

Supplementary Information

Energetics competition in centrally four-coordinated water clusters and Raman spectroscopic signature for hydrogen bonding

Bo Wang,^{†ab} Wanrun Jiang,^{†ab} Yang Gao,^{ab} Zhiyuan Zhang,^{ab} Changqing Sun,^c Fang Liu^{*ab} and Zhigang Wang^{*ab}

¹*Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun 130012, China*

²*Jilin Provincial Key Laboratory of Applied Atomic and Molecular Spectroscopy (Jilin University), Changchun 130012, China*

³*School of Electrical and Electronic Engineering, Nanyang Technological University, Singapore 639798, Singapore.*

[†]These authors contributed equally to this work.

Correspondence to: fliu110@163.com (F. L.) or wangzg@jlu.edu.cn (Z. W.)

Contents:

Part 1. The Cartesian coordinates of the optimized structures of different clusters.

Part 2. Interaction energy details.

Part 3. The mass-weighted atomic displacements of these O-H stretching modes.

Part 4. Raman spectra for deuterated rest of the water molecules apart and C4CW molecule.

Part 1. The Cartesian coordinates of the optimized structures of different clusters.

n=17

O	0.12203400	0.00664300	-0.07093600
H	0.81264400	0.52680800	-0.54115700
H	-0.50773000	-0.26900500	-0.77757700
O	2.02667600	1.30733500	-1.53018900
H	2.40956800	1.88915900	-0.84175400
H	2.66012700	0.57139000	-1.65348800
O	-1.47506900	-0.67186000	-2.14746500
H	-2.38726700	-0.65700100	-1.78766400
H	-1.20854100	-1.61241600	-2.19187500
O	1.33897600	-1.72185300	1.59449100
H	0.68819400	-1.90400400	2.29586400
H	0.84934300	-1.14010100	0.96670600
O	-1.13621900	0.91771200	2.12598100
H	-0.66744400	0.59971500	1.31928400
H	-1.18936600	0.12852800	2.69419100
O	2.68118300	2.51474100	0.82940700
H	3.27577200	3.23549400	1.05489200
H	1.75939400	2.80405000	1.10827900
O	-0.61754000	-3.19555800	-1.53598700
H	0.35509100	-3.16120800	-1.28523300
H	-0.75582000	-4.03917400	-1.97547700
O	-3.72598500	-0.58314900	-0.63103200
H	-3.60711600	0.31021500	-0.17151700
H	-4.65793100	-0.67525500	-0.84612700
O	-1.43382300	3.26250500	-0.80463000
H	-1.05441900	2.74481000	-1.57527700
H	-1.70408900	4.11602500	-1.15547900

O	-3.26013700	1.64701500	0.56793900
H	-2.74906200	2.27379900	0.01909300
H	-2.64104500	1.41129900	1.29209000
O	-2.26701700	-2.57133500	0.70133000
H	-1.67645500	-2.87313700	-0.01416600
H	-2.86187900	-1.91095300	0.29660000
O	0.25208300	3.22014100	1.44634300
H	-0.30477200	3.32092100	0.64847800
H	-0.20121800	2.54266300	1.98108600
O	3.60753500	-0.91917100	-1.21666900
H	3.69906900	-0.65252300	-0.25246100
H	4.49194000	-1.10136400	-1.54639500
O	-1.10466100	-1.77937800	2.93067600
H	-1.58309800	-2.11815400	2.12271600
H	-1.45311100	-2.26122300	3.68520200
O	-0.40522900	1.86219400	-2.76841400
H	-0.79861800	0.97077400	-2.77954400
H	0.53384300	1.72875600	-2.54155000
O	3.56086200	-0.13706600	1.27381200
H	2.84064900	-0.67954900	1.65369600
H	3.25516600	0.78923500	1.29063400
O	1.85631700	-3.11020500	-0.71972400
H	2.46285100	-2.43331800	-1.07355900
H	1.75544200	-2.86495000	0.22203900
n=19			
O	3.68498600	-1.47532100	-0.41199300
H	3.28113000	-1.61080300	-1.29043200
H	2.97187600	-1.69856100	0.22456900

O	-0.20607700	-3.64537400	0.38384200
H	0.50738100	-3.09009200	0.79443500
H	-0.04139400	-4.56033600	0.62824700
O	1.80709800	1.10552500	-1.91120200
H	2.62774400	1.26669100	-1.40078400
H	1.96264800	0.28052000	-2.41608500
O	-1.30619500	-0.40796200	3.29456500
H	-0.34726900	-0.38982200	3.45614400
H	-1.47894800	0.42297800	2.81166900
O	-1.93131200	-0.76759300	-1.91525900
H	-2.11259100	0.11570600	-2.29851000
H	-2.71927400	-0.99940700	-1.37275300
O	1.45592900	-1.77160300	1.15907800
H	0.90329700	-1.09852600	0.68222700
H	1.55912700	-1.40037500	2.06095000
O	-0.10322600	3.11209100	-1.87638400
H	0.01830700	3.38636200	-0.94657500
H	0.63325700	2.49887200	-2.05825600
O	0.00364000	0.01457400	-0.18323500
H	-0.68927300	-0.34731100	-0.78647200
H	0.64221400	0.48396300	-0.76862200
O	2.31066300	1.90525500	1.96489100
H	1.65519400	2.52681200	1.59433800
H	2.91554000	1.66212700	1.23786900
O	-3.68999600	1.61809200	0.04091500
H	-3.37643400	1.80539600	-0.86230400
H	-3.92304500	0.67045700	0.04616000
O	-2.35069700	1.90106100	-2.43315900
H	-2.72235000	2.32398400	-3.21209500

H	-1.50310400	2.39424100	-2.21673600
O	3.91355200	1.09053900	-0.16956500
H	4.81467300	1.41454600	-0.24996600
H	3.93971100	0.08417400	-0.22241000
O	-1.42977500	1.66366900	1.43931300
H	-2.32052700	1.72690200	1.00193800
H	-0.91867400	1.04725400	0.86497800
O	0.27107100	3.53356700	0.88822900
H	-0.47874100	2.94235100	1.19447100
H	0.15111000	4.39351000	1.30099300
O	-0.04137400	-2.74747300	-2.28787600
H	-0.78933400	-2.12032300	-2.32509900
H	-0.10124700	-3.16922300	-1.40908900
O	2.17972600	-1.48388100	-2.78682800
H	1.33191400	-1.99249400	-2.59962800
H	2.50096700	-1.79487300	-3.63777600
O	-2.36771700	-2.27900800	1.66733500
H	-1.94621700	-1.65397100	2.30871000
H	-1.65809300	-2.80414500	1.25874500
O	-3.87220500	-1.17510800	-0.08647200
H	-4.69226800	-1.67131200	-0.15432700
H	-3.31737800	-1.61292700	0.64143000
O	1.53208200	-0.17706100	3.35773500
H	2.02937600	-0.19569500	4.17959700
H	1.80929700	0.65144200	2.86902800

n=20

O	-0.05162900	2.79343000	-2.69263500
H	-0.98619000	2.51542500	-2.61907100

H	0.46620600	1.96630900	-2.74666100
O	-0.25475400	0.01965200	-0.10809400
H	-0.02148500	-0.67260400	0.55408600
H	-0.38083600	0.87679600	0.36282000
O	-1.10042900	-3.80773200	0.15853100
H	-1.98165300	-3.31133100	0.12281900
H	-1.29984400	-4.72847600	0.34836000
O	-1.34560400	-0.50627500	3.26094600
H	-0.74388400	-1.13841400	2.81975900
H	-0.80068900	0.28614400	3.42990000
O	3.94353200	-1.19408800	-0.52344000
H	3.39247100	-1.49545200	-1.27559800
H	3.99001000	-0.22982600	-0.57175200
O	1.41539500	0.55913700	-2.10145600
H	1.76068200	-0.24688200	-2.52830600
H	0.80048600	0.24839600	-1.39152800
O	-2.66321600	1.79877700	-2.38582000
H	-2.92097600	1.88803700	-1.41915300
H	-3.35859500	2.21912900	-2.89917700
O	-1.96484100	-0.86607500	-1.97058000
H	-2.33119500	-0.07941600	-2.41323000
H	-1.40748300	-0.48605000	-1.25050100
O	2.57620100	0.86661700	2.32002100
H	2.70530000	1.18871100	1.39817100
H	2.74722800	-0.09166500	2.29699100
O	2.97191000	1.75806000	-0.24577800
H	2.65412800	2.67543800	-0.27135900
H	2.45077600	1.33113700	-0.96372800
O	0.39779600	1.67268300	3.42609600

H	0.59174300	2.15103500	4.23644500
H	1.27562100	1.34833400	3.04773500
O	-3.46256300	-0.30673200	1.74483900
H	-4.23161900	-0.30571700	2.32224900
H	-2.65989400	-0.33981500	2.34657400
O	0.28387100	-1.99045100	1.61270400
H	1.24965800	-2.11618700	1.71752300
H	-0.10135100	-2.78179400	1.17814700
O	-0.60089600	2.46020000	1.04218100
H	0.00028300	3.07862200	0.57152900
H	-0.29031400	2.37810800	1.96806400
O	1.04704800	3.88284300	-0.58968500
H	1.08434400	4.84078700	-0.65568900
H	0.61011300	3.54976100	-1.43085700
O	-0.10672400	-2.90535500	-2.31030600
H	-0.77502700	-2.20261000	-2.43673800
H	-0.37000200	-3.35249100	-1.48321600
O	-3.16100300	2.00970600	0.16706400
H	-3.35746600	1.18638800	0.65487500
H	-2.32015200	2.32628500	0.55372100
O	-3.23501200	-2.38306200	-0.08561100
H	-2.99996500	-1.85582400	-0.87795400
H	-3.37693000	-1.71647000	0.61728800
O	2.99090200	-1.86937200	1.80730700
H	3.60853300	-2.42027400	2.29551700
H	3.39354900	-1.68791700	0.90936000
O	2.30170500	-1.99032900	-2.60851900
H	2.68244900	-2.39846800	-3.39084700
H	1.39845100	-2.41021000	-2.46869700

n=21

O	-3.09578500	1.15277800	-2.25360900
H	-3.91637500	1.49198100	-2.62061000
H	-2.63774800	1.92456300	-1.80608100
O	-1.92871200	3.09895400	-0.96278800
H	-0.99557300	3.32541500	-1.14043700
H	-2.03859800	3.04660100	0.00662200
O	-2.71778100	-0.59299300	-0.23609600
H	-3.01711900	-0.07107400	-1.01216700
H	-2.77006900	-1.54979200	-0.44392200
O	-1.16489400	-0.36477900	-3.70182400
H	-1.93083400	0.11141800	-3.33874900
H	-0.40227200	0.17788000	-3.41902000
O	-3.05726100	0.41398900	2.27513500
H	-3.08717700	-0.00361800	1.38912800
H	-2.44108000	-0.13930400	2.79506900
O	-2.20137500	2.80561700	1.80726400
H	-2.58793700	1.90274200	2.04072900
H	-2.68526700	3.46679100	2.30910600
O	-2.29487800	-3.24065100	-0.51552500
H	-2.90183200	-3.98258500	-0.58150800
H	-1.80144200	-3.32914700	0.35846700
O	-0.50019600	-2.74536600	-2.63978800
H	-0.80878200	-1.90208700	-3.05721800
H	-1.13178800	-2.96355400	-1.93032100
O	0.76150200	3.60072400	-1.58434100
H	1.42860200	3.46944700	-0.84268800
H	0.98457800	4.41933500	-2.03507100

O	0.82928100	0.97521800	-2.36252000
H	0.47433100	0.66148300	-1.49685800
H	0.83107400	1.95081100	-2.29942700
O	-0.08536400	0.01675000	0.00799100
H	-1.03673600	-0.23402500	-0.07464600
H	0.41062300	-0.80289000	0.23757100
O	-1.23330900	-1.28019100	3.55837000
H	-1.46007400	-1.54640800	4.45421100
H	-0.33315600	-0.83982900	3.61570900
O	0.37971700	1.91763300	1.85786100
H	-0.45720400	2.40759100	1.98871700
H	0.16353900	1.23444400	1.17541300
O	-0.90118300	-3.31570000	1.66509600
H	-0.00528300	-3.05620400	1.36686600
H	-1.12546100	-2.66294100	2.35729700
O	2.35119100	3.07704300	0.40024800
H	2.95079600	2.32011100	0.26555100
H	1.69200400	2.76313900	1.05794500
O	1.94706100	-2.82197300	-1.90717000
H	2.33838400	-3.62009700	-2.27239600
H	0.98545000	-2.78836000	-2.24089100
O	1.36994000	-2.20737800	0.63721500
H	1.70771400	-2.54461200	-0.22373100
H	2.12913600	-1.90110100	1.17113700
O	3.16919300	-0.31775200	-2.05908500
H	2.37877400	0.21254100	-2.31565600
H	2.85251300	-1.24257500	-2.06184700
O	1.03957500	0.00433500	3.65754400
H	1.83925300	-0.35823200	3.24034800

H	0.83593800	0.81451300	3.13911800
O	3.97275000	0.74321700	0.12142900
H	4.89300700	0.99181300	-0.00867100
H	3.67637000	0.28332000	-0.73891400
O	3.27827600	-0.90661500	2.11099000
H	3.60816500	-0.25629400	1.43800500
H	4.04955500	-1.28409800	2.54263300

n=23

0 1

O	-2.52669300	-0.10360800	2.06757700
H	-2.22433900	-1.00114700	2.37058800
H	-1.95924000	0.06940400	1.27053600
O	-0.86321400	0.56012900	0.14871400
H	-0.07986200	0.61428200	0.74406700
H	-0.61293800	-0.00108700	-0.62935900
O	-0.13919400	-0.82073300	-1.97776000
H	0.06020900	-1.69614900	-1.56277500
H	-0.96278100	-0.88809500	-2.50787500
O	1.93559000	0.95571900	-2.00886300
H	1.17984900	0.33380700	-2.08023700
H	2.71794200	0.42360100	-2.25692200
O	1.19382000	-1.97946900	1.92872700
H	1.16762700	-1.00318900	2.04016200
H	2.14312600	-2.21102300	1.96794200
O	0.47160500	-2.95062800	-0.49772900
H	0.69566400	-2.55229800	0.37893800
H	-0.33794200	-3.47731400	-0.33582300
O	1.03662700	0.70467500	2.03333900

H	1.72371600	1.25254200	1.57335500
H	0.52302300	1.24191800	2.66277000
O	2.70484500	1.92925400	0.41165000
H	2.36819200	1.59443200	-0.45520800
H	2.49711000	2.88718900	0.42645700
O	-1.72203900	2.84952800	-0.93775900
H	-1.35467500	2.02651800	-0.53844600
H	-1.00670000	3.14699800	-1.54591300
O	-2.64174200	-0.78976700	-3.02853400
H	-3.05385300	0.05020400	-2.64450100
H	-2.89592000	-0.83276300	-3.95457900
O	-1.99296900	-3.92892300	0.22384100
H	-2.31049400	-4.83605900	0.21141300
H	-2.66756300	-3.37675900	-0.27534900
O	1.56168700	4.39890500	0.35055800
H	1.88923200	5.28143100	0.54310100
H	0.68599300	4.29559800	0.82653800
O	4.05567800	-0.80992300	-2.16197700
H	4.65525400	-0.98075300	-2.89338100
H	3.69254400	-1.69564400	-1.86588300
O	3.89655400	-2.30753900	1.47062500
H	4.22019600	-1.40611700	1.17597000
H	4.58364100	-2.68537200	2.02628200
O	-3.70153300	-2.44223400	-1.05018800
H	-4.12121000	-1.74503900	-0.51075800
H	-3.34678900	-1.98079700	-1.83516700
O	-3.73419400	1.23937000	-1.86875800
H	-4.11200100	0.89142900	-1.04132800
H	-3.10654000	1.95260100	-1.61558300

O	-0.81708400	4.04286200	1.38811700
H	-0.97203400	3.36024000	2.06441700
H	-1.31913100	3.75611900	0.59513500
O	-1.14390000	1.89125300	3.26274500
H	-1.38044500	2.09824600	4.17098100
H	-1.75455500	1.17131200	2.96047000
O	4.70025000	-0.02878900	0.45525900
H	4.15774400	0.76883100	0.59733400
H	4.65118600	-0.19836600	-0.50469200
O	3.18353100	-3.06232100	-1.14453100
H	3.48500600	-3.00479400	-0.21833600
H	2.21945800	-3.20018800	-1.08778500
O	-4.60227800	-0.22880700	0.41845000
H	-3.94336300	-0.17115700	1.16003100
H	-5.47894400	-0.13570400	0.80114800
O	-1.50674800	-2.52071500	2.61181700
H	-0.53549600	-2.46018200	2.59298700
H	-1.73685700	-3.10469400	1.86449600
O	0.62180100	3.50043100	-2.20234400
H	1.14296800	2.69492700	-2.35853700
H	1.05077200	3.94370300	-1.45051800

n=25

O	-0.57805200	-0.14836800	-2.23784100
H	0.04067400	-0.04911600	-1.47226000
H	-1.11896000	0.66943500	-2.18928100
O	1.79637100	-0.97822300	-3.49820100
H	2.46826300	-0.32141300	-3.20021400
H	0.92077100	-0.59416600	-3.30971000

O	1.09864200	0.21206500	-0.20233000
H	0.57859200	0.19507900	0.63807600
H	1.75152700	-0.52635300	-0.14337500
O	1.96021600	2.57501500	-1.13309900
H	2.32215800	3.04233200	-0.35495800
H	1.62442000	1.71980400	-0.76327900
O	-2.06526900	-2.11445300	-1.23032300
H	-3.01326100	-1.94900300	-1.40849800
H	-1.55973900	-1.39065300	-1.68424800
O	3.39416100	1.24668800	2.25869800
H	2.97552900	2.08335900	1.97873500
H	3.87118700	0.89044400	1.48355600
O	-1.97271100	2.10712800	-1.54192800
H	-1.47800400	2.90140800	-1.82039200
H	-1.87931700	2.09484000	-0.55967200
O	2.85363800	-1.84565800	0.01093800
H	2.62349700	-2.31430600	0.86347100
H	2.68801000	-2.45166500	-0.74439900
O	-4.61214300	1.30497300	-1.33940900
H	-4.70498900	1.54335300	-0.39855800
H	-3.74778900	1.67534300	-1.60767400
O	-4.49019200	1.47876000	1.47715400
H	-4.50688900	0.47952600	1.58153700
H	-5.13866100	1.84095900	2.08696400
O	2.31211300	3.66738500	1.37537500
H	1.34523900	3.93489300	1.35857500
H	2.80502800	4.42527900	1.70185400
O	1.80364900	-0.36136300	3.54375200
H	1.95885900	-0.24198400	4.48472000

H	2.44498200	0.24848600	3.06567400
O	2.14526500	-2.86374700	2.31224000
H	1.30107500	-3.34155300	2.19451700
H	1.97445100	-2.07634800	2.86174300
O	-0.39317800	0.11036400	2.01797100
H	0.25373600	-0.03122700	2.74037400
H	-0.93045500	-0.71572000	1.90069700
O	-1.87575800	-2.01286900	1.44166300
H	-1.90194700	-2.02511000	0.44885700
H	-1.42076900	-2.84439600	1.68630900
O	-0.22596800	-4.16661900	-0.98970900
H	0.56806400	-3.85296900	-1.46789900
H	-0.95426900	-3.56554000	-1.24106100
O	-0.19548500	-4.17983100	1.60132700
H	-0.37019100	-5.06782100	1.92531800
H	-0.14773200	-4.23858700	0.59600300
O	-4.69711100	-1.30315800	-1.29016100
H	-5.41162600	-1.63966200	-1.83768900
H	-4.68161100	-0.30544800	-1.40139600
O	-1.86043700	2.19293600	1.18509900
H	-2.79689700	2.04885900	1.43620900
H	-1.34250500	1.46642900	1.60162500
O	3.63786500	0.82513500	-2.53875100
H	4.13240700	0.53223200	-1.75428600
H	3.15761400	1.60976400	-2.22021900
O	-0.18842400	4.36913400	1.05252500
H	-0.85575400	3.67824900	1.24496200
H	-0.25670000	4.51633100	0.09273000
O	-4.50139500	-1.12713100	1.51262700

H	-3.62225800	-1.52070500	1.68077000
H	-4.70754900	-1.35837900	0.58735400
O	2.07216400	-3.17799200	-2.20783600
H	1.95306800	-2.33927000	-2.76799300
H	2.57972000	-3.79876400	-2.73801700
O	4.64692500	0.03488000	0.04171700
H	4.09448800	-0.79328700	0.03928700
H	5.56051100	-0.22968400	0.18102300
O	-0.09534200	4.11800700	-1.77525800
H	0.70943900	3.54324400	-1.66062600
H	0.08820300	4.73902600	-2.48515200

Part 2. Interaction energy details.

$$E_{int} = E_{total} - E_C - E_{cage}$$

$$E_{int(C-NN4W)} = E_{C-NN4W} - E_C - E_{NN4W}$$

$$E_{int(C-rest)} = E_{C-rest} - E_C - E_{rest}$$

where E_{int} stands for the interaction energy between C4CW molecule and overall water cage; E_{total} stands for the total energy of water cluster; E_{cage} stands for the total energy of overall water cage; E_C stands for the total energy of C4CW molecule; E_{C-NN4W} stands for the total energy of C4CW molecule and its NN4W molecules; E_{NN4W} stands for the total energy of the NN4W molecules; $E_{int(C-NN4W)}$ stands for the interaction energy between C4CW molecule and its NN4W molecules; E_{C-rest} stands for the total energy of C4CW molecule and rest water molecules; E_{rest} stands for the total energy of rest water molecules; $E_{int(C-rest)}$ stands for the interaction energy between C4CW molecule and rest water molecules.

Part 3. The mass-weighted atomic displacements of these O-H stretching modes for n=17

112

113

114

	A			A			A			
Frequencies --	1767.8195			1777.0942			2943.9620			
Red. masses --	1.0617			1.0650			1.0729			
Frc consts --	1.9549			1.9816			5.4788			
IR Inten --	25.7654			41.8102			1022.9196			
Raman Activ --	0.3865			0.4378			129.2904			
Depolar (P) --	0.4342			0.4872			0.0936			
Depolar (U) --	0.6055			0.6552			0.1712			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
2	1	-0.13	-0.03	-0.23	0.17	0.04	0.30	0.00	0.00	0.00
3	1	0.14	0.12	-0.18	-0.19	-0.14	0.22	-0.02	-0.01	-0.03
4	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.08	-0.04	-0.01	-0.03	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
6	1	0.03	0.03	0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
7	8	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
8	1	-0.01	-0.20	-0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.08	0.00	0.02
9	1	-0.15	-0.04	0.05	-0.02	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
10	8	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
11	1	-0.06	0.05	-0.04	0.22	-0.17	0.15	0.00	0.00	0.00
12	1	-0.09	-0.01	0.07	0.32	0.02	-0.24	0.00	0.00	0.00
13	8	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	-0.01	0.03	-0.01	-0.04	0.35	-0.17	0.01	-0.01	-0.03
15	1	0.02	0.00	0.01	-0.14	0.16	0.21	0.00	-0.01	0.01
16	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.06	0.04	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.06	0.11	0.04	0.00	-0.01	0.00	0.05	-0.02	-0.02
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.01	-0.06	-0.03	0.00	-0.03	-0.02	-0.05	0.00	-0.01

21	1	0.04	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.06	-0.03
23	1	-0.20	0.02	-0.02	-0.05	0.00	-0.01	0.10	0.86	0.45
24	1	-0.02	0.10	0.05	0.00	0.03	0.01	-0.06	-0.01	-0.01
25	8	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
26	1	-0.02	0.11	-0.07	0.00	0.02	-0.02	0.04	-0.06	-0.09
27	1	0.03	-0.03	-0.09	0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00
28	8	-0.03	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
29	1	0.29	-0.01	0.26	0.16	-0.01	0.13	0.04	0.06	-0.03
30	1	0.28	0.28	-0.14	0.16	0.13	-0.08	0.05	-0.01	0.07
31	8	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
32	1	-0.07	0.07	-0.08	-0.04	0.05	-0.06	0.00	0.00	0.00
33	1	0.05	-0.03	-0.12	0.04	-0.02	-0.08	-0.04	0.04	-0.02
34	8	0.02	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	-0.19	-0.18	0.11	-0.11	-0.11	0.06	0.00	0.00	0.01
36	1	-0.21	-0.01	-0.18	-0.11	-0.03	-0.12	0.00	0.00	-0.01
37	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	1	0.00	0.01	0.00	-0.06	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01
39	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
40	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
41	1	-0.01	-0.02	0.02	-0.03	-0.03	0.04	-0.03	-0.02	-0.05
42	1	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
43	8	-0.01	0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
44	1	0.23	-0.10	0.05	-0.13	0.06	-0.04	-0.01	-0.02	0.00
45	1	-0.04	-0.25	0.01	0.02	0.15	-0.01	0.01	0.00	0.00
46	8	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.04	-0.06	-0.01	-0.05	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00
48	1	0.06	0.02	-0.03	-0.06	-0.02	0.02	0.00	-0.01	0.00
49	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00

50	1	0.00	0.00	0.01	0.01	0.06	0.12	0.00	0.00	0.00
51	1	0.02	0.01	0.00	0.08	0.11	-0.02	0.00	0.00	-0.01
		115			116			117		
		A			A			A		
Frequencies --		3048.5998			3070.2469			3089.7410		
Red. masses --		1.0702			1.0704			1.0707		
Frc consts --		5.8605			5.9446			6.0224		
IR Inten --		337.3819			1785.0819			583.6016		
Raman Activ --		391.3410			61.1265			28.5068		
Depolar (P) --		0.0382			0.1428			0.7489		
Depolar (U) --		0.0735			0.2499			0.8564		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	-0.02	-0.02	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.00
3	1	0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.01	-0.04	0.01	0.00	0.01
4	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
5	1	-0.03	-0.04	-0.04	-0.02	-0.03	-0.03	-0.02	-0.03	-0.02
6	1	-0.02	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.06	-0.02
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	1	-0.01	0.03	0.01	0.02	-0.06	-0.01	-0.01	0.03	0.01
10	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
12	1	0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.03	-0.04	-0.01	0.01	0.00
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
15	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	8	-0.05	0.02	0.01	-0.03	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00
17	1	-0.04	-0.03	-0.01	-0.02	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00

18	1	0.70	-0.22	-0.22	0.42	-0.13	-0.13	0.19	-0.06	-0.06
19	8	0.02	0.00	0.01	-0.05	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.01
20	1	-0.33	-0.02	-0.08	0.76	0.04	0.20	-0.44	-0.02	-0.11
21	1	0.01	0.02	0.01	-0.02	-0.04	-0.02	0.01	0.03	0.01
22	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.03	0.02	0.00	-0.01	-0.01
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	8	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
26	1	-0.11	0.15	0.23	-0.06	0.08	0.12	-0.02	0.03	0.04
27	1	0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
28	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	-0.02	0.01	0.02	0.04	-0.02	-0.04	-0.02	0.01	0.02
33	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
34	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.06	-0.01	0.07	0.03	-0.01	0.04	0.01	0.00	0.01
36	1	0.03	0.03	-0.03	0.02	0.02	-0.02	0.01	0.01	-0.01
37	8	0.00	0.01	0.03	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	-0.05
38	1	-0.05	-0.09	-0.38	0.03	0.07	0.30	0.09	0.21	0.81
39	1	-0.02	0.01	0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.05	-0.01	-0.02
40	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
41	1	0.03	0.02	0.04	-0.06	-0.04	-0.09	0.02	0.02	0.03
42	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
43	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	1	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
45	1	-0.03	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
46	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

47	1	0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.02	0.02	-0.06	-0.04	0.04
48	1	0.03	-0.07	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.05	0.01
49	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	-0.03	-0.03	0.02	0.05	0.05	-0.02	0.00	0.01	-0.01
51	1	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.06	0.00	-0.01	-0.06
		118			119			120		
		A			A			A		
Frequencies --		3121.8261			3205.5534			3367.2186		
Red. masses --		1.0696			1.0682			1.0553		
Frc consts --		6.1415			6.4671			7.0494		
IR Inten --		1924.7656			1230.9333			1137.6132		
Raman Activ --		24.2660			55.7420			299.1255		
Depolar (P) --		0.4459			0.2029			0.0117		
Depolar (U) --		0.6168			0.3374			0.0232		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.04
2	1	0.04	0.03	-0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.29	-0.22	0.17
3	1	-0.03	-0.01	-0.02	-0.06	-0.02	-0.06	0.42	0.19	0.43
4	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
5	1	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.06	-0.06
6	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.06	0.02
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01
8	1	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.01	0.15	-0.01	-0.06
9	1	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.01	-0.04	0.12	0.01
10	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.02	-0.02
11	1	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	-0.05	0.02	0.01	-0.03
12	1	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.03	-0.03	0.22	-0.27	0.29
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.02
14	1	0.03	-0.01	-0.05	0.02	-0.02	-0.04	-0.16	0.11	0.28

15	1	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.04	-0.04	0.01	0.02	-0.03
16	8	0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.31	0.10	0.10	-0.01	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.01
19	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.01	0.00	0.00	0.12	0.01	0.03	0.07	0.01	0.02
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
22	8	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.01	0.11	0.06	0.01	0.07	0.04	0.01	0.06	0.03
24	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	8	0.02	-0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	-0.35	0.48	0.69	-0.02	0.02	0.03	-0.02	0.03	0.04
27	1	0.02	-0.06	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	-0.03	-0.04	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.02	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.05	0.02	-0.07
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.03	0.06	0.01	-0.01	-0.01
33	1	-0.01	0.01	0.00	0.05	-0.05	0.05	-0.02	0.02	0.00
34	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.02	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
36	1	-0.02	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.02
37	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	1	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01	0.04
39	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	8	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	-0.05	0.00	0.00	0.00
41	1	-0.03	-0.02	-0.05	0.47	0.33	0.78	0.05	0.03	0.08
42	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	-0.07	0.00	0.00	-0.01
43	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

44	1	0.02	0.06	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.00
45	1	-0.07	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
46	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.04	-0.03
48	1	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00
49	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
50	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.02	-0.01
51	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.07
		121			122			123		
		A			A			A		
Frequencies --		3397.9949			3434.1156			3519.6747		
Red. masses --		1.0669			1.0816			1.0544		
Frc consts --		7.2580			7.5151			7.6957		
IR Inten --		1020.8603			1559.1860			6.8304		
Raman Activ --		36.3298			43.2355			38.0871		
Depolar (P) --		0.7010			0.4153			0.3717		
Depolar (U) --		0.8242			0.5869			0.5419		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.02
2	1	-0.01	0.00	0.00	0.47	0.36	-0.31	0.30	0.23	-0.17
3	1	0.05	0.03	0.06	0.36	0.16	0.39	-0.20	-0.09	-0.19
4	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01
5	1	0.00	0.01	0.00	0.08	0.14	0.15	0.07	0.12	0.13
6	1	0.01	-0.01	0.00	0.13	-0.16	-0.04	0.10	-0.12	-0.03
7	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.00
8	1	0.03	0.00	-0.01	0.21	-0.01	-0.08	-0.17	0.01	0.06
9	1	-0.01	0.01	0.00	-0.05	0.16	0.01	0.03	-0.11	-0.01
10	8	0.02	-0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.01
11	1	-0.02	-0.01	0.04	-0.01	-0.01	0.02	0.06	0.02	-0.07

12	1	-0.32	0.39	-0.43	-0.04	0.06	-0.06	0.23	-0.28	0.30
13	8	0.02	-0.02	-0.04	-0.01	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.02
14	1	-0.33	0.22	0.58	0.08	-0.05	-0.14	-0.20	0.13	0.35
15	1	0.01	0.03	-0.04	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.10	-0.09
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.04	0.01	0.01	0.05	-0.02	-0.02	0.02	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	-0.03	0.00	-0.01	0.05	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.01	0.04	0.02	0.00	0.03	0.02	0.00	0.03	0.01
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
25	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	-0.01	0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	8	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.02
29	1	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.03
30	1	-0.09	0.04	-0.12	0.02	-0.01	0.02	-0.24	0.10	-0.31
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.02
33	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.01	0.05	-0.05	0.03
34	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.03
36	1	0.02	0.03	-0.04	-0.01	-0.02	0.02	0.01	0.02	-0.01
37	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	1	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.01
39	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

41	1	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.03	-0.01	-0.01	-0.02
42	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00
45	1	0.01	0.00	0.00	-0.06	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01
46	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
47	1	-0.06	-0.05	0.04	-0.03	-0.02	0.02	0.08	0.06	-0.04
48	1	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.01	-0.05	0.00
49	8	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
50	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.02	-0.02	-0.03	0.02
51	1	-0.01	0.01	0.09	0.00	0.01	0.02	0.01	-0.02	-0.12
		124			125			126		
		A			A			A		
Frequencies --		3549.0138			3555.4327			3569.6101		
Red. masses --		1.0581			1.0591			1.0507		
Frc consts --		7.8520			7.8881			7.8877		
IR Inten --		439.4645			547.4740			489.0897		
Raman Activ --		65.8795			60.2187			91.5172		
Depolar (P) --		0.2306			0.6435			0.2056		
Depolar (U) --		0.3748			0.7831			0.3410		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.02	0.01	-0.01
2	1	-0.04	-0.03	0.03	0.07	0.05	-0.04	-0.27	-0.20	0.17
3	1	-0.22	-0.10	-0.23	-0.12	-0.06	-0.12	0.03	0.01	0.02
4	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.02
5	1	0.02	0.03	0.03	0.04	0.07	0.08	0.25	0.41	0.44
6	1	0.02	-0.02	-0.01	0.07	-0.08	-0.02	0.32	-0.39	-0.08
7	8	-0.04	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
8	1	0.75	-0.03	-0.28	0.14	-0.01	-0.05	-0.09	0.00	0.03

9	1	-0.09	0.25	0.02	-0.02	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00
10	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	0.00	0.00	0.01	0.05	0.02	-0.06	-0.01	-0.01	0.02
12	1	0.02	-0.02	0.02	0.07	-0.09	0.10	-0.03	0.04	-0.04
13	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
14	1	0.01	-0.01	-0.03	-0.17	0.11	0.29	0.04	-0.03	-0.08
15	1	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.03	0.02	0.00	-0.01	0.01
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
18	1	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.04	-0.01	-0.01
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.01	0.06	0.03	-0.01	-0.06	-0.03	0.00	0.00	0.00
24	1	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	0.02	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	0.04
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
28	8	0.01	0.00	0.01	-0.03	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
29	1	-0.03	-0.04	0.04	0.06	0.10	-0.10	0.00	0.00	0.00
30	1	-0.15	0.06	-0.19	0.48	-0.20	0.62	-0.03	0.01	-0.04
31	8	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	0.02	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.01
33	1	-0.14	0.15	-0.09	-0.05	0.06	-0.03	0.01	-0.01	0.01
34	8	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
35	1	0.01	0.00	0.02	-0.03	0.00	-0.04	-0.03	0.01	-0.05
36	1	-0.02	-0.02	0.02	0.07	0.10	-0.09	-0.01	-0.02	0.02
37	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

38	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
39	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
40	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.01	0.01	0.02	0.02	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00
42	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	8	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
44	1	0.08	0.18	0.01	0.02	0.05	0.00	-0.02	-0.03	0.00
45	1	0.04	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.30	-0.03	0.06
46	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
47	1	0.00	0.00	0.00	0.06	0.05	-0.03	0.07	0.06	-0.04
48	1	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.05	0.00	0.04	-0.15	0.00
49	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01
50	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.02	-0.03	-0.03	0.02
51	1	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.02	-0.10	-0.01	0.02	0.07
		127			128			129		
		A			A			A		
Frequencies --		3585.3709			3597.9025			3602.4111		
Red. masses --		1.0549			1.0619			1.0785		
Frc consts --		7.9895			8.0988			8.2460		
IR Inten --		258.7925			327.4929			256.0387		
Raman Activ --		49.2275			63.1669			109.2527		
Depolar (P) --		0.4663			0.5499			0.4167		
Depolar (U) --		0.6360			0.7096			0.5883		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	-0.05	-0.03	0.03	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
3	1	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.03	-0.06
4	8	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.03	0.05	0.06	-0.02	-0.03	-0.04	-0.02	-0.03	-0.03

6	1	0.06	-0.08	-0.02	0.08	-0.09	-0.02	-0.01	0.02	0.00
7	8	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.05	-0.01
8	1	-0.03	0.00	0.01	-0.07	0.00	0.02	-0.26	-0.01	0.09
9	1	-0.02	0.07	0.01	-0.05	0.18	0.01	-0.23	0.79	0.07
10	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	-0.02	-0.01	0.02	-0.02	-0.01	0.02	0.02	0.01	-0.02
12	1	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.02
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
15	1	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.01
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.02	0.02	0.01	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.06	0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.05	0.01	0.01
21	1	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
22	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	-0.02
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00
29	1	0.01	0.02	-0.02	0.22	0.29	-0.26	-0.06	-0.08	0.07
30	1	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	-0.03	-0.01	0.01	-0.02
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00
32	1	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.02	-0.05	0.15	-0.08	-0.18
33	1	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.17	-0.18	0.11
34	8	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.01

35	1	0.02	-0.01	0.03	0.45	-0.11	0.67	-0.09	0.02	-0.13
36	1	0.01	0.01	-0.01	0.07	0.13	-0.12	-0.02	-0.04	0.03
37	8	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	1	0.00	-0.03	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
39	1	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
42	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
44	1	0.00	0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	0.06	0.14	0.01
45	1	0.07	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.01
46	8	0.04	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	-0.53	-0.43	0.30	0.03	0.02	-0.01	0.07	0.05	-0.04
48	1	-0.07	0.27	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01	-0.04	0.00
49	8	0.00	0.01	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
50	1	-0.07	-0.07	0.05	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	-0.02	0.01
51	1	0.06	-0.11	-0.53	-0.01	0.02	0.08	0.00	-0.01	-0.03
		130			131			132		
		A			A			A		
Frequencies --		3609.9201			3617.5192			3622.6701		
Red. masses --		1.0762			1.0594			1.0496		
Frc consts --		8.2634			8.1681			8.1155		
IR Inten --		120.8466			618.0353			497.0492		
Raman Activ --		117.1876			188.2138			61.8081		
Depolar (P) --		0.2035			0.1062			0.4392		
Depolar (U) --		0.3381			0.1920			0.6104		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00

3	1	0.02	0.01	0.02	-0.02	-0.01	-0.02	0.02	0.01	0.01
4	8	0.01	-0.05	-0.03	0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.01	0.01
5	1	0.18	0.26	0.30	0.13	0.20	0.23	-0.06	-0.10	-0.11
6	1	-0.39	0.45	0.09	-0.21	0.25	0.05	0.07	-0.08	-0.02
7	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
8	1	0.03	0.00	-0.01	-0.13	0.00	0.05	-0.17	0.01	0.06
9	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.05	0.00	0.02	-0.05	0.00
10	8	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01
11	1	0.06	0.02	-0.07	-0.09	-0.03	0.10	0.06	0.02	-0.06
12	1	-0.06	0.08	-0.08	0.08	-0.10	0.11	-0.04	0.05	-0.06
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	0.02	-0.01	-0.03	-0.03	0.02	0.05	0.01	0.00	-0.02
15	1	-0.01	-0.04	0.04	0.01	0.05	-0.04	-0.01	-0.04	0.04
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
18	1	0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.03	0.00	0.01	-0.08	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01
22	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.04	-0.02
24	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
25	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.03	0.03	-0.03	0.02	0.02	-0.02	-0.02	-0.02	0.02
30	1	-0.02	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.02	-0.04	0.02	-0.06
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.01	-0.02	0.04

32	1	-0.04	0.02	0.04	0.22	-0.12	-0.25	0.31	-0.17	-0.34
33	1	0.03	-0.04	0.02	-0.21	0.22	-0.12	-0.42	0.46	-0.25
34	8	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.08	-0.02	0.11	-0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.01	-0.02
36	1	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.02	-0.01	-0.03	-0.05	0.04
37	8	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	1	0.00	0.02	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
39	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	-0.01	-0.01	-0.02	0.04	0.02	0.07	0.04	0.02	0.07
42	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.01
43	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	1	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.04	0.00
45	1	-0.06	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
46	8	-0.01	0.02	0.00	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01
47	1	0.09	0.09	-0.05	-0.25	-0.20	0.14	0.15	0.12	-0.08
48	1	0.11	-0.36	-0.01	-0.01	0.06	0.00	0.02	-0.08	0.00
49	8	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	0.01	0.01
50	1	0.02	0.03	0.00	0.21	0.22	-0.15	-0.13	-0.14	0.09
51	1	0.05	-0.10	-0.44	-0.06	0.09	0.44	0.04	-0.06	-0.30

133

134

135

A

A

A

Frequencies --	3641.9086	3661.7306	3674.0324
Red. masses --	1.0618	1.0459	1.0727
Frc consts --	8.2973	8.2622	8.5314
IR Inten --	233.2527	106.7981	174.5080
Raman Activ --	135.2718	22.9626	103.9005
Depolar (P) --	0.1960	0.2769	0.4752
Depolar (U) --	0.3278	0.4337	0.6443

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
2	1	0.02	0.02	-0.02	-0.10	-0.07	0.06	-0.01	-0.01	0.01
3	1	-0.02	-0.01	-0.02	0.05	0.02	0.04	0.00	0.00	0.00
4	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01
5	1	-0.01	-0.03	-0.03	0.05	0.10	0.10	-0.05	-0.07	-0.09
6	1	-0.02	0.03	0.01	0.11	-0.13	-0.03	0.01	-0.01	0.00
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
8	1	0.03	0.00	-0.01	-0.07	0.01	0.03	-0.01	0.00	0.00
9	1	-0.02	0.05	0.00	0.04	-0.12	-0.01	0.00	0.00	0.00
10	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.02
11	1	0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.30	-0.10	0.36
12	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.02	0.02
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02
14	1	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.03	-0.05
15	1	0.00	-0.03	0.02	0.00	-0.04	0.03	0.03	0.36	-0.28
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
18	1	0.05	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.05	0.01	0.01
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	-0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	-0.04	0.05	0.06	0.03	-0.04	-0.06	-0.01	0.01	0.02
27	1	0.00	0.02	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00
28	8	-0.02	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01

29	1	0.39	0.52	-0.46	0.04	0.05	-0.04	0.07	0.09	-0.08
30	1	-0.07	0.01	-0.07	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	-0.02	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01
33	1	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.01	-0.01
34	8	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02
35	1	-0.18	0.05	-0.29	-0.01	0.01	-0.03	-0.12	0.02	-0.17
36	1	-0.19	-0.30	0.26	-0.05	-0.08	0.07	0.14	0.21	-0.18
37	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.03
39	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
42	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
43	8	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00
44	1	-0.03	-0.06	0.00	0.27	0.53	0.02	0.03	0.06	0.00
45	1	0.07	-0.01	0.02	-0.70	0.07	-0.16	-0.06	0.01	-0.01
46	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00
47	1	0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	-0.11	-0.07	0.06
48	1	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.15	-0.48	-0.01
49	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01
50	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.18	-0.20	0.12
51	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01
		136			137			138		
		A			A			A		
Frequencies --		3688.3594			3695.4122			3698.6733		
Red. masses --		1.0760			1.0840			1.0799		
Frc consts --		8.6241			8.7218			8.7041		
IR Inten --		530.9313			1075.2676			2536.4686		

Raman Activ -- 53.6522 35.0515 18.7465

Depolar (P) -- 0.6115 0.5828 0.5516

Depolar (U) -- 0.7590 0.7365 0.7110

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.01
3	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
4	8	0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.10	0.15	0.17	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	-0.05	-0.05
6	1	-0.18	0.21	0.04	-0.02	0.03	0.01	-0.01	0.02	0.00
7	8	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00
8	1	-0.01	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.08	0.04	0.00	-0.01
9	1	0.00	-0.01	0.00	-0.08	0.27	0.02	0.03	-0.10	-0.01
10	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
11	1	-0.06	-0.02	0.07	0.04	0.01	-0.05	-0.08	-0.02	0.09
12	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.02	0.06	-0.07	0.08
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.02	-0.02
14	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.03	-0.06	0.05	0.10
15	1	0.01	0.07	-0.05	-0.01	-0.10	0.08	-0.03	-0.31	0.24
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
18	1	0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.02	0.00	0.01	0.07	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00
22	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	0.00	0.01	0.01
24	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
25	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

26	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.02
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
28	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
29	1	0.01	0.01	-0.01	-0.03	-0.04	0.04	-0.09	-0.11	0.10
30	1	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.05	-0.02	0.06
31	8	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.04	-0.02	-0.01	0.01	0.00
32	1	0.00	0.00	0.00	-0.44	0.23	0.52	0.09	-0.05	-0.11
33	1	0.00	0.00	0.00	-0.31	0.34	-0.21	0.10	-0.11	0.07
34	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.03
35	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02	0.12	-0.02	0.17
36	1	0.03	0.05	-0.04	-0.03	-0.04	0.04	-0.23	-0.34	0.29
37	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	1	0.00	0.01	0.05	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01	0.03
39	1	-0.03	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
40	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.04
42	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
43	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
44	1	0.01	0.02	0.00	0.02	0.05	0.00	0.01	0.02	0.00
45	1	-0.02	0.00	0.00	0.04	-0.01	0.01	0.07	-0.01	0.02
46	8	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.03	-0.01
47	1	0.12	0.08	-0.06	-0.07	-0.05	0.04	-0.19	-0.14	0.10
48	1	-0.15	0.49	0.01	0.03	-0.10	0.00	0.11	-0.36	-0.01
49	8	0.03	0.03	-0.03	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.01	-0.02
50	1	-0.45	-0.49	0.28	-0.05	-0.06	0.03	-0.24	-0.26	0.15
51	1	-0.01	0.05	0.15	-0.01	0.03	0.12	-0.02	0.05	0.19

139

140

141

A

A

A

Frequencies -- 3715.4777

3730.7332

3732.9246

Red. masses --	1.0721	1.0810	1.0699
Frc consts --	8.7197	8.8643	8.7842
IR Inten --	191.6324	810.9642	46.1910
Raman Activ --	34.7714	46.9813	64.6957
Depolar (P) --	0.3000	0.5724	0.1142
Depolar (U) --	0.4615	0.7281	0.2050

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	0.01	0.01	-0.01	0.08	0.06	-0.05	-0.05	-0.04	0.03
3	1	-0.01	0.00	-0.01	0.09	0.04	0.09	0.00	0.00	0.00
4	8	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.01	0.02	0.02	-0.03	-0.06	-0.07	0.00	0.01	0.01
6	1	0.01	-0.01	0.00	-0.07	0.09	0.02	0.01	-0.02	0.00
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
8	1	-0.03	0.00	0.01	-0.08	0.01	0.03	0.03	0.00	-0.01
9	1	-0.01	0.04	0.00	0.05	-0.13	-0.01	-0.01	0.03	0.00
10	8	0.02	0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.01	-0.02	-0.01	0.03
11	1	-0.38	-0.13	0.45	0.11	0.04	-0.12	0.34	0.12	-0.40
12	1	0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.01	-0.01	-0.03	0.02	-0.01
13	8	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.03	0.03
14	1	-0.04	0.02	0.07	0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.03	-0.02
15	1	0.02	0.25	-0.20	0.01	0.16	-0.12	0.05	0.51	-0.41
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

23	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.01
27	1	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
28	8	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01
29	1	-0.08	-0.10	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.06	0.05
30	1	0.09	-0.03	0.10	0.02	-0.01	0.03	0.07	-0.03	0.09
31	8	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	-0.06	0.03	0.07	0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.00	-0.01
33	1	-0.04	0.04	-0.03	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
34	8	0.01	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.02
35	1	0.12	-0.02	0.16	0.01	0.00	0.02	0.07	-0.01	0.09
36	1	-0.22	-0.34	0.28	-0.02	-0.03	0.02	-0.15	-0.23	0.19
37	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	1	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
39	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.01	0.01	0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	-0.02	-0.06
42	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.02
43	8	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.04	-0.01	0.01	0.01	0.00
44	1	0.00	0.00	0.00	0.30	0.66	0.02	-0.08	-0.17	0.00
45	1	0.03	0.00	0.01	0.55	-0.08	0.13	-0.14	0.02	-0.03
46	8	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
47	1	0.16	0.12	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.07	0.05
48	1	-0.06	0.19	0.01	0.00	0.01	0.00	0.03	-0.10	0.00
49	8	-0.01	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
50	1	0.13	0.15	-0.08	0.02	0.02	-0.01	-0.06	-0.07	0.04
51	1	0.02	-0.05	-0.19	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.03	0.11

	142			143			144			
	A			A			A			
Frequencies --	3939.6204			3943.8264			3944.2337			
Red. masses --	1.0660			1.0659			1.0661			
Frc consts --	9.7477			9.7684			9.7722			
IR Inten --	76.4881			69.6208			74.8572			
Raman Activ --	78.8028			60.9509			104.3086			
Depolar (P) --	0.2409			0.4999			0.1266			
Depolar (U) --	0.3883			0.6666			0.2247			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.02	0.00
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00
10	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.02	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.07	-0.08	-0.02
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.05	-0.03	0.01	0.02	0.01

20	1	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00
21	1	0.00	0.01	0.01	0.15	0.80	0.42	-0.06	-0.34	-0.18
22	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
25	8	0.02	-0.06	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	-0.01	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	-0.29	0.89	-0.34	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
28	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	-0.01	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.01
33	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
34	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	8	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.01	-0.05	0.01	0.02
38	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.03	-0.01	-0.04
39	1	-0.01	0.00	0.00	0.36	-0.08	-0.14	0.83	-0.18	-0.33
40	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
41	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
42	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01
43	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	1	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
46	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00

49	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	
51	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	
		145			146			147			
		A			A			A			
Frequencies --		3945.4227			3949.5186			3952.6847			
Red. masses --		1.0660			1.0660			1.0666			
Frc consts --		9.7763			9.7971			9.8180			
IR Inten --		83.1811			74.1645			70.2452			
Raman Activ --		100.4646			96.9305			104.0086			
Depolar (P) --		0.1712			0.2102			0.1930			
Depolar (U) --		0.2923			0.3474			0.3236			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
2	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
3	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
4	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
5	1	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
6	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
7	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
8	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	
9	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
10	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
11	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	-0.02	
12	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
13	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
14	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
15	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	
16	8	-0.04	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	

17	1	0.63	0.73	0.22	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00
18	1	0.03	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1	-0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01
22	8	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
23	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.04	0.01	0.00	0.00	0.00
24	1	0.02	0.00	0.01	0.96	0.11	0.23	-0.04	-0.01	-0.01
25	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	-0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
28	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	1	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
30	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
31	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
32	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
33	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.00
34	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
35	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
36	1	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	8	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
38	1	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
39	1	0.09	-0.02	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
40	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	-0.05
41	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03	0.03
42	1	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	0.04	-0.35	-0.49	0.79
43	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
44	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
45	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

46	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
47	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
48	1	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
49	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
50	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
51	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Part 4. Raman spectra for deuterated rest of the water molecules apart and C4CW molecule.

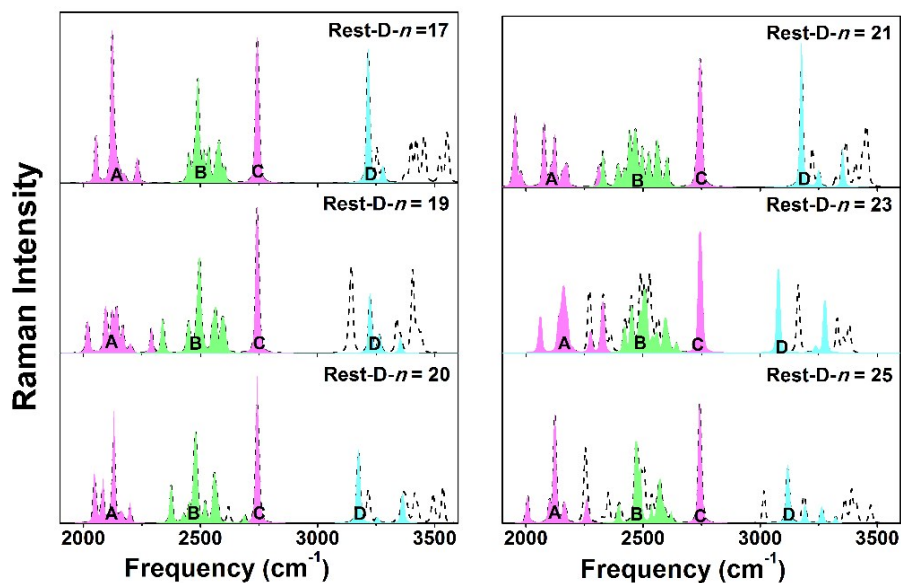


Fig. S1. Raman spectra for O-H bond stretching vibrations in deuterated rest of the water molecules apart. The black dashed lines show features from all bonds in entire clusters. Part A is from those H-bonded ones whose oxygen atoms possess the other H atom dangling outside the cluster. Part B is from those in the undercoordinated water molecules without dangling O-H groups and the sharp Part C corresponds to the dangling ones. Part D is from bonds belonging to the C4CW molecule.

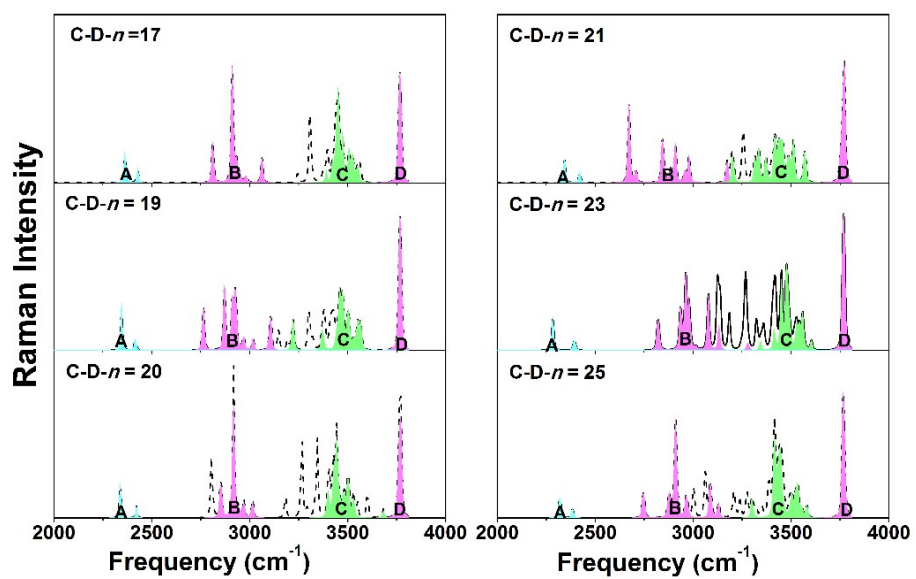


Fig. S2. Raman spectra for O-H bond stretching vibrations in deuterated C4CW molecule. The black dashed lines show features from all bonds in entire clusters. Part A is from bonds belonging to the C4CW molecule. Part B is from those H-bonded ones whose oxygen atoms possess the other H atom dangling outside the cluster. Part C is from those in the undercoordinated water molecules without dangling O-H groups and the sharp Part D corresponds to the dangling ones.