0.11	0.03	-0.04	0.24
6	6	0.10	0.07	0.06	0.04	-0.01	-0.22	-0.03	0.05	0.03
7	6	-0.14	-0.03	-0.04	-0.05	-0.05	0.01	0.12	-0.02	0.01
8	6	0.03	-0.17	-0.02	-0.08	-0.03	0.03	0.04	0.05	-0.01
9	5	0.18	-0.03	0.07	0.02	0.10	-0.05	-0.02	-0.07	0.06
10	1	0.11	-0.22	-0.25	0.01	-0.01	0.23	0.00	-0.01	-0.45
11	1	-0.09	-0.21	0.00	0.03	-0.03	0.01	-0.09	0.07	0.41
12	1	-0.31	0.05	-0.06	0.04	0.02	-0.55	0.03	-0.02	-0.30
13	1	0.32	0.09	0.06	0.10	0.00	-0.57	-0.07	0.05	-0.09
14	1	-0.39	-0.02	-0.13	-0.15	0.01	-0.11	0.00	0.10	-0.22
15	1	-0.10	-0.18	-0.09	0.04	-0.18	-0.05	0.38	-0.22	-0.11
16	1	0.04	-0.33	-0.05	-0.04	-0.04	-0.09	0.06	0.10	-0.08
17	1	0.02	-0.15	-0.02	-0.19	0.00	0.03	-0.06	0.09	-0.01

03 -351.044173

C	2.14169300	0.80649300	0.04410400
C	2.22747300	-0.59831000	0.00224700
C	1.10073300	-1.37545000	-0.03600200
N	-0.16992800	-0.79093800	-0.03062800
C	-0.26807500	0.62378100	-0.01576100
C	0.85435400	1.39765600	0.02898900
C	-1.72311000	1.02828100	-0.09300400

C	-2.55698700	-0.27994500	0.09369800
B	-1.45350800	-1.40326800	-0.00143800
H	3.03260900	1.41842300	0.08091000
H	3.19275300	-1.09057900	0.00279300
H	1.11593600	-2.45559600	-0.06116100
H	0.74497400	2.47643600	0.04456100
H	-1.95954400	1.79342300	0.65079300
H	-1.92350900	1.47154600	-1.07487600
H	-3.35875800	-0.36904900	-0.64307600
H	-3.04391100	-0.30673400	1.07602100

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		65.4549			196.8476			226.6698		
Red. masses --		1.9142			3.1201			3.4630		
Frc consts --		0.0048			0.0712			0.1048		
IR Inten --		0.2470			5.3086			0.4603		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.00	0.10	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.19
2	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.20	0.00	0.00	0.08
3	6	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.08	0.01	0.00	-0.17
4	7	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	-0.11
5	6	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	-0.22
6	6	-0.01	0.00	0.06	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	-0.10
7	6	0.00	-0.02	-0.16	0.01	-0.01	-0.14	-0.01	0.02	0.05
8	6	0.02	0.02	0.16	-0.02	0.01	-0.12	-0.01	-0.01	0.02
9	5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.23	0.02	0.00	0.29
10	1	-0.01	0.00	0.19	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.41
11	1	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.43	0.00	-0.01	0.15
12	1	0.00	0.00	-0.14	0.01	0.01	-0.21	0.01	0.00	-0.28
13	1	-0.01	0.00	0.10	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	-0.11
14	1	-0.02	0.21	-0.41	-0.11	0.08	-0.27	0.15	-0.15	0.27
15	1	0.02	-0.33	-0.31	0.18	-0.13	-0.23	-0.21	0.24	0.20

16	1	-0.20	-0.01	0.42	0.19	-0.12	-0.34	0.21	-0.14	-0.21
17	1	0.33	0.10	0.32	-0.30	0.17	-0.26	-0.31	0.10	-0.14
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		382.3650			401.7066			480.7102		
Red. masses --		3.9790			3.2161			3.0591		
Frc consts --		0.3428			0.3058			0.4165		
IR Inten --		2.5718			4.1949			1.0024		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.05	0.13	-0.01	0.00	0.01	0.15	0.02	0.02	-0.14
2	6	0.02	0.15	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00	0.22
3	6	0.10	-0.03	0.01	0.01	0.01	-0.14	0.00	0.01	-0.17
4	7	-0.02	-0.21	-0.03	-0.01	-0.02	0.25	-0.01	0.00	-0.12
5	6	0.03	-0.22	-0.03	0.00	-0.02	0.10	0.01	-0.01	0.24
6	6	-0.11	-0.07	0.02	0.00	0.00	-0.24	0.02	0.01	-0.03
7	6	0.17	0.03	0.01	0.02	0.00	0.02	0.02	-0.03	0.02
8	6	-0.02	0.20	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.01
9	5	-0.16	-0.02	0.01	-0.03	-0.01	-0.13	-0.02	0.00	0.08
10	1	-0.11	0.22	-0.02	-0.01	0.01	0.23	0.03	0.02	-0.32
11	1	0.06	0.23	0.01	0.00	0.02	-0.12	-0.01	-0.01	0.47
12	1	0.31	-0.03	0.06	0.03	0.02	-0.54	0.01	0.02	-0.30
13	1	-0.34	-0.10	0.06	-0.01	0.00	-0.62	0.00	0.01	-0.11
14	1	0.37	0.05	0.06	-0.03	0.02	-0.02	-0.16	0.15	-0.23
15	1	0.23	0.13	0.04	0.09	-0.03	-0.01	0.25	-0.27	-0.14
16	1	-0.03	0.32	-0.01	-0.11	0.11	0.09	0.13	-0.03	-0.17
17	1	-0.04	0.28	-0.01	0.13	-0.05	0.06	-0.25	0.06	-0.11

97 2rpyph

0 1 -503.475667

C	-2.98197400	1.15231900	-0.02781200
C	-3.42062600	-0.18355500	-0.17309000
C	-2.51460100	-1.20943200	-0.09982800
N	-1.18121100	-0.95416500	0.04371000

C	-0.71023500	0.37094100	0.03986300
C	-1.62682600	1.41880400	0.09443700
B	-0.03608900	-1.80792500	0.41117900
C	1.20662200	-1.00996000	0.01826000
C	0.73474400	0.34427900	0.03427000
C	2.58456500	-1.24483900	-0.07885600
C	3.46468300	-0.17337500	-0.14563600
C	2.99366100	1.14977800	-0.04489700
C	1.63693000	1.41714600	0.06685700
H	-3.70157600	1.96126400	-0.01271600
H	-4.47013000	-0.41310400	-0.30234900
H	-2.79556200	-2.25433500	-0.11024700
H	-1.26750600	2.43658900	0.18908800
H	2.96082600	-2.26208100	-0.09783000
H	4.52904900	-0.35223000	-0.24941500
H	3.70296200	1.96984700	-0.04761800
H	1.28920400	2.44019400	0.16781800

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		102.1079			122.9087			213.3375		
Red. masses --		4.7742			3.7302			4.5258		
Frc consts --		0.0293			0.0332			0.1214		
IR Inten --		2.4980			0.7338			2.0595		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.01	0.01	0.17	0.00	0.01	-0.16	0.16	0.13	-0.04
2	6	-0.04	0.01	0.23	-0.01	-0.02	0.10	0.04	0.16	0.02
3	6	-0.04	0.01	0.05	-0.01	-0.01	0.21	-0.07	0.05	0.01
4	7	-0.01	-0.01	-0.15	0.00	0.01	0.08	-0.03	-0.12	-0.02
5	6	0.00	-0.02	-0.20	0.00	0.01	-0.03	0.03	-0.15	0.01
6	6	0.02	-0.01	-0.07	0.00	0.02	-0.20	0.17	-0.03	-0.02
7	5	0.00	0.00	-0.13	0.03	0.00	-0.03	0.00	-0.14	0.00
8	6	0.01	-0.01	-0.11	0.00	-0.01	-0.13	0.03	-0.12	0.03

9	6	0.00	-0.01	-0.21	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	-0.15	0.04
10	6	0.04	0.00	0.12	0.00	0.00	-0.18	0.07	0.05	0.02
11	6	0.04	0.01	0.25	0.00	0.01	-0.03	-0.05	0.16	-0.02
12	6	0.01	0.01	0.10	0.00	0.00	0.19	-0.16	0.13	-0.04
13	6	-0.01	0.00	-0.14	0.00	-0.02	0.17	-0.17	-0.04	0.01
14	1	0.00	0.01	0.31	0.01	0.02	-0.31	0.24	0.20	-0.09
15	1	-0.07	0.02	0.42	-0.02	-0.03	0.19	0.02	0.26	0.03
16	1	-0.05	0.01	0.09	-0.01	-0.01	0.37	-0.21	0.09	0.00
17	1	0.04	-0.01	-0.11	0.01	0.03	-0.37	0.33	-0.09	-0.04
18	1	0.05	0.01	0.23	0.00	0.01	-0.31	0.21	0.10	0.00
19	1	0.06	0.01	0.46	0.00	0.02	-0.04	-0.04	0.26	-0.06
20	1	0.00	0.02	0.19	0.01	-0.01	0.36	-0.24	0.19	-0.09
21	1	-0.04	0.00	-0.23	0.00	-0.03	0.33	-0.31	-0.08	0.00

4

5

6

A

A

A

Frequencies -- 257.5179 292.7092 397.7033

Red. masses -- 4.9566 5.8074 5.1346

Frc consts -- 0.1937 0.2932 0.4785

IR Inten -- 0.7940 25.4950 31.4590

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.02	0.01	-0.06	0.02	0.00	0.17	0.10	-0.04	0.11
2	6	0.05	0.02	-0.18	0.02	0.02	-0.08	0.18	-0.04	0.07
3	6	0.01	0.00	0.09	-0.01	-0.01	-0.15	0.21	-0.02	-0.12
4	7	-0.01	0.01	0.24	-0.02	-0.03	0.06	0.11	0.05	0.07
5	6	-0.01	0.00	0.15	0.00	-0.04	-0.19	0.04	0.05	0.03
6	6	0.00	0.00	0.20	0.03	-0.01	-0.02	0.10	0.07	-0.16
7	5	0.03	-0.03	-0.02	0.02	0.24	0.44	-0.01	-0.17	-0.01
8	6	-0.02	-0.02	-0.24	0.02	-0.05	-0.01	-0.13	0.04	0.04
9	6	-0.02	-0.02	-0.16	-0.02	-0.05	-0.19	-0.02	0.06	0.04
10	6	0.00	0.00	-0.10	0.03	-0.02	-0.13	-0.21	-0.03	-0.07
11	6	0.01	0.01	0.19	-0.01	0.02	-0.08	-0.20	-0.04	0.05
12	6	-0.02	0.01	0.05	-0.04	0.00	0.17	-0.11	-0.02	0.05
13	6	-0.04	-0.01	-0.21	-0.04	-0.04	0.01	-0.09	0.08	-0.08

14	1	0.02	0.01	-0.17	0.01	-0.01	0.39	0.04	-0.10	0.20
15	1	0.07	0.03	-0.42	0.03	0.06	-0.20	0.18	-0.07	0.08
16	1	0.01	0.00	0.11	-0.04	0.00	-0.30	0.28	-0.04	-0.27
17	1	0.00	0.00	0.27	0.06	-0.03	0.00	0.10	0.09	-0.37
18	1	0.01	0.01	-0.09	0.07	0.00	-0.21	-0.26	-0.05	-0.16
19	1	0.04	0.01	0.47	-0.01	0.06	-0.13	-0.20	-0.07	0.09
20	1	-0.03	0.02	0.16	-0.04	0.00	0.40	-0.03	-0.08	0.08
21	1	-0.08	-0.01	-0.31	-0.08	-0.06	0.09	-0.10	0.09	-0.20

0 3 -503.498437

C	2.98336200	1.16556500	-0.00004500
C	3.43473300	-0.17582800	0.00008200
C	2.53028700	-1.20238200	-0.00001900
N	1.17714800	-0.95662000	0.00001700
C	0.70641900	0.37740100	-0.00001900
C	1.61557900	1.42437300	-0.00008400
B	0.05091200	-1.88134200	-0.00002000
C	-1.20250400	-1.00214000	-0.00001200
C	-0.73975800	0.35018500	0.00000300
C	-2.58315700	-1.24275900	-0.00004500
C	-3.47365900	-0.17563700	-0.00001600
C	-3.00354200	1.14925400	0.00005700
C	-1.64108600	1.42115300	0.00004900
H	3.69519500	1.98113800	0.00005000
H	4.49254000	-0.40473600	0.00020300
H	2.81579100	-2.24577500	0.00010600
H	1.24598300	2.44288200	-0.00023300
H	-2.95641800	-2.26136900	-0.00007700
H	-4.54204500	-0.36116700	0.00006200
H	-3.71389700	1.96846800	0.00011300
H	-1.29179200	2.44850900	0.00005200

		A			A			A		
Frequencies --		104.5948			125.1149			216.7757		
Red. masses --		4.7876			3.7111			4.5424		
Frc consts --		0.0309			0.0342			0.1258		
IR Inten --		2.0684			0.2164			1.2272		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	0.16	0.00	0.00	-0.18	0.16	-0.13	0.00
2	6	0.00	0.00	0.24	0.00	0.00	0.09	0.05	-0.17	0.00
3	6	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.21	-0.07	-0.05	0.00
4	7	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	0.08	-0.03	0.12	0.00
5	6	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.15	0.00
6	6	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.20	0.18	0.04	0.00
7	5	0.00	0.00	-0.14	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.14	0.00
8	6	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	-0.12	0.03	0.12	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.15	0.00
10	6	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	-0.18	0.07	-0.05	0.00
11	6	0.00	0.00	0.25	0.00	0.00	-0.04	-0.05	-0.16	0.00
12	6	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	0.18	-0.16	-0.13	0.00
13	6	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.18	-0.18	0.04	0.00
14	1	0.00	0.00	0.29	0.00	0.00	-0.33	0.24	-0.20	0.00
15	1	0.00	0.00	0.44	0.00	0.00	0.19	0.03	-0.27	0.00
16	1	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	0.37	-0.21	-0.09	0.00
17	1	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	-0.37	0.33	0.09	0.00
18	1	0.00	0.00	0.21	0.00	0.00	-0.31	0.22	-0.10	0.00
19	1	0.00	0.00	0.47	0.00	0.00	-0.06	-0.03	-0.27	0.00
20	1	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	0.35	-0.24	-0.19	0.00
21	1	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	0.34	-0.33	0.09	0.00

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		262.2026			300.2443			419.0033		
Red. masses --		5.0091			5.4079			3.1489		
Frc consts --		0.2029			0.2872			0.3257		
IR Inten --		0.1985			0.0243			5.2851		

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	0.12
2	6	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.07
3	6	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	-0.17
4	7	0.00	0.00	0.25	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.21
5	6	0.00	0.00	0.14	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	0.14
6	6	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.22
7	5	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.45	0.00	0.00	-0.09
8	6	0.00	0.00	-0.24	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.08
9	6	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	0.05
10	6	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	-0.14	0.00	0.00	0.01
11	6	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.06
12	6	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	-0.07
13	6	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.02
14	1	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	0.44	0.00	0.00	0.13
15	1	0.00	0.00	-0.44	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00	-0.05
16	1	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	-0.30	0.00	0.00	-0.60
17	1	0.00	0.00	0.26	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	-0.63
18	1	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	0.04
19	1	0.00	0.00	0.46	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00	0.15
20	1	0.00	0.00	0.21	0.00	0.00	0.44	0.00	0.00	-0.14
21	1	0.00	0.00	-0.29	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	0.06